



Gruppo Interdivisionale
Risonanze Magnetiche



Non solo NMR

a cura di **Carla Marchioro**
GlaxoSmithKline, Verona

Hands on, ovvero mettiamoci le mani!!! (terza parte)

In questo numero della rubrica "Non solo NMR" vorremmo aggiungere nuovi elementi alla questione del collegamento del proprio PC ad uno spettrometro NMR o EPR, visto lo spreco di tempo che può comportare la necessità di recarsi di fronte alla macchina per qualunque operazione.

Già gli articoli usciti nei due mesi scorsi ne avevano parlato: l'articolo di gennaio/febbraio proponeva l'uso di un server Xwindows, che necessita di una macchina veloce, di molta memoria e di una rete non intasata; VNC, presentato nel numero successivo, è molto meno esigente in termini di hardware necessario e pertanto è molto più versatile. Entrambe le soluzioni non considerano il problema del collegamento fisico tra spettrometro e rete e questo articolo si propone, attraverso un esempio pratico, di colmare in minima parte questa lacuna.

A onor del vero, nelle macchine di recente concezione, il problema è pressoché inesistente perché ogni spettrometro è oggi dotato di scheda di rete per il collegamento a ciò che comunemente chiamiamo "Internet". Per estrarre i FID da strumenti datati, ma ancora molto diffusi, si deve agire invece in modo più artigianale. Il presente articolo descrive un sistema di collegamento spettrometro-PC realizzato presso il Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Alimentari di Cesena del quale verranno qui forniti i dettagli che consentano a chi legga queste note di replicare quanto fatto dal nostro gruppo, senza scoraggiarsi di fronte alle difficoltà. Lo strumento NMR a disposizione a Cesena è un Bruker AC 200, controllato da un computer Aspect 3000 con sistema operativo ADAKOS. Questo vetusto elaboratore è tutt'ora largamente diffuso, essendo presente in oltre un terzo degli strumenti NMR Bruker utilizzati in Italia e negli spettrometri EPR della stessa casa. Poiché nella configurazione

```

ZZNET 1.5b
Copyright (C) 1989 Zsolt Zolnai
National Magnetic Resonance Facility At Madison
University of Wisconsin - Madison
All rights reserved.

You are free to use, copy, and distribute ZZNET for noncommercial use if:
No fee is charged for use, copying, or distribution.
The program is not modified in any way.

Command List
A - ascii transfer mode.
B - binary transfer mode.
D [ id ] - host (PC) directory.
E - exit on host (PC) and remote (Bruker) station..
G [ host_file_id [ /remote_file_id ] ] - get file from Bruker..
H - help.
Q - exit on host (PC) only.
R [ id ] - remote (Bruker) directory.
S [ host_file_id/ [ remote_file_id ] ] - send file.
V - show transfer mode and print settings.
? - help.
<Esc><Esc> - to abort any operation..

ZZNET>

```

hardware non compare una scheda di rete (la Bruker l'ha tolta di produzione molti anni fa), l'unico modo per trasferire FID e spettri al mondo esterno a basso costo era, secondo il produttore, quello di connettere una delle porte seriali dello spettrometro a quella di un PC usando per la comunicazione un "antico" programma chiamato "kermit".

Un tale sistema però trasferisce i dati ad una velocità troppo bassa per essere di qualche utilità nell'uso routinario. Si pensi infatti che per trasferire un banale CO-SY 512x1K sono necessari circa 27 minuti! Uno stratagemma può essere allora quello di usare la porta parallela bidirezionale dello spettrometro che, potendo raggiungere la velocità di circa 33 Kbytes/s permette di trasferire lo stesso CO-SY in 47 secondi.

Sfortunatamente, il sistema ufficiale Bruker per il trasferimento dati via porta parallela costa alcuni milioni di lire, così ci è sembrato giusto investire qualche ora di ricerca su Internet per reperire un'alternativa e, una volta tanto, ne abbiamo trovata una a costo quasi zero: ZZNET.

ZZNET è un programma descritto da

Zsolt Zolnai nell'articolo *Drafting Table and Light-Box Software for Multidimensional NMR Spectral Analysis (PIXI). The Personal Computer Workstation*, apparso sul *Journal of Magnetic Resonance*, 1990, **88**, 511 ed è gratuitamente scaricabile dal sito <http://kunmr2.chem.ukans.edu/~dave/zznet.html>.

Il programma necessita di una speciale interfaccia parallela bidirezionale da installare sul PC e di un cavo di collegamento. Quanto alla prima, noi abbiamo acquistato l'economicissima CIO-DIO 24 consigliata dall'autore e venduta dalla *Measurement Computing* a circa 70 dollari (vedi <http://www.measurement-computing.com>).

Il cavo, invece, è stato assemblato e saldato in un paio d'ore nel nostro laboratorio NMR (da un chimico e non da un elettronico!) seguendo le indicazioni del citato articolo di Zolnai con una spesa totale di circa 40 mila lire.

Per utilizzare ZZNET è necessario che il programma di comunicazione giri contemporaneamente sia sull'ASPECT che sul PC. Perciò il "pacchetto" scaricato dal sito comprende il sorgente PASCAL compilabile sull'Aspect con il PA-

Queste pagine nascono nella prospettiva di diventare un punto di incontro per scambi di esperienze nel campo delle risonanze magnetiche tra i colleghi specialisti e gli utenti "di tutti i giorni". Potete mettervi in contatto con il Girm all'indirizzo it_girm@gsk.com o cm5304@gsk.com





Non solo NMR

SCOM (il compilatore PASCAL Bruker fornito assieme allo strumento), l'eseguibile originale per DOS (ZZNET.exe), una versione migliorata pure per DOS (ZZN5.exe), nonché una versione per Windows (ZZNETW.exe), tutti ottimamente funzionanti e provati nel nostro laboratorio. È anche presente un file d'istruzioni riguardanti la configurazione della scheda ed un piccolo manuale del programma.

Non crediate di avere a che fare con un programma a icone e click del mouse: ZZNET è un programma spartano e dall'interfaccia piuttosto rudimentale (Figura1). Ciò nonostante vi sarà facilissimo imparare ad usarlo!

Avendo spettrometro, scheda, cavo e programmi ci si è posto il problema di scegliere quale PC utilizzare per il trasferimento dati. La volontà di mantenere basso l'investimento anche nella scelta del PC, unitamente al fastidio per gli sprechi di risorse nel campo dell'informatica (ciò che nel nostro gruppo identifichiamo con "consumismo informatico"), ha fatto cadere la scelta su un computer dotato di processore Pentium a 75 MHz con 16 Mb di RAM, disco rigido 500 Mb e scheda di rete NE 2000, fino a quel momento relegato in magazzino tra le macchine considerate (purtroppo) obsolete.

Per quanto riguarda il sistema operativo del PC, poiché ZZNET è un programma per DOS, è stata installata una versione a "costo zero" di DOS chiamata, guarda caso, FreeDOS (<http://www.freedos.org>). Infine per il trasferimento via rete verso altri computer dei FID scaricati dallo spettrometro ci siamo serviti del notissimo pacchetto "public domain" NCSA-Telnet (<http://www.ncsa.uiuc.edu/SDG/Software/PCTelnet/>), un completo client Telnet e client/server FTP per DOS. In questo modo ci si potrà connettere al PC dall'esterno, ad esempio mediante il client FTP di una stazione Windows, sulla quale i FID potranno poi essere processati con il recente programma freeware MestRe-C di Carlos Cobas e colleghi (<http://qbrue.usc.es/jsrgroup/MestRe-C/MestRe-C.html>).

Come si sarà capito il sistema operativo descritto, seppure già estremamente utile, soffre ancora del problema della necessaria presenza dell'operatore allo spettrometro per lanciare il programma ZZNET sia sull'Aspect che sul PC. Il prossimo mese faremo dunque un ulteriore passo avanti e vedremo come potere eseguire il trasferimento di FID controllando tutto il procedimento da un computer remoto, ad esempio il PC del vostro studio. Il trucco? Linux...

Contributo di Luca Laghi (llaghi@foodsci.unibo.it) borsista presso il Dipartimento di Scienze degli Alimenti - via Ravennate, 1020 - 47023 Cesena.

Vi segnaliamo che presso il

Centro Risonanze Magnetiche dell'Università di Firenze

ci sarà un'attività di

"Formazione Permanente NMR".

Tutte le informazioni sono reperibili alla pagina:

<http://www.cerm.unifi.it/NMRcourse/NMR.htm>

In memoriam

Bo G. Malmström, a scientific giant and honorary member of our society, left our world on February 2, 2000 after a short illness. He was born on May 5, 1927 in Sweden. He studied in US (Muhlenberg College, Allentown PA and University of Minnesota at Minneapolis).

He is one of the fathers of biological inorganic chemistry. He was member of the Nobel Committee from 1972 to 1988 being chairman since 1977 and, of course, this allowed him to further influence the development of science.

After the PhD in 1951 he worked in Uppsala and in 1963 became professor of biochemistry in Göteborg where he became Emeritus in 1993.

During his thesis he worked on methods for the determination of metal ions in tissues and then on the mechanism of Mg²⁺ activation of enolase. He succeeded in the goal by using Mn²⁺ as activating ion. He pursued the application of EPR in biological inorganic chemistry since 1951 together with Tore Vänngård and later also with Roland Aasa.

At the same time he started investigating carbonic anhydrase with Sven Lindskog and Pell Nyman.

In 1960 he started his lifelong adventure on copper proteins, the blue copper proteins, laccase and cyt c oxidase. In 1962 he was in the organizing committee of the 7th ICCS in Stockholm where he introduced bioinorganic chemistry in this series of Conferences.

The collaboration and friendship with Harry Gray started in 1980. Through Harry, I became intimate of Bo. Among his pupils, I like to remind also Bengt Reinhammar who joined him in 1963 and contributed to the characterization of laccase. We organized together with Harry Gray and Helmut Sigel the 1st International Conference on Biological Inorganic Chemistry in Florence in 1983. It was a success and the start of a series of successful meetings, the 10th of which will be again organized in Florence in 2001. This will be a splendid occasion to celebrate him. He spent his first sabbatical in Rome in 1968 with Eraldo Antonini, a most prominent Italian biochemist with inorganic expertise. During this sabbatical he performed kinetic measurements on laccases and planned to extend the measurements on Cyt c oxidase. When he became Emeritus and had more time for research, he started coming to Florence on a regular basis. His interest in my research started from a discussion at Caltech in 1996 when Harry Gray was explaining me that the EPR signal of copper A, a domain of cyt c oxidase, could be detected at 4.2 K but not at 20 K. I said that this system would have been ideal for NMR investigations. So, Bo and copper A arrived in Florence. We have two papers on the subject (*J. Am. Chem. Soc.*, 1996, **46**, 11658; *J. Am. Chem. Soc.*, 1997, **119**, 11023) and the extension of the collaboration on blue copper proteins was interrupted by his death. He liked particularly to work with Claudio Luchinat.

I owe him a lot from wisdom to science. He proposed me to become member of the Academia Europaea in 1994.

Bo, you will be in our hearts and you will enlighten our minds for ever.

Ivano Bertini

