# LINEAMIENTOS PARA EL DESARROLLO Y FUNCIONAMIENTO DEL LABORATORIO DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE LA DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA



# Tabla de contenido

EXPOSICIÓN DE MOTIVOS	1
INTRODUCCIÓN	1
DE LA COMISIÓN DIVISIONAL DEL LRMN	2
DE LA COORDINACIÓN DEL LRMN	4
DE LA COORDINACIÓN ADMINISTRATIVA DEL LRMN	4
DEL FUNCIONAMIENTO DEL LRMN	5
Tipos de Usuarios del LRMN	5
Mecanismos de capacitación al alumnado y profesorado del LRMN	6
Catálogo de servicios o técnicas de medición	6
Normatividad y certificación	6
Procedimientos y manuales de seguridad	6
Reconocimiento de trabajos	6
ANEXO 1 INFRAESTRUCTURA DEL LRMN	7
ANEXO 2 CUOTAS DE RECUPERACIÓN	9

# Historial de versiones

VERSIÓN	FECHA	RESPONSABLE	DESCRIPCIÓN
0.1	27/12/24	Secretaría Académica	Versión inicial copia de Lineamientos de LSVP ajustada.

# LINEAMIENTOS PARA EL DESARROLLO Y FUNCIONAMIENTO DEL LABORATORIO DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE LA DIVISIÓN DE CBI (LRMN)

#### **EXPOSICIÓN DE MOTIVOS**

El Consejo Divisional de Ciencias Básicas e Ingeniería tiene competencia para emitir lineamientos particulares para el desarrollo y funcionamiento de la División, de conformidad con el Reglamento Orgánico, artículo 46, fracción VI.

Derivado de lo anterior, el Consejo Divisional de Ciencias Básicas e Ingeniería aprobó, en su sesión 472, los *Criterios generales para la elaboración de Lineamientos particulares para el funcionamiento académico de los Laboratorios Centrales de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería*.

Los criterios generales para la elaboración de Lineamientos particulares para el funcionamiento académico de los Laboratorios Centrales de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería, expresamente recomiendan que cada Laboratorio Central cuente con sus propios lineamientos en fecha perentoria.

Con base en las consideraciones anteriores, se emiten los Lineamientos particulares para el funcionamiento del Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear (LRMN).

# INTRODUCCIÓN

La Resonancia Magnética Nuclear (RMN), que es una ciencia por sí misma, demostrándolo así los premios Nobel en Química de 1991, 2002 y 2003 otorgados a Richard Ernst, K. Wüthrich y Lauterbur and Mansfield respectivamente, fue observada por primera vez en 1946 por Purcell, Torrey and Pound en la Universidad de Harvard, y Bloch, Hansen y Packard en la Universidad de Stanford. Aunque su potencial en la elucidación estructural en química orgánica fue desarrollada hasta década de los 50´s, con la aparición de los primeros espectrómetros de RMN de onda continua (CW) tanto de la marca Varian como Bruker.

Especialmente desde la aparición de técnicas bidimensionales (J. Jeneer 1971, R. Ernst 1976), la RMN se ha convertido en una herramienta indispensable para la elucidación de estructuras moleculares y el estudio de la dinámica de las mismas. El posterior desarrollo de estas, permitieron que K. Wüthrich publicara en 1985 la primera estructura de una proteína de 74 residuos de aminoácidos, resuelta en disolución.

Es importante mencionar que en el país existen más de 60 espectrómetros de RMN por transformada de Fourier (FT), que van desde 300 MHz hasta 750 MHz, albergados en más de 30 instituciones de enseñanza superior.

Nuestro laboratorio de RMN, uno de los más equipados del país, abrió sus puertas en el primer trimestre de 1985, y actualmente cuenta con tres espectrómetros de RMN, marca BRUKER, modelos AVANCE NEO 600, AVANCE-III 500 y AVANCE-II 300, de 600, 500 y 300 MHz, respectivamente, que nos permiten la obtención de espectros, tanto en estado sólido como líquido.

Desde aquel entonces, como Laboratorio Divisional, ha prestado sus servicios a la comunidad científica de Química y Física, no solo de la unidad Iztapalapa, sino también a la de las unidades de Xochimilco, Azcapotzalco y Cuajimalpa, contribuyendo al desarrollo, tanto de la investigación científica, como también a la docencia.

Aunado a lo anterior, nuestro laboratorio goza de una gran reputación, tanto a nivel local como nacional, tanto entre la comunidad científica institucional como privada, ya que desde 1995 ha venido prestando sus servicios de espectroscopia de RMN a instituciones como la UNAM (Instituto de Química, Fac. de Química, etc), el IPN (Escuela Nacional de Ciencias Biológicas), el CINVESTAV (unidades Ticomán y Saltillo), etc., y empresas privadas como Bayer, Laboratorios PISA, NUTEK, PROBIOMED, IIQUIAP, CIMAV, BASF, CIATEQ, QUIMICA APOLLO, etc.

## DE LA COMISIÓN DIVISIONAL DEL LRMN

- La Comisión Divisional del LRMN (CLRMN) será la encargada de supervisar la operación del LRMN.
- 2. La CLRMN será nombrada por el Consejo Divisional de Ciencias Básicas e Ingeniería, a propuesta de la persona titular de la Dirección de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Esta comisión será coordinada por uno de los integrantes en funciones de la misma con al menos un año de antigüedad (exceptuando la primera vez que se forme) y que sea usuario del LRMN.
- La CLRMN estará integrada por tres integrantes del personal académico de los departamentos de la DCBI de la UAM-Iztapalapa, con intereses afines al LRMN y donde al menos dos sean usuarios del LRMN.
- 4. Los integrantes de la CLRMN durarán en su cargo dos años y podrán ser prorrogados por dos años más, las veces que sea necesario, previa ratificación del Consejo Divisional, a propuesta de la persona titular de la Dirección de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería.
- 5. La sustitución de un integrante de la CLRMN procederá cuando:
  - I. Ha cumplido el período para el cual fue nombrado.
  - II. Por renuncia expresa.
  - III. Por haber acumulado tres faltas consecutivas o cinco no consecutivas en dos años, a partir de la fecha de su nombramiento, a las sesiones del pleno de la CLRMN.
  - IV. Por incapacidad médica de más de tres meses.
  - V. Por goce de alguna de las licencias previstas en el Capítulo III, cláusula 175 del Contrato Colectivo de Trabajo y Acuerdo 10/90 de la Universidad Autónoma Metropolitana y el Sindicato Independiente de Trabajadores de la UAM.
- 6. El proceso de sustitución de un integrante de la CLRMN seguirá lo indicado en el punto 2
- 7. Las reglas de funcionamiento interno de la CLRMN deberán contener al menos:
  - I. La forma de convocar las sesiones;
  - II. El número mínimo de integrantes para poder llevar a cabo la sesión;

- III. La forma en que habrán de tomarse los acuerdos, y
- IV. La forma en que se llevará a cabo el registro de los acuerdos alcanzados en la sesión.

# 8. La CLRMN tendrá las siguientes funciones:

- I. Vigilar la operación y cumplimiento de estos lineamientos;
- II. Vigilar que se respeten los objetivos e intereses académicos del LRMN en la operación de las estructuras administrativas de financiamiento (externo e interno) que sean puestas en práctica;
- III. Proponer modificaciones a los presentes lineamientos de acuerdo con las necesidades del LRMN y el funcionamiento del mismo;
- IV. Establecer las reglas de servicio externo (distinguiendo diferencias entre la comunidad de la UAM en general y otras instituciones) del LRMN;
- V. Informar a la persona titular de la Dirección de la DCBI oportunamente de cualquier problema o irregularidad que ponga en riesgo la operación o viabilidad financiera del LRMN y gestionar las acciones necesarias para resolverlos;
- VI. Informar anualmente al Consejo Divisional sobre el desarrollo de las actividades académicas del LRMN;
- VII. Resolver y dictaminar sobre los casos no contemplados en los reglamentos aplicables de la UAM y estos lineamientos, que no sean de la competencia de ningún órgano o instancia de apoyo de la Universidad;
- VIII. En coordinación con las <u>personas técnicas responsables</u> del LRMN vigilar el funcionamiento de los equipos del LRMN y proponer las medidas pertinentes para que éstos funcionen adecuadamente, y
- IX. Coordinar los esfuerzos conducentes a la actualización de los equipos del LRMN, así como la obtención de recursos económicos para esto.
- X. Realizar actividades de planeación, incluyendo la programación de talleres y programas de capacitación y docencia, actividades de promoción y recaudación de recursos.
- XI. Integrar las recomendaciones de los profesores y usuarios del LRMN en relación a la actualización y el mantenimiento de la infraestructura.
- XII. Coadyuvar con la <u>coordinación del LRMN</u> en la programación de actividades del LRMN.
- XIII. Revisar el informe de actividades del LRMN elaborado por la coordinación del LRMN.
- XIV. Proponer a las instancias correspondientes mecanismos de uso y cobro de los servicios del LRMN, así como montos de cuotas de servicio.
- XV. Planear y coordinar los cursos de capacitación y de seguridad para usuarios del LRMN.
- XVI. Proponer mecanismos idóneos para la operación, uso, mantenimiento y demás aspectos que considere pertinente el LRMN.
- XVII. Coadyuvar con la coordinación del LRMN, en el establecimiento de los criterios de prioridad entre usuarios.
- XVIII. Resolver las posibles diferencias de criterios académicos entre el responsable técnico del LRMN y usuarios.

- XIX. Coadyuvar con la coordinación del LRMN en la verificación de normas de operación aplicables.
- XX. Auxiliar a la coordinación del LRMN en la adquisición de equipo.

# DEL PERSONAL RESPONSABLE TÉCNICO DEL LRMN

- El personal responsable técnico del LRMN, serán integrantes del personal académico de los departamentos de la DCBI de la UAM-Iztapalapa y serán nombrados por la persona titular de la Dirección de la DCBI y la CLRMN.
- 2. Las funciones del personal responsable técnico serán:
  - Administrar los equipos del Laboratorio, así como los servicios que preste el mismo.
  - Implementar las políticas de uso de los recursos del Laboratorio que establezca la CLRMN.
  - III. Diseñar los mecanismos para compartir y optimizar el uso de los recursos del LRMN, e implementar aquellos aprobados por la CLRMN.
  - IV. Administrar los consumibles, bienes, servicios y mantenimientos, y gestionarlos con la Asistente Administrativa de la Dirección de la DCBI.
  - V. Informar a la CLRMN acerca del funcionamiento del LRMN de manera mensual acerca del funcionamiento del mismo, o en cualquier momento de las problemáticas que se presenten.
  - VI. Promover y brindar asistencia en la realización de convenios de colaboración con otras instituciones y empresas, y ejecutar aquellos aprobados por la CLRMN.
  - VII. Promover y brindar asistencia en la realización de convenios de prestación de servicios a otras instituciones y ejecutar aquellos aprobados por la CLRMN.

#### DEL FUNCIONAMIENTO DEL LRMN

Se entiende por usuario a toda aquella persona que de manera ocasional o frecuente emplea los servicios que ofrece el LRMN.

El personal académico que desee ser usuario-investigador en el LRMN debe ser parte del personal académico de tiempo completo e indeterminado o visitante en la Universidad Autónoma Metropolitana.

Alumnado adscrito a un proyecto de investigación registrado por personal académico que lo requiera.

Usuarios externos a la UAM investigadores de otras instituciones.

Para utilizar los servicios del LRMN se seguirá el siguiente procedimiento:

- 1. El usuario llena una solicitud con el estudio que requiere.
- 2. Proporcionar una carta responsiva que asegure que los materiales a analizar no son explosivos ni tóxicos.
- 3. El responsable técnico analiza la solicitud.

- 4. El responsable técnico comunica ajustes o sugerencias al solicitante para ajustar el estudio.
- 5. Se programa el estudio.
- 6. Se realiza el estudio.
- 7. Se generan y entregan los resultados.
- 8. Al final de cada mes todos los usuarios-investigadores y jefes de Departamento correspondientes (cuando proceda) recibirán un informe de uso de la infraestructura detallando los tiempos y costos.

## Mecanismos de capacitación al alumnado y profesorado del LRMN

El LRMN brindará capacitación a su comunidad según se requiera en herramientas necesarias para llevar a cabo su trabajo por solicitud.

#### Catálogo de servicios o técnicas de medición

El LRMN brindará a su comunidad los siguientes servicios:

- a) Resonancia Magnética Nuclear de Líquidos:
  - Determinación de estructura molecular observando 1H, 2H, 11B, I3C, 29Si, 31P, 15N, 119Sn, etcétera., por medio de técnicas unidimensionales, bidimensionales y multidimensionales, bien sea homonucleares o heteronucleares.
  - Estudios conformacionales.
  - Configuración de centros asimétricos.
  - Estimación e identificación de impurezas.
  - Determinación de coeficientes de difusión.
  - Resolución de mezclas mediante experimentos DOSY.
  - Caracterización de polímeros en solución.
  - Evaluación de tacticidad (micro estructura).
  - Movilidad molecular.
  - Estudios a temperatura variable.
  - Estudios fisicoquímicos (formación de micelas, interacción molecular, etc.).
  - Estructura de péptidos y proteínas.
  - Evaluación de porosidad y medición de cavidades mediante RMN de I29Xe.
- b) Resonancia Magnética Nuclear en estado Sólido:
  - Determinación de la estructura molecular de catalizadores observando: 6Li, 7Li, 11B, 19F, 27Al, 29Si, 31P, 45Sc, 119Sn, etc., por medio de técnicas MAS y
  - CP-MAS, unidimensionales y bidimensionales.
  - Caracterización de compuestos orgánicos mediante la observación de 2H, I3C, 15N, etcétera., por medio
  - de técnicas MAS y CP-MAS, unidimensionales y bidimensionales.
  - Caracterización de polímeros.
  - Valoración de dinámica molecular.

 Determinación de polimorfismo y cristalografía por RMN (experimentos MQMAS).

# Normatividad y certificación

En el momento de la elaboración de estos lineamientos no se considera importante que se cuente con elementos normativos o certificaciones específicas para el funcionamiento del LRMN. La CLRMN podrá en cualquier momento ver la conveniencia de seguirlas o tenerlas.

#### Procedimientos y manuales de seguridad

En el momento de la elaboración de estos lineamientos no se considera importante que se cuente con procedimientos y manuales de seguridad para el funcionamiento del LRMN. La CLRMN podrá en cualquier momento ver la conveniencia de crearlos.

Por cuestiones de seguridad se puede negar el servicio cuando los materiales para análisis puedan ser tóxicos o explosivos.

Por otra parte, se negará el acceso al LRMN a personas que tengan prótesis o marcapasos.

#### Reconocimiento de trabajos

Se solicita a todos los usuarios que se agregue un agradecimiento en los productos generados:

## en español:

Los autores agradecen el análisis proporcionado por el Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear de la UAM Iztapalapa.

#### en inglés:

The authors acknowledge the analysis provided by the Nuclear Magnetic Resonance Laboratory at UAM Iztapalapa.

#### **ANEXO 1 INFRAESTRUCTURA DEL LRMN**

El Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear (LRMN) de la UAM-Iztapalapa cuenta con: 3 espectrómetros de RMN, marca BRUKER, modelos AVANCE NEO 600, AVANCE-III 500 y AVANCE-II 300, de 600, 500 y 300 MHz, respectivamente.

# CARACTERÍSTICAS DE LOS ESPECTRÓMETROS

## **AVANCE NEO 600**

<u>El AVANCE NEO 600</u>, con imán superconductor con un "bore" de 52 mm y consola con tres canales, cuenta con las siguientes sondas (probes), todos marca BRUKER:

- 1.- SmartProbe autotune con gradiente de campo en "Z", de dos canales: 1H, y canal X BroadBand (con rango de frecuencias de 31P hasta 15N)
- 2.- CP-MAS 1.3 mm con capacidad de rotación de hasta 65 KHz, de dos canales: 1H y canal X BroadBand (con rango de frecuencias de 31P hasta 15N).
- 3.- Triple resonancia X/Y/1H de 4mm con capacidad de rotación de hasta 15 KHz, de tres canales 1H, canal X BroadBand (con rango de frecuencias 31P hasta 13C) y canal Y BroadBand (con rango de frecuencias de 81Br hasta 15N).
- 4.- CP-MAS 4mm con capacidad de giro de la muestra de hasta 15 KHz, de dos canales: 1H y canal X BroadBand (con rango de frecuencias de 31P hasta 15N).

#### **AVANCE-III 500**

El AVANCE-III 500, con imán superconductor con un "bore" de 52 mm y consola con tres canales, cuenta con las siguientes sondas (probes), todos marca BRUKER:

- 1.- 5mm detección inversa-ID con gradiente de campo en "z", cubre el rango de frecuencias comprendido entre 31P y 109 Ag.
- 2.- 5mm de Triple resonancia-TXI (1H, 13C, 15N) con gradiente de campo en "z". Dedicado a la adquisición de espectros de Proteínas.
- 3.- 4mm HRMAS- dual: 1H 13C, con gradiente de campo en "z". Dedicado a la adquisición de espectros de geles.
- 4.- 10mm Detección directa, cubre el rango de frecuencias comprendido entre 31P y 109Ag.

#### **AVANCE-II 300**

Por su parte el AVANCE-II 300, con imán superconductor con un "bore" de 89 mm y consola de tres canales, cuenta con los siguientes probes (sondas), marca BRUKER:

- 1.- CP-MAS 1.3 mm con capacidad de rotación de hasta 65 KHz, de dos canales: 1H y canal X BroadBand (con rango de frecuencias de 31P hasta 15N).
- 2.- Triple resonancia X/Y/1H de 4mm con capacidad de rotación de hasta 15 KHz, de tres canales: 1H, canal X BroadBand (con rangos de frecuencia de 31P hasta 15N en modo doble resonancia) y canal Y dependiente de capacitor para la frecuencia de resonancia (actualmente sólo cuenta con un capacitor para sintonizar en 15N).

- 3.- CP-MAS 4mm de con capacidad de giro de la muestra de hasta 15 KHz, de dos canales: 1H y canal X BroadBand (con rangos de frecuencia de 31P hasta 15N).
- 4.- CP-MAS 7mm con capacidad de giro de la muestra de hasta 7 KHz, de dos canales; 1H y canal X BroadBand de baja frecuencia (con rangos de frecuencia de 39K hasta 17O).
- 5.- Probe NO BRUKER, fabricado por el Dr. Rachdi en la Universidad de Montpellier, Francia, CP-MAS 31P a 15N, utiliza tubos de 5mm sellados a la flama. Este probe es adecuado para hacer estudios bajo atmósfera controlada.

# **ANEXO 2 CUOTAS DE RECUPERACIÓN**

#### Para la comunidad UAM:

\$200.00 por espectro o por hora de uso del espectrómetro, lo que se cumpla primero.

El pago se realiza mediante transferencia interna, a la estructura programática del laboratorio.

#### Para otras instituciones:

\$400.00 por espectro o por hora del uso del espectrómetro, lo que se cumpla primero.

El servicio de RMN se solicita a través de orden de compra expedida por la institución. La UAM expide factura por el servicio. El pago del servicio, lo realiza la institución mediante transferencia a la cuenta de la UAMI.

# Para empresas (iniciativa privada):

\$1,400.00 por espectro o por hora del uso del espectrómetro, lo que se cumpla primero.

El servicio de RMN se solicita a través de orden de compra expedida por la empresa. La UAM expide factura por el servicio. El pago del servicio, lo realiza la empresa mediante transferencia a la cuenta de la UAMI.

Alternativamente, el pago del servicio de RMN, realizado a otras instituciones diferentes a la UAM, o a la iniciativa privada, se puede realizar mediante pago en especie, mediante consumibles necesarios para la operación del laboratorio, ejemplo: disolventes deuterados, que se acuerdan con esos usuarios, cubriendo los montos de los servicios realizados y a conveniencia con respecto a las necesidades del laboratorio de RMN. Los usuarios deberán entregar las facturas, mismas que prueban los costos de los bienes entregados para cubrir los costos de los servicios.