



БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ

ул. акад. Г. Бончев, бл. 9, стая 118, 1113 София,

Лаборатория ЯМР, Тел.: (00359 2) 9606 108 и 8700 106; Факс:(00359 2) 8700 225

АНАЛИЗИ И ДРУГИ НАУЧНИ И НАУЧНО-ПРИЛОЖНИ ДЕЙНОСТИ,
предлагани от лаборатория ЯМР-спектроскопия на спектрометри BRUKER AV600 и DRX250

В лабораторията се снимат ЯМР-спектри за колеги от всички заинтересовани институции в страната и чужбина съгласно определен ценоразпис. Цените за снимане на ЯМР-спектри и на двата спектрометра се определят на основата на реално употребеното време при базова часова цена от 150лв (без ДДС) от май 2012 г., определена на базата на усреднените разходите за поддръжката им през предходните години. При предоставяне на проби за анализ в ЯМР кювети и получаване на спектралната информация по електронен път (ftp-сървер) колегите от академичните институции ползват намаление на часовата цена, както следва – 25 лв. за ИОХЦФ, 50 лв. за участниците в рамковото споразумение и 75 лв. за други академични институции. За договори с чуждестранни възложители се заплаща двойна цена. При продължителност на спектрите над 2 часа се прилага намалена тарифа (виж приложение 1). 25% от приходите от външни възложители се отделят за нуждите на лабораторията, вкл. за фонд работна заплата.

За всяка предоставена за анализ проба се попълва отделна заявка, която се вписва в приемната на лабораторията (118 стая). Пробите в течна фаза се заявяват до 15 часа и се снимат на пробоподаващите устройства на двата спектрометра. Проби, които не могат да бъдат снети на пробоподаващите устройства се снимат само в петък, като заявките следва да са налични най-късно до края на работния ден в четвъртък. Извършването на анализи в твърда фаза се извършва след набиране на достатъчен брой проби, като датата се обявява на интернет страницата на лабораторията не по-късно от два месеца преди започване на измерванията.

На основата на гореизложените принципи, минималните цени за основните видове предлагани сервизни спектри са обобщени в приложение 1. Те са приложими при достатъчна концентрация и разтворимост на изследваните вещества. Подробна информация за зависимостта на времето за извършване на различни анализи от концентрацията за различни измервателни глави на двата апарата е предоставена на интернет страницата на лабораторията

Служителите на лабораторията могат да извършват и допълнителни услуги при предварително уговорено възнаграждение за:

- А) Приготвяне на проби (вж. приложения 2 и 3)
- Б) Процесирание и изписване на спектри (вж. приложение 2)
- В) Анализ и интерпретация на ЯМР-спектри (вж. приложение 4)

Приложение 1

Цени за снимане на някои ЯМР-експерименти

	ИОХЦФ	Рамково споразумение	Академични звена	Други
Цена за час (< 2 ч.)	25	50	75	150
Цена за час (> 2 ч.)	4	8	12	30
¹ H (до 12')	5	10	15	30
Минимална цена, ориентировъчна за 0.1M/0.05M проба (DRX250/AV600)				
¹ H-спектър + деутерообмен; ¹ H-спектър + ¹³ C или ¹ H-спектър + COSY (до 24')	10	20	30	60
¹ H+ ¹³ C+ DEPT (до 36')	15	30	45	90
¹ H, ¹³ C, COSY, edHSQC	20	40	60	120
¹ H, ¹³ C, COSY, edHSQC, HMBC, NOESY или ROESY	50	100	150	300
Други експерименти	според	употребеното	време	

Колегите от ИОХЦФ и от рамковото споразумение предоставят пробите за анализ в подходящи кювети, съдържащи 0.6 мл разтвор в подходящ деутериран разтворител. Приготвяне на проби се извършва само за възложители извън рамковото споразумение.

Експерименти, които не могат да бъдат снимани в автоматичен режим са деутерообмен, селективни експерименти, експерименти в смесени разтворители и/или при променлива температура и някои други.

Приложение 2

Цени за допълнителни услуги, свързани с различни ЯМР-експерименти

- Приготвяне на претеглена проба 20 лв. + цената на употребения разтворител съгласно *приложение 3*
- Претегляне на аналитична везна 20 лв.
- Определяне на разтворимост 20 лв.
- Процесиране и изписване на едномерен спектър (pdf) 30 лв.
- Процесиране и изписване на двумерен спектър (pdf) 50 лв.
- Анализ и интерпретация на ЯМР-спектри съгласно *приложение 4*

Приложение 3

Цени на разтворители за ЯМР-спектри

(съгласно каталога на Aldrich 2012) + 25%

			евро по каталог	лева /за 0.6 ml/ /за спектър/
522015-1P	Chloroform-d (99.9%D)	10 x 0.6 ml	26.30	6.43
522058-1P	DMSO-d6 (99.9%D)	10 x 0.6 ml	27.60	6.75
521965-1P	D2O (99.9%D)	10 x 0.6 ml	21.50	5.26
522023-1P	MeOH-d4 (99.8%D)	10 x 0.6 ml	68.50	16.75
444855-1P	Aceton-d6 (99.9%D)	10 x 0.75ml	65.50	16.01
441317-1P	Acetonitrile-d3 (99.8%D)	10 x 0.75ml	47.10	11,51
522031-1P	DiClmethane-d2 (99.9%D)	10 x 0.6ml	144.00	35.20
530417-1P	Pyridine-d5 (99.5%D)	10 x 0.6ml	80.50	19.68
441325-1P	Benzene-d6 (99.6%D)	10 x 0.75ml	34.20	8.36

Евро/лев 1.95583:1

Приложение 4

Ориентировъчни цени

за интерпретация на сервизни спектри в ЯМР-лабораторията на ИОХЦФ

1. Консултации за снимането на сервизни спектри се извършва от всички служители на ЯМР-лабораторията и е безплатна.
2. Пояснения към и интерпретация на сервизни ЯМР-спектри не влиза в служебните задължения на персонала на ЯМР-лабораторията и се извършва срещу допълнително заплащане. При заплащане по фактура извършителят на интерпретацията има право да използва до 75% от постъпилата в ЯМР-сметката сума за поръчка на материали, консумативи и др., както и за поемане на разноски по служебни командировки у нас и в чужбина.
 3. а) Искането за интерпретация на спектрите е препоръчително да се заявява при представяне на пробите в съответната графа на заявката.
 - б) Искане за интерпретация на снети вече спектри (на нашите спектрометри или такива, снети другаде) се удостоверява с нова заявка и представяне на спектрите на в електронен вид (в краен случай на хартиен носител).

Заявителят може да посочи и специалиста, който той предпочита за извършване на интерпретацията. Ако това не е направено, специалистът се определя от ръководителя на лабораторията при негово (на специалиста) съгласие.
4. При искане за интерпретация в първичната заявка е задължително заявителят да се консултира със специалиста **преди** снимането на спектрите за оптималните условия на снимане и необходимите за целта спектри (напр. количество на пробата, подходящ разтворител, подтискане на негови сигнали, селективно декуплиране, обмен с тежка вода, евентуални двумерни спектри и др.). За целта заявителят представя на специалиста данни за предполагаема структура (една или повече), условия на синтеза или изолирането на веществото и др. По правило за успешна интерпретация се изисква веществото да е чисто (над 90%), освен когато се касае за количествен анализ на смеси.
4. Минималните изисквания при искане на интерпретация за спектри по правило са: протонен спектър с интеграл и протонно-декуплиран C-13 спектър с DEPT. При желание и необходимост се снимат и други предложени от заявителя или специалиста спектри. Заплащане на регистрацията на спектрите се калкулира отделно съгласно действащия ценоразпис.
5. За пояснения към и интерпретация на сервизни ЯМР-спектри се заплащат следните цени:
 - а) пояснения към спектрите – брой сигнали, вид сигнали, интегрална интензивност, мултиплетност и др. **20 лв.**

б) анализ на протонни спектри по правилата за първи порядък (ако са приложими): отнасяне на сигналите, определяне на химичните отмествания, константите на спиново взаимодействие и интензитетите на сигналите; отнасяне на сигналите на C-13 спектрите; избор на предполагаема структура (от предложените от заявителя) или отхвърляне на всички предложени: **100 лв**

в) ако за извършване на дейностите по т. а) е необходимо използване на други техники (напр. селективно декуплиране, хомо- и/или хетерокорелация, спектри на ядрен ефект на Оверхаузер и др.): **допълнително 80 лв**

г) ако заявителят желае интерпретация на специалните спектри по т. в) в писмена форма (напр. отнасяне на крос-пикове в двумерни спектри и др.): **допълнително 80 лв**

6. При липса на данни за предполагаеми структури (напр. природни съединения и др.) се заплаща допълнителна сума по договаряне в зависимост от сложността на проблема.

7. За спешни проби в зависимост от случая, може да се начислява допълнителна сума.

8. Цените се отнасят за едно съединение. При серия от няколко съединения с очаквани аналогични структури за всяка следваща проба се прави намаление от 50% (ако наистина се окажат аналогични).

9. При искане за аналитичен протокол (с писмена интерпретация по т. б) и г)) се заплаща **допълнително 150 лв** за протокол на български и **200 лв** за протокол на английски език.

10. Всички данни от интерпретацията и протокола се предоставят на заявителя в писмена форма в един екземпляр плюс запис на магнитен носител (по електронна поща, CD или др.)

11. При интерпретация срещу заплащане специалистите от ЯМР-лабораторията и ИОХЦФ-БАН нямат права върху резултатите (напр. съавторство в публикации, патенти и др.).

София, април 2012 г.

Ръководител на лаб. "ЯМР":
(проф дхн Светлана Симова)