

 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80	IE16-12-FO80	Página 1 de 17 N° Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
--	--	--------------	--	---

GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER80

COPIA NO CONTROLADA

 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA	IE16-12-FO80	Página 2 de 17 Nº Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
	GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80			

INDICE

1. OBJETIVO

2. ALCANCE

3. DEFINICIONES

4. DESARROLLO

4.1. Características Fourier80

4.1.1. LED de estado

4.2. Manejo de la muestra

4.3. Adquisición

4.3.1. Configurar una adquisición

4.3.2. Ejecución de experimentos

4.3.3. Detener una adquisición

4.3.4. Pantalla de resultados de adquisición

4.4. Últimos datos (Latest Data)

4.5. Settings

4.5.1. Editar Experimentos

4.5.1.1. Crear un nuevo experimento a partir de uno existente

4.5.1.2. Ver/editar detalles de un experimento

4.6. Visualización y procesamiento de espectros

4.7. Transferencia de resultados al servidor FTP

 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA	IE16-12-FO80	Página 3 de 17 Nº Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
	GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80			

1. OBJETIVO.

Describir el procedimiento que deben seguir los Usuarios en régimen de autoservicio para la adquisición de espectros en el espectrómetro RMN Fourier 80 de Bruker ubicado en la Facultad de Farmacia con el software GoScan. Para una ayuda más precisa en la adquisición de espectros de rutina o experimentos de RMN más avanzados, consulta con el Técnico de la Unidad.

2. ALCANCE.

Este procedimiento es de aplicación en la unidad de RMN con sede en la Facultad de Farmacia.

3. DEFINICIONES.

Spinner: Portamuestras usado en RMN para introducir el tubo de la muestra en el espectrómetro.

4. DESARROLLO.

4.1. Características Fourier 80

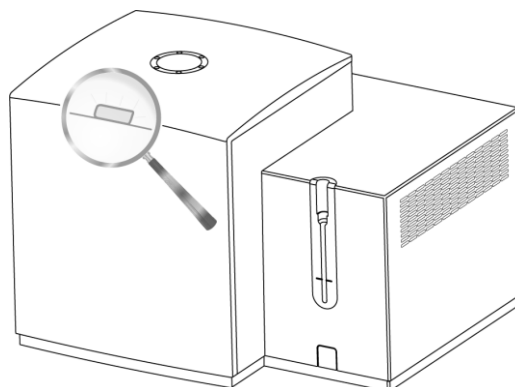
El Fourier 80 es un espectrómetro de sobremesa de resonancia magnética nuclear (RMN) de alto rendimiento de 80 MHz diseñado para el laboratorio de rutina en instalaciones de investigación o entornos universitarios. Entre las características más reseñables podemos destacar:

- Fácil instalación y con un consumo eléctrico muy bajo (<300 Watts).
- Tiene un imán permanente de alto rendimiento y libre de criogénicos.
- Equipado con sonda para medir protón y carbono.
- Permite hacer seguimiento de cinéticas, reacciones de síntesis, identificar compuestos en mezclas o verificar estructuras.
- Aunque tiene la posibilidad de automatización y de gradiente de campo pulsado, este equipo no dispone de esto.
- Dispone de GoScan, un software de manejo fácil y muy intuitivo.

Para más información sobre el espectrómetro, visite el enlace web <https://goo.su/K9GwE>

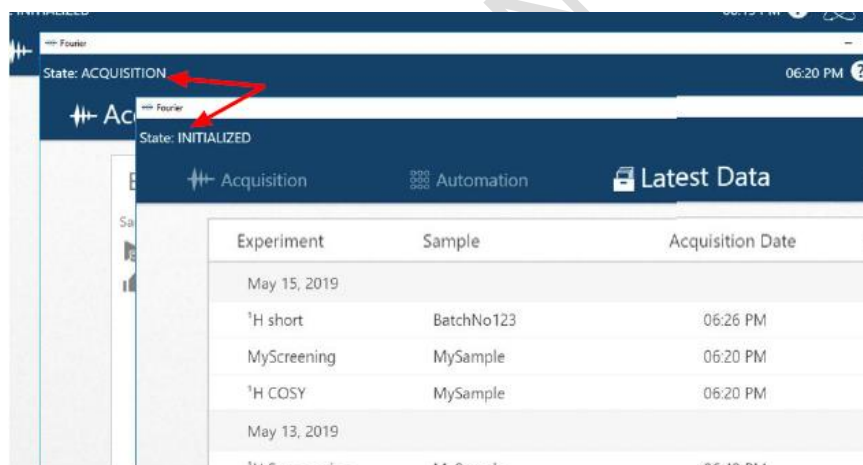
4.1.1. LED de estado

El espectrómetro tiene un LED de estado ubicado en la parte frontal, que puede tener los siguientes colores.



Color	Descripción del estado
Azul	Listo para operar.
Naranja	El dispositivo se está iniciando o aún no está lo suficientemente estable para realizar mediciones.
Rojo	Error.
Ninguno	Apagado.

El software GoScan también dispone de un indicador de estado.



4.2. Manejo de la muestra

Es la parte más crítica de la adquisición de los espectros. La rotura de un tubo al introducirlo en el imán puede ocasionar un daño irreparable o al menos muy costoso en el equipo. Por eso se ruega tener especialmente cuidado en el manejo de la muestra. A continuación, se describe el procedimiento a seguir.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

INSTRUCCIÓN
TÉCNICA ESPECÍFICA

IE16-12-FO80

GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE
FOURIER 80

Página 5 de 17
Nº Revisión: 1
21/03/2025



Centro de
Instrumentación
Científica



Muestra y soporte de muestra o spinner.



Inserte la muestra en el spinner desde arriba.



Inserte la muestra hasta que quede sumergida en el spinner.



Continúe tirando suavemente de la muestra hacia abajo hasta que sienta una ligera resistencia. No **se aleje** demasiado, pues podrá empujar el tapón hacia afuera y dejarla colgando en el spinner. Nota: Asegúrese de tener las manos limpias y secas y sujete el tubo por encima del nivel de la muestra para evitar contaminarlo.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

INSTRUCCIÓN
TÉCNICA ESPECÍFICA

IE16-12-FO80

GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE
FOURIER 80

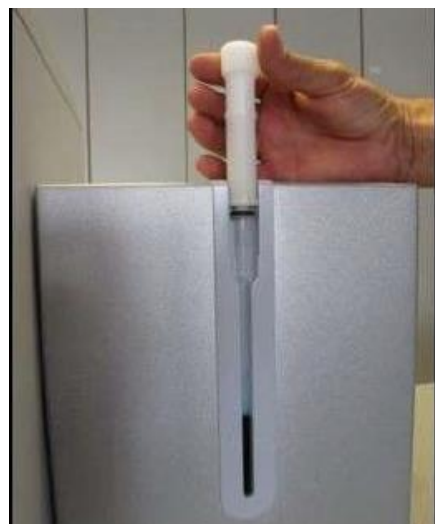
Página 6 de 17
Nº Revisión: 1
21/03/2025



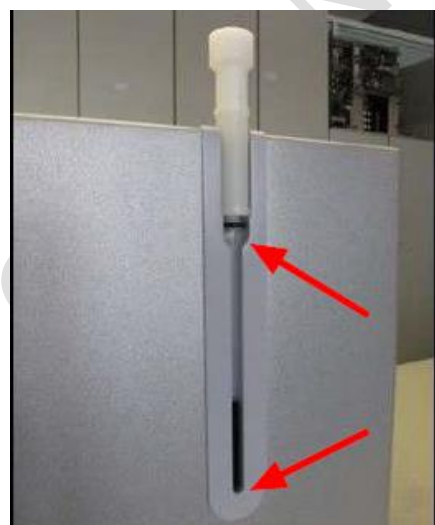
Centro de
Instrumentación
Científica



Mueva con cuidado el spinner y la muestra desde arriba hacia el interior del medidor de muestra en la carcasa.



Introduzca lentamente el spinner en la carcasa.



Mueva el spinner hasta el tope del medidor, el tubo de la muestra debe estar ahora apoyado en la parte inferior del medidor.

 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA	IE16-12-FO80	Página 7 de 17 Nº Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
	GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80			



Tenga en cuenta que la muestra debe llenarse al menos hasta la marca de graduación (5 cm de altura), pero no es conveniente que exceda demasiado esta marca. Con 700 μ l de disolución es suficiente.

Nota sobre los tubos: Los tubos de 7 pulgadas de largo pueden utilizarse con los tapones estándar que se entregan con los tubos o bien con los llamados tapones codificados. Debido a la posición de la bobina de RF dentro del imán, se necesita casi toda la longitud del tubo para colocar la muestra correctamente. Por tanto, si el tubo está lo más mínimamente dañado o roto en la parte superior, no se puede introducir en el equipo. No escriba nada en el tubo. **Se recomienda comprar tubos de 8 pulgadas de largo.**

4.3. Adquisición

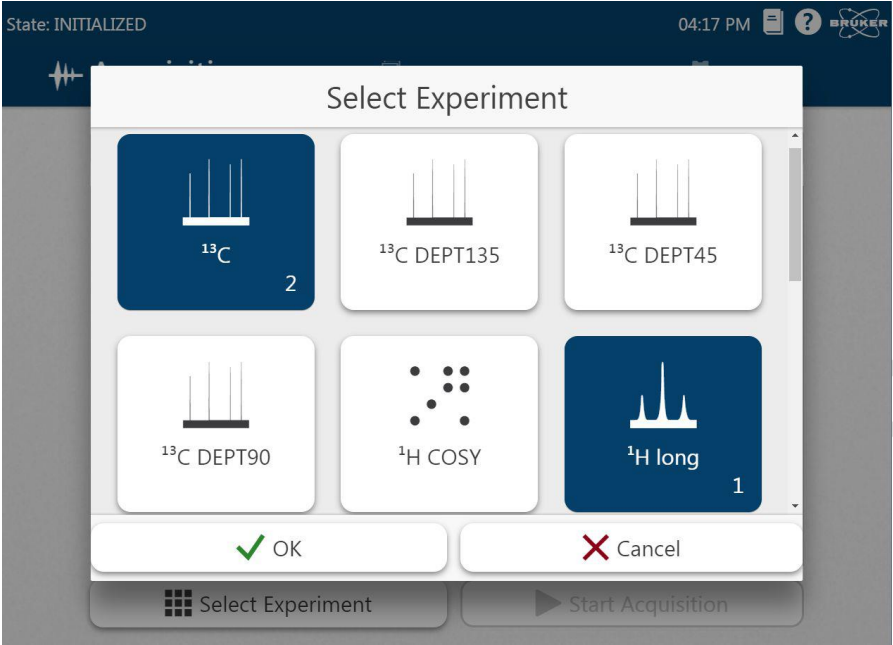
En la carpeta “*Manuales y videos Fourier80*” ubicada en el escritorio de Windows hay un video llamado “*Fourier How To Start Experiments.mp4*” que explica cómo se adquieren los espectros.

4.3.1. Configurar una adquisición

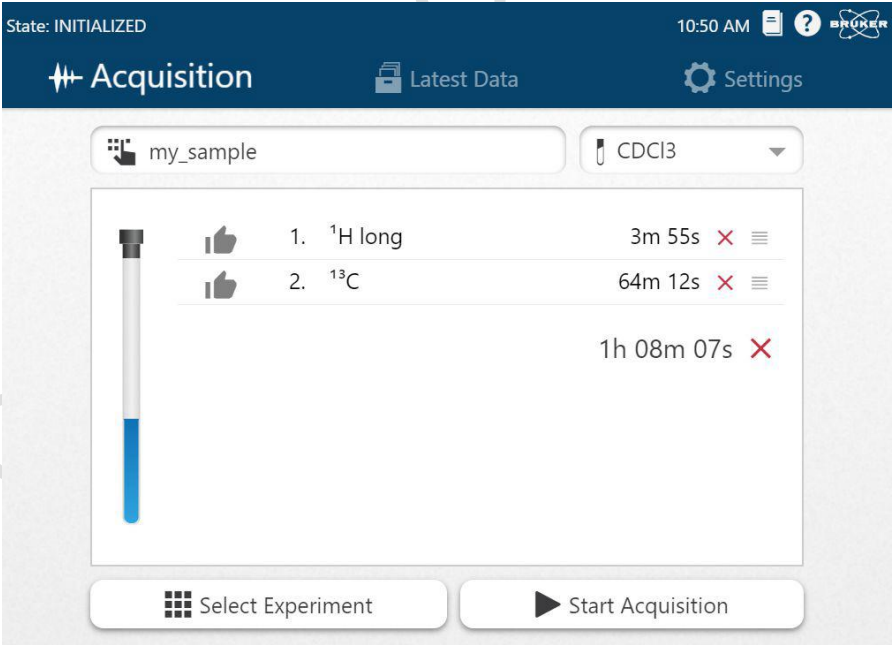
La adquisición de experimentos se realiza a través de la pestaña **Acquisition**. Para realizar una adquisición, es necesario especificar el nombre de la muestra y seleccionar el disolvente. Si se quiere realizar un espectro en un disolvente sin deuterar, elegir “None” en la pestaña de disolvente.



A continuación, se deben seleccionar los experimentos que se van a ejecutar. La lista de experimentos disponibles se puede abrir haciendo clic en el botón **Select Experiment**. Esto abrirá un nuevo cuadro de diálogo donde se pueden seleccionar los experimentos.



Los experimentos se ejecutarán en el orden seleccionado, aunque se pueden reordenar arrastrando y soltando el  icono en la ubicación deseada.



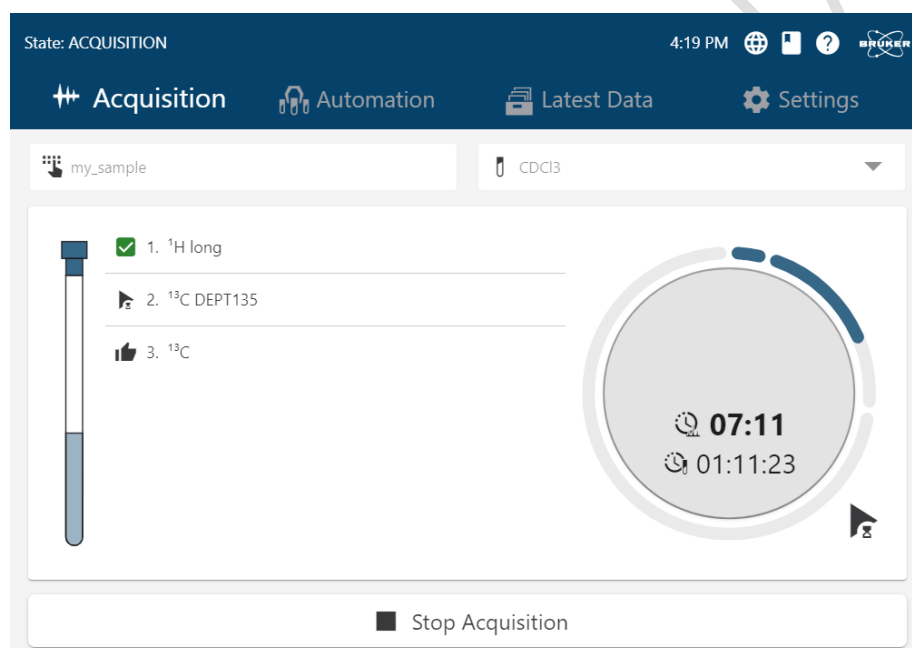
Si la preparación de un experimento falla, esto se indicará con un icono. El significado de cada icono se resume en la siguiente tabla.

Icon	Meaning
	The experiment was prepared successfully.
	Preparation of the experiment failed.

4.3.2. Ejecución de experimentos

Cuando se hayan preparado todos los experimentos deseados, se puede iniciar la adquisición con el botón **Start Acquisition**.

Durante la adquisición, el estado del sistema cambiará a ACQUISITION.

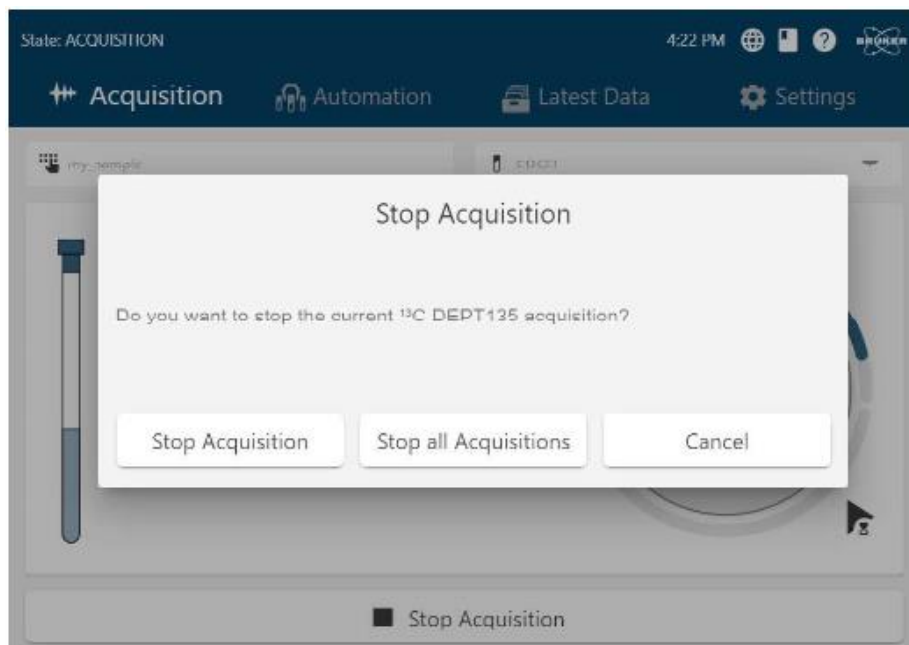


La vista cambiará para mostrar el progreso de la adquisición (figura superior). En el lado izquierdo de la pantalla, se muestra la lista de experimentos y el estado de cada uno de ellos se indica mediante un icono. El significado de cada icono se resume en la siguiente tabla.

Icon	Meaning
	The experiment is successfully prepared and is queued.
	The experiment is currently being acquired.
	Sample is being locked.
	Sample is tuned and matched (Avance only).
	Sample is shimmed (Avance only).
	Experiment is being stopped.
	Experiment was skipped.
	The acquisition of the experiment was interrupted.
	Experiment is paused.
	The experiment was successfully acquired.
	The experiment was acquired while the system was in an unstable state (Fourier only) or ATMA and/or TopShim failed (Avance only).
	The acquisition of the experiment failed or locking on an Avance system failed.

4.3.3. Detener una adquisición

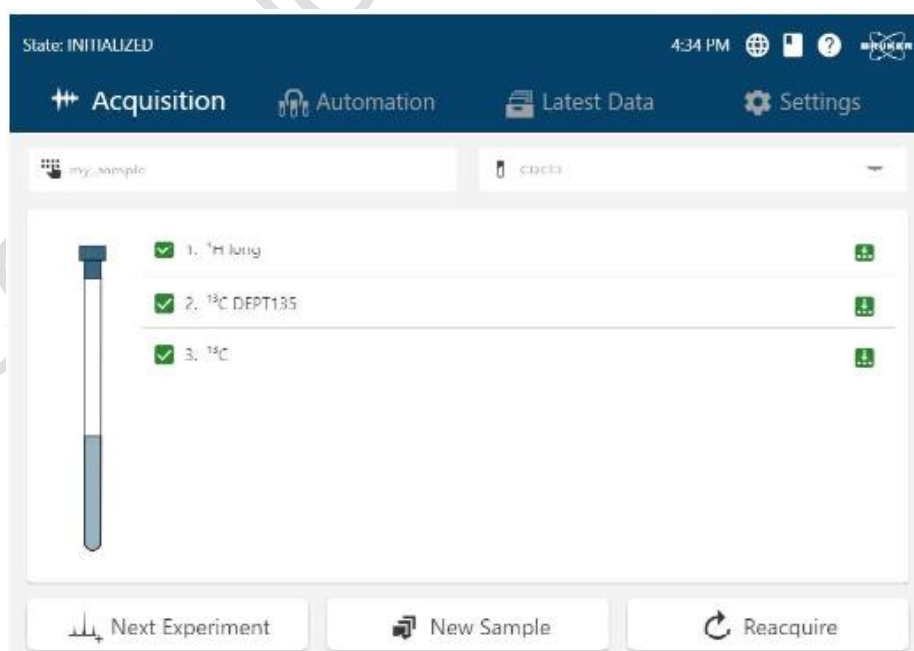
Se puede detener una adquisición con el botón **Stop Acquisition** en la parte inferior de la pantalla. Esto abrirá una ventana de diálogo donde el usuario puede elegir si se debe detener el experimento que se está ejecutando actualmente o detener toda la cola de experimentos. Si se selecciona la primera opción, se adquirirá el experimento siguiente después de que se interrumpa el actual. Si se selecciona la segunda opción, se detendrá el experimento actual y se omitirán todos los experimentos posteriores.



En la carpeta “*Manuales y videos Fourier80*” del escritorio de Windows se puede encontrar un vídeo con el nombre “*Fourier How To Stop Experiments.mp4*” de cómo detener experimentos.

4.3.4. Pantalla de resultados de adquisición

Cuando todos los experimentos de la cola hayan finalizado o se hayan detenido, se mostrará un mensaje de aviso y el usuario pasará a la pantalla de resultados de la adquisición:



El icono que se encuentra a la izquierda del nombre del experimento en la tabla de resultados indica si la adquisición del experimento se realizó correctamente. El icono que se encuentra a la derecha de cada fila indica si los datos se exportaron correctamente (ver tabla inferior). Al hacer clic en el icono **Export Status**, se abre el explorador de archivos en la ubicación de los datos procesados siempre que la exportación de datos se haya realizado correctamente.

Icon	Meaning
	The data was exported successfully.
	The data of at least one experiment of a combined experiment was not successfully exported.
	The export of the data failed.
	No export was done.

Se pueden configurar fácilmente experimentos adicionales para la muestra actual haciendo clic en el botón **Next Experiment**. Esto conservará la identificación de la muestra y el disolvente y abrirá directamente la pantalla **Select Experiment**.

En cambio, si se hace clic en **New Sample** se abrirá la pantalla de adquisición con el ID de la muestra y el disolvente vacíos, pero manteniendo la cola de experimentos anterior.

También se puede readquirir uno o varios experimentos haciendo click en el botón **Reacquire**.

Un vídeo explicativo de la función **Next Experiment** y **New Sample** se puede encontrar en la carpeta “*Manuales y videos Fourier80*” del escritorio de Windows con el nombre “*Fourier How To Execute More Experiments. mp4*”.

4.4. Últimos datos (Latest Data)

En la pestaña **Latest Data** se puede acceder a una lista de todos los experimentos que se adquirieron con GoScan. Los experimentos se ordenan por fecha y el más reciente se ubica en la parte superior de la lista. La tabla mostrará el nombre del experimento que se adquirió, el ID de la muestra, la fecha de adquisición y el estado general.

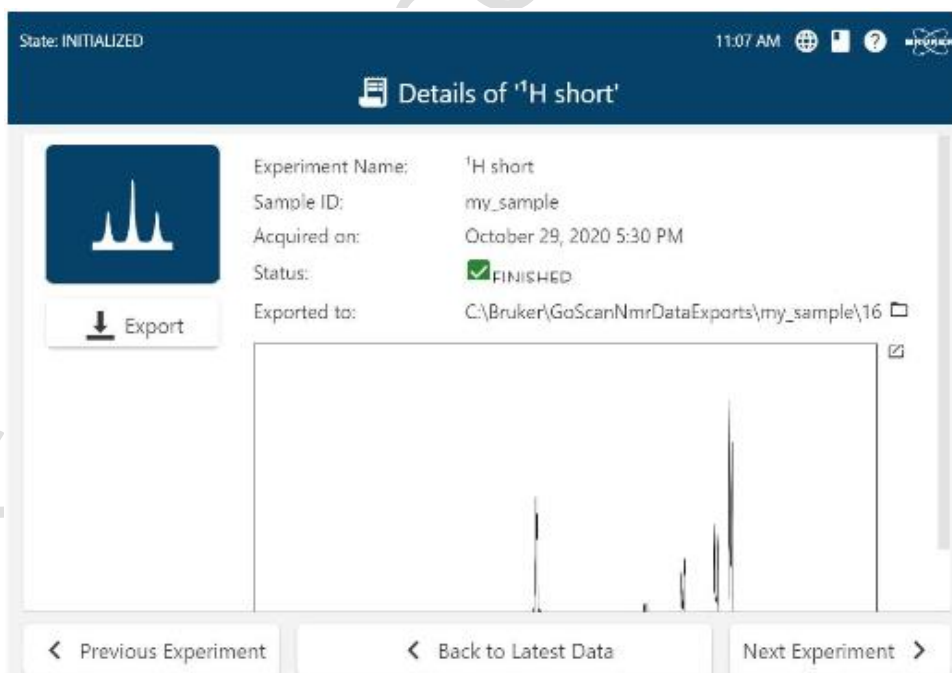
State: INITIALIZED 11:12 AM

Acquisition Automation Latest Data Settings

Experiment	Sample	Acquired on	State	Export State
November 3, 2021				
HSQC ME with gradient	Ibuprofen	8:42 PM	✓	↓
¹³ C DEPT135	Ibuprofen	8:20 PM	✓	↓
¹³ C	Ibuprofen	8:00 PM	✓	↓
¹ H Suppression	Ibuprofen	6:55 PM	✓	↓
¹ H long	Ibuprofen	6:49 PM	✓	↓

Export Sample

Al seleccionar una entrada de la lista se abrirá una página con más detalles del experimento y una imagen del espectro procesado. Es posible navegar entre las entradas de la tabla **Latest Data** con el icono de flecha en el lado izquierdo y derecho de la pantalla.

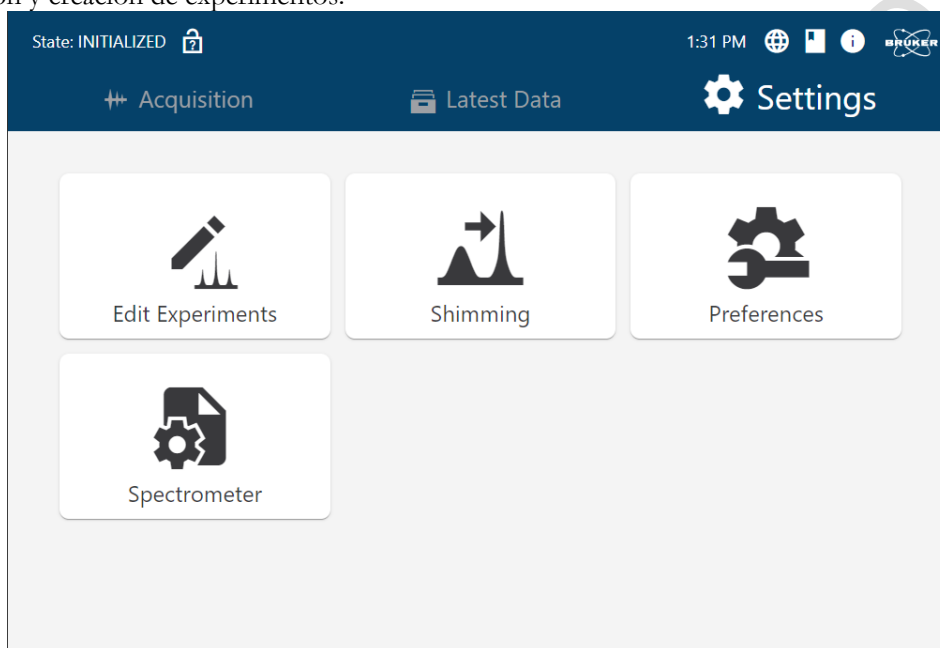


 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA	IE16-12-FO80	Página 14 de 17 Nº Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
	GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80			

Al hacer clic en el icono de la carpeta (), se abrirá el explorador de archivos en la ubicación del conjunto de datos exportado. Al hacer clic en la imagen del espectro o en el icono,  se abrirá el espectro en MNova para su posterior procesamiento y análisis de los datos.

4.5. Settings

La pestaña **Settings** permite realizar varias funciones, pero solamente se autoriza al usuario realizar la edición y creación de experimentos.



4.5.1. Editar Experimentos

Para editar un experimento es necesario seleccionar **Edit Experiments**. En esta página se muestran todos los experimentos disponibles en GoScan. Aquí se pueden crear nuevos experimentos a partir de los existentes y se pueden crear y editar experimentos combinados. Se puede acceder a todas las opciones disponibles para un experimento existente seleccionando el experimento.

Un vídeo explicando las posibilidades de crear y editar experimentos se puede encontrar en la carpeta “*Manuales y videos Fourier80*” del escritorio de Windows con el nombre “*Fourier How To Add Experiments.mp4*”. Se han creado los experimentos de protón [1H-1](#), [1H-16](#), [1H-32](#), [1H-64](#), [1H-128](#) y [1H-360](#) donde el número corresponde al número de scans.

 UNIVERSIDAD DE GRANADA	INSTRUCCIÓN TÉCNICA ESPECÍFICA	IE16-12-FO80	Página 15 de 17 Nº Revisión: 1 21/03/2025	 Centro de Instrumentación Científica
	GUÍA DE USUARIO PARA EL MANEJO DE FOURIER 80			

4.5.1.1. Crear un nuevo experimento a partir de uno existente

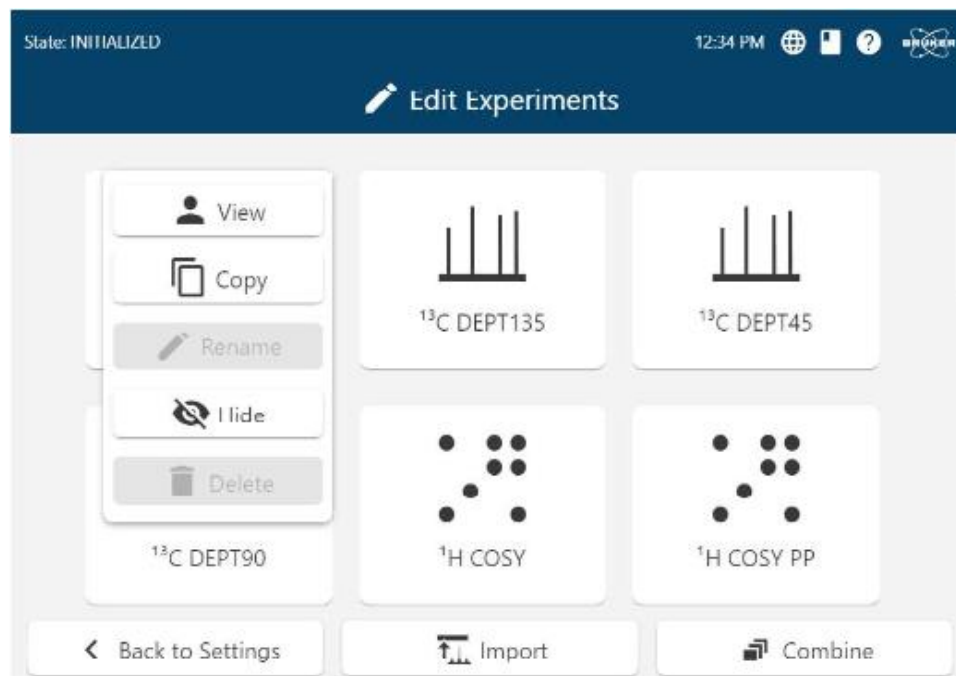
Se puede añadir un nuevo experimento copiando un experimento existente y modificando los parámetros. Para copiarlo solo es necesario hacer clic en el experimento de interés y seleccionar **Copy** en la ventana emergente. Solo hay que introducir un nuevo nombre y guardarlo. De este modo, el experimento ya está disponible para cualquier muestra. Los experimentos definidos por el usuario siempre aparecen al principio de la lista y están marcados con el icono .



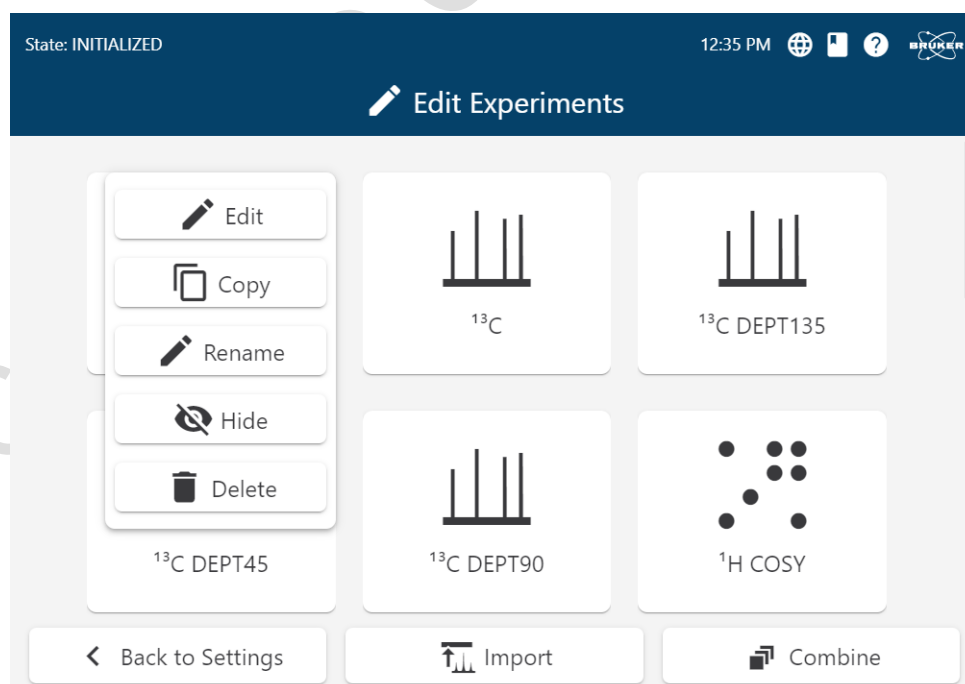
Los parámetros del experimento copiado se pueden modificar como se describe en la siguiente sección.

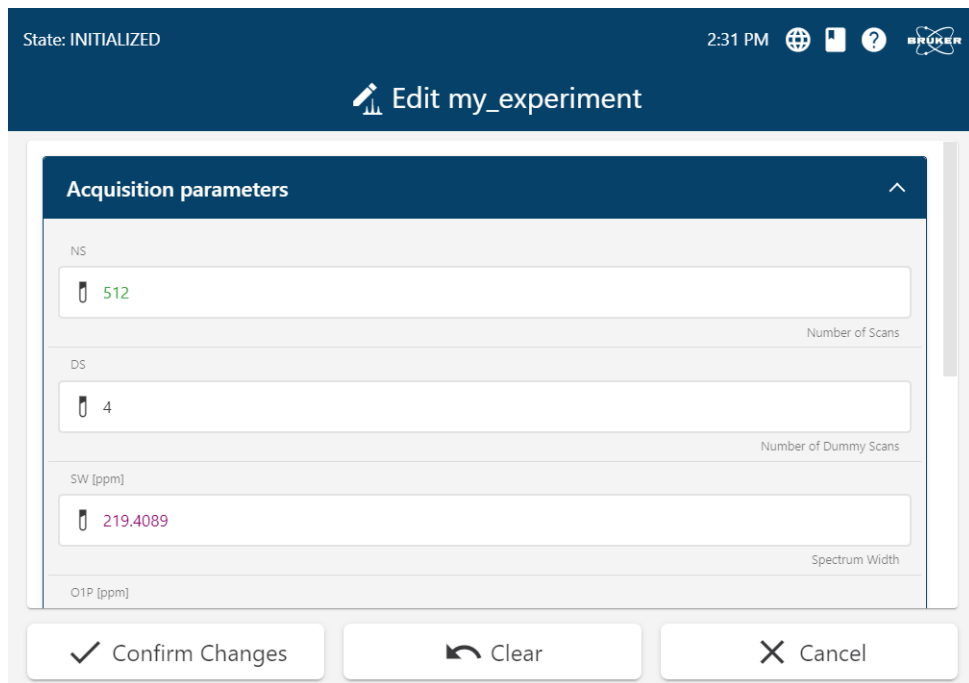
4.5.1.2. Ver/editar detalles de un experimento

GoScan se entrega con un conjunto de experimentos predeterminados. Estos experimentos no se pueden editar, pero se pueden ver algunos parámetros experimentales. Al seleccionar un experimento predeterminado, se abrirá una ventana emergente. El botón **View** abrirá la pantalla de parámetros del experimento seleccionado, pero no se podrán editar.



En cambio, los experimentos definidos por el usuario, aquellos con el icono  en la esquina superior izquierda, sí que se pueden editar ya que en lugar del botón **View** aparecerá el botón **Edit**. Al hacer clic en este botón se abrirá la pantalla de parámetros del experimento seleccionado y se podrán modificar.





The screenshot shows a web interface titled "Edit my_experiment". At the top, it says "State: INITIALIZED" and "2:31 PM". Below the title bar, there's a section "Acquisition parameters" with a list of parameters:

- NS**: 512 (Number of Scans) - The value 512 is green.
- DS**: 4 (Number of Dummy Scans) - The value 4 is black.
- SW [ppm]**: 219.4089 (Spectrum Width) - The value 219.4089 is red.
- Q1P [ppm]**: (Spectrum Width) - The value is not visible.

At the bottom, there are three buttons: "Confirm Changes" (with a checkmark icon), "Clear" (with a circular arrow icon), and "Cancel" (with an 'X' icon).

Si se cambia un parámetro con una entrada válida, el nuevo valor se muestra en verde. Una entrada no válida se mostrará en rojo. Algunos parámetros deben volver a calcularse o solo se permiten valores discretos. Esto sucederá automáticamente y los valores respectivos se mostrarán en violeta. Los cambios se pueden guardar con el botón **Confirm Changes**, que también cerrará la pantalla de detalles del experimento. Mientras se ingresa un valor no válido, el botón **Confirm Changes** no está activo. El botón **Clear** restablecerá todos los valores a los anteriores. **Cancel** cerrará la pantalla de detalles del experimento sin guardar.

4.6. Visualización y procesado de espectros

Solamente se podrá visualizar y manejar los espectros que se han realizado durante la sesión. Para ello solo debe abrir el programa MestreNova y navegar por la carpeta "GoScanNmrDataExports" situada en la ventana "Navegador Datos" a la derecha de la pantalla.

4.7. Transferencia de resultados al servidor FTP

En la carpeta "Transferir espectros" ubicada en el escritorio de Windows, se encuentran los accesos directos que debe utilizar cada grupo para transferir sus espectros realizados durante la sesión al servidor FTP. Solo es necesario hacer doble clic sobre el acceso directo que corresponde.

Es necesario señalar que una vez transferidos los espectros dejarán de estar en la ubicación donde GoScan los almacenó. Por tanto, aunque aparezcan en el listado de **Latest Data**, no se podrán abrir desde esa pestaña.