

## Ayuda para el acceso al sistema automático de los espectrómetros Mercury400.

1. **El equipo:** Previo al acceso, el usuario tiene una ventana de información con las posiciones del cambiador ya programadas y las que están disponibles.
2. **Entrada al sistema:** Aproximar la tarjeta de acceso al lector, situado en las proximidades del equipo. Si el acceso está autorizado \* se abrirá la pantalla para la programación de la muestra.

The screenshot shows the Vnmrj software interface with several annotated components:

- Paneles de experimentos:** Points to the 'Experiment Panel' on the left, which lists various pulse programs like PROTON, CARBON, PRESAT, etc.
- Información sobre la muestra y para el ajuste de condiciones:** Points to the 'Study Queue' window showing a sample named 'quinina'.
- Envío de la muestra al sistema:** Points to the 'View: Submit Queue' window with a 'Submit' button.
- Información sobre el cambiador:** Points to a grid of 50 numbered circles representing the sample changer positions.
- Entradas para la información de la muestra:** Points to the 'Sample Preparation' section at the bottom right, where fields for sample name, solvent, and other parameters are entered.
- Información de la actividad del equipo:** Points to the status bar at the bottom showing 'Temp 23.0 C', 'Spin 0 Hz', 'Lock 0.1', 'Sample 33', and 'Probe ATB'.
- Mensajes del sistema (avisos y errores):** Points to a yellow message bar at the bottom right containing the text '\*\*\*vsubmitQ final'.

**\*Nota:** El acceso se obtiene una vez realizado el curso básico y es válido para todos los equipos de campo medio (400 MHz) que funcionan en modo automático.

### 3. Introducción de los datos de la muestra

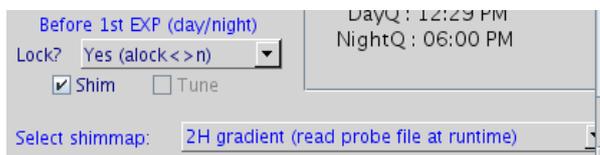
El Panel **Start**, situado en la parte inferior de la pantalla permite la introducción los datos referentes a la muestra y seleccionar las condiciones comunes para todos los experimentos que se programen con la muestra.

- Los datos del usuario proceden de la tarjeta de acceso.
- Seleccionar el disolvente (es importante hacerlo antes de poner el nombre de la muestra).
- Introducir el nombre de la muestra y pulsar la tecla de **enter** para que el sistema genere el texto. Recordar que no pueden utilizarse caracteres como: **# @/ \*** y otros símbolos parecidos.

- Si de desea que una vez concluido el espectro, el resultado se imprima el usuario debe marcar la opción de **Autoplot**

#### 4. Ajuste de lock y homogeneidad

El usuario puede escoger entre distintas opciones relacionadas con el lock y el ajuste de homogeneidad, según sean las características de la muestra. Las condiciones más frecuentes son: lock automático activo, ajuste de homogeneidad (✓ Shim) y utilización del mapa de gradientes de deuterio. No obstante, el sistema puede hacer las muestras sin ajustar el lock o/y sin ajustar la homogeneidad. El desplegable de la parte inferior permite seleccionar el mapa de gradientes a utilizar. La opción más frecuente será el de 2H, pero si está disponible puede seleccionarse el de 1H en el caso muestras en D2O.



#### 5. Situar la muestra en el cambiador

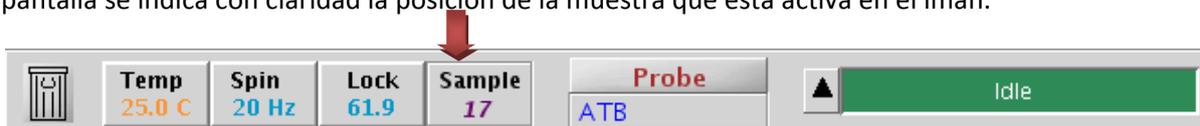
Una vez ajustadas la condiciones generales y antes de programar los experimentos, el usuario debe poner la muestra en la bandeja del cambiador. Este paso debe hacerse siempre antes de hacer el Submit de la muestras, el es rápido y puede ser que el cambiador vaya a buscar la muestra antes de que esté puesta en la bandeja.

Poner el tubo en un spinner, asegurándose que el tubo está bien cerrado y que tanto él como el spinner están limpios (para evitar contaminar el equipo). Ajustar con cuidado la altura del tubo en el spinner, no forzando la introducción para que el tubo no se rompa.



Situar el tubo-spinner en la posición del cambiador que nos indica el equipo

No utilizar nunca, la posición que corresponde a la muestra que está en el Imán. En la parte inferior de la pantalla se indica con claridad la posición de la muestra que está activa en el imán.

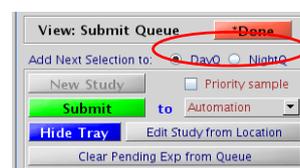


Un fallo en la colocación de la muestra en la bandeja del cambiador puede ocasionar la rotura de las muestras implicadas y una parada del sistema.

Tampoco debe ponerse el tubo en la posición de emergencia, en el caso de ver una muestra en esta posición debe retirarse de inmediato.

#### 6. Indicar si los experimentos que se programan son de día o de noche

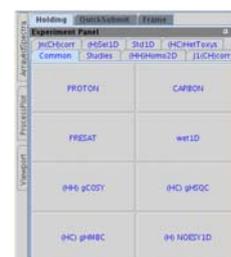
Esta elección debe realizarse previamente a la selección de los experimentos a realizar y al ajuste de las condiciones de adquisición. El cambio de selección día/noche, una vez se ha completado la programación de la muestra implica la pérdida de las condiciones y obligará al usuario a repetir todo el proceso.



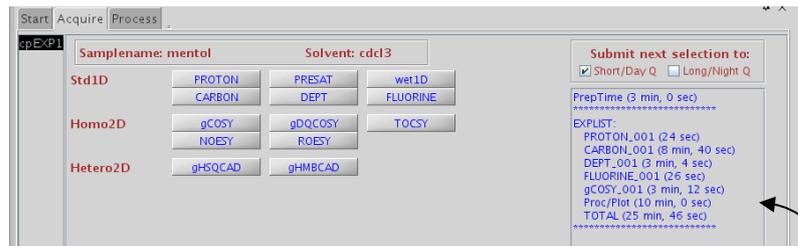
#### 7. Selección de los experimentos de RMN

El usuario tiene dos opciones:

- Utilizar uno de los paneles de la izquierda de la pantalla



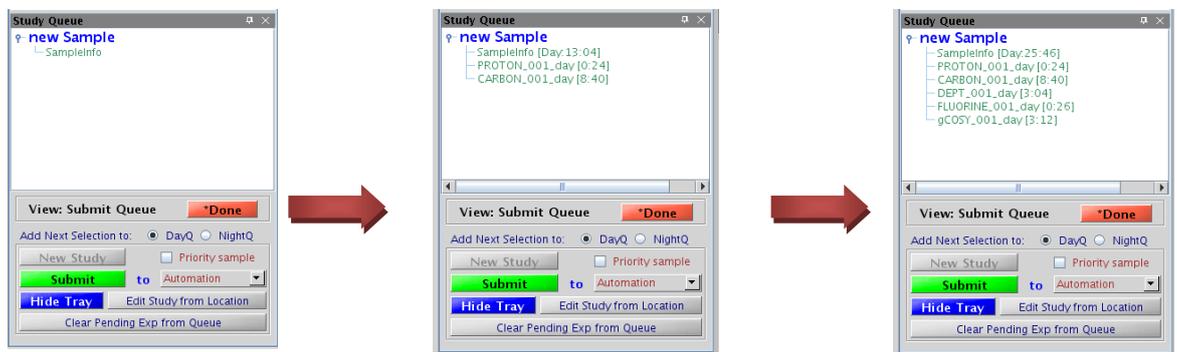
- Acceder al panel de acceso rápido mediante la pestaña **Acquire** situada en la parte inferior de la pantalla. Esta opción permite acceder rápidamente y de un modo fácil a los experimentos más



utilizados

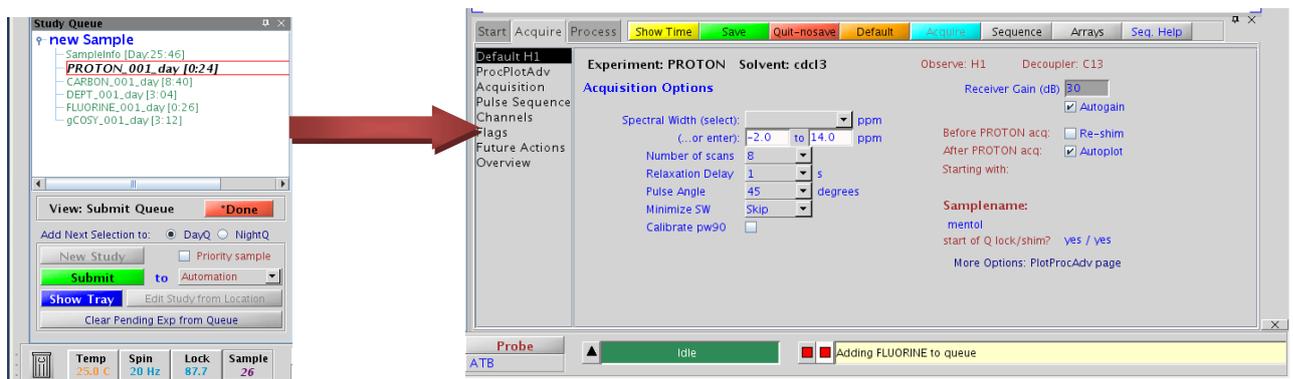
Conforme se van programando los experimentos, en la parte derecha del panel se genera una lista con los experimentos seleccionados indicando el tiempo parcial, sin son de día o de noche y el tiempo total.

Esta información también se puede visualizar en la parte izquierda de la pantalla, información que se actualiza conforme se seleccionan los experimentos



## 8. Ajuste de las condiciones de los experimentos programados.

- Sólo es necesario si se quieren modificar las condiciones que por defecto tiene el sistema:
  - o Protón: 8 acumulaciones D1=1 AT=2.6 s y pulso de 45 °
  - o <sup>13</sup>C: 256 acumulaciones D1=1s AT=1.3, pulso de 45° y desacoplamiento de banda ancha durante todo el proceso
- Si se quieren modificar las condiciones, basta con seleccionar el experimento en la ventana de **Study Queue** y hacer doble clic con el ratón. Al reajustar las condiciones debe tenerse en cuenta la disponibilidad de tiempo. Con la opción de Show Time se determina el tiempo que requiere el experimento.



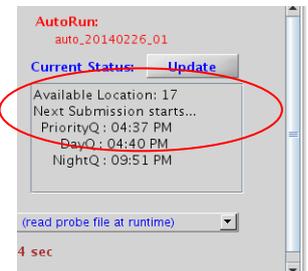
Si en la muestra también se tienen que programar experimentos de 2D, debe seleccionarse la opción Minimize SW en modo Auto. De este modo se reajusta automáticamente las ventanas espectrales para los experimentos 2D, lo que implica una mayor resolución digital y/o también un ahorro de tiempo.

## 9. Salvar las condiciones del experimento

Una vez ajustadas las condiciones debe hacerse **Save** para que el sistema las guarde y regresar a la pantalla de selección de experimentos. Si el número de acumulaciones y/o D1 hacen que el experimento supere el tiempo máximo del periodo, el sistema avisa y no se salva el exp.

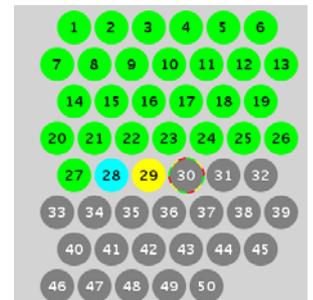
## 10. Seleccionar la posición del cambiador

Actualmente todos los sistemas realizan las muestras de un modo correlativo y el propio sistema asigna la posición del cambiador que debe utilizarse. La información de la posición se encuentra en la ventana principal en la parte derecha.



Código de colores utilizado:

- **Gris:** Posición disponible para la programación
- **Verde:** Muestra realizada correctamente y posición que puede ser reutilizada.
- **Amarillo:** Muestra programada y a la espera de ser realizada
- **Azul:** Muestra dentro del imán y en proceso de adquisición.
- **Lila:** Muestra programada para el turno de noche o fin de semana.
- **Rojo:** Muestra que ha fallado (problemas con el giro, lock son las causas más frecuentes).



Las posiciones que corresponden a las muestras realizadas correctamente (marcadas en verde) son reutilizables.

## 11. Revisiones finales.

### Comprobar:

- Los experimentos programados, asegurándose que no hay repeticiones no deseadas.
- Que el nombre de la muestra y el disolvente seleccionados son correctos y se corresponden con el que se indica en el texto (Recordar que para que se actualice este último campo es necesario hacer **enter** después de cada modificación)
- Que se ha seleccionado correctamente la opción día/noche.

## 12. Enviar los experimentos programados a la cola de adquisición.

Basta con activar la opción **Submit** que se encuentra en la pestaña del panel de muestras o en la parte inferior izquierda de la pantalla del VNMRJ



Si se ha terminado la programación hacer **QUIT SESSION** (ver punto 14)

### 13. Programación muestras adicionales (sin salir del sistema)

- *Condiciones y experimentos totalmente coincidentes*

Las condiciones de la primera muestra pueden aprovecharse para muestras posteriores del mismo usuario. Sólo será necesario cambiar el texto y/o disolvente (recordar hacer enter en el campo del nombre de la muestra para actualizar la información).

- *Nuevos experimentos.*

Activando la opción **NewSample** se borran los experimentos y condiciones de anteriores muestras. A partir de este momento se procede tal como se indica en el punto 5 y en adelante.

- *Modificación parcial de experimentos o condiciones.*

Para borrar un experimento basta con seleccionarlo y arrastrarlo a la papelera (parte inferior izquierda de la ventana del VNMRJ).

Para modificar las condiciones, se procede tal como se describe en los puntos 8 y 9.

### 14. Salida del sistema

Antes de salir del sistema comprobar que los experimentos programados han sido aceptados, círculos del "loc" en color amarillo y paso a azul si se inician de inmediato.

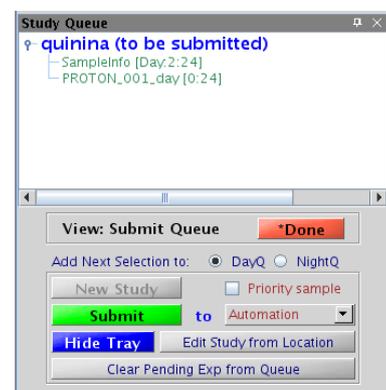
Para abandonar el sistema basta con activar la opción **QUIT SESSION**, ya sea la que se encuentra en la parte superior de la pantalla o la que está en la ventana del panel de la muestra. Si se activa la opción **Done** también se sale del sistema.

**En ningún caso cerrar el programa del VNMRJ**, ya sea haciendo **exit** desde el menú o desde la X que se encuentra en la parte superior derecha de la ventana global.

### 15. Edición de una muestra ya programada

En el caso de un error en la selección del disolvente o que sea necesario añadir un nuevo experimento, la muestra se puede editar. Esto sólo es posible en el caso de que los experimentos no se estén haciendo ya. Para ello, seleccionar la posición de la muestra en cuestión y activar la opción **Edit Study**. A continuación, hacer las modificaciones necesarias o añadir los experimentos complementarios. Debe finalizarse el proceso haciendo un **Submit** para que el sistema tenga en cuenta los cambios.

Salir del sistema según se indica en el punto 14.



## FAQ

- ¿Es posible reajustar las acumulaciones en los experimentos de  $^{13}\text{C}$  en función de la relación señal/Ruido?

**Si**, basta con activar la opción de Check SN e introducir el valor de la relación SN que se quiere alcanzar y la región en la que se calculara. Hay que tener en cuenta que el experimento se puede parar antes si el número de acumulaciones no es suficiente grande como para que se alcance el objetivo prefijado.

La posibilidad de fijar la zona donde se comprueba la relación SN da mucha fiabilidad a esta opción.



- Antes de enviar la muestra a la cola, he detectado que he duplicado los experimentos de protón. ¿Se puede eliminar?

**Si**, Para eliminar un experimento, antes de que se haya enviado a la cola, basta con seleccionarlo con el ratón y moverlo a la papelera.

- ¿Se puede eliminar una muestra ya programada?

**No** es posible eliminar muestras ya programadas.

- ¿Cómo puedo ver el estado del sistema?

Abrir una sesión y examinar las ventanas de la parte inferior del VNMRJ.

- Al pasar la tarjeta no se abre la sesión o aparece un mensaje de error o indica que la tarjeta es incorrecta. ¿Qué puedo hacer?

**No volver a pasar la tarjeta de un modo repetido y continuado.** Si el error se repite en un segundo intento, la opción es avisar al personal de la Unidad. Pasando varias veces la tarjeta hace que el ordenador se cargue de procesos y no responda, pudiendo pararse el sistema.

- El espectro estaba correctamente programado y en la impresora ha salido su registro, pero en el servidor no está el fichero. ¿Qué ha pasado?:

Comprobar si en el nombre de la muestra hay alguno de los caracteres prohibidos. En tal caso no hay solución.

Si el problema se debe a un fallo puntual de comunicaciones, el equipo dispone de una copia de seguridad que se mantiene unos días. Pasado un tiempo prudencial, solicitar al técnico el envío en modo manual.

Otro motivo del fallo en el envío puede ser por un problema grave en el ajuste de la fase o un exceso de ruido en el espectro.

- ¿En una misma muestra puedo programar un espectro de protón durante la cola de día y en la cola de noche programar el  $^{13}\text{C}$  y otros experimentos 2D?

**Si**. El sistema acepta esta doble programación. No obstante, puede ser peligroso ya que se corre el riesgo que otro usuario inadvertidamente saque la muestra del cambiador.

- ¿Se pueden enviar muestras prioritarias?

**No**. Esta opción no está permitida.