

Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer am Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main

I. Definitionen

Die *zentrale Service-Einrichtung* der Organischen Chemie und Chemischen Biologie vergibt durch benannten Verantwortlichen *Zugang* zu den Kernspinresonanzgeräten.

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie umfasst *Kernspinresonanzgeräte mit ausgewiesener Spezifikation gemäß Anlage 1*.

Als *Nutzer* wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einem Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte des durchzuführenden Forschungsprojekts bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG¹ verantwortlich ist.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

¹ http://www.dfg.de/download/pdf/dfg_im_profil/reden_stellungnahmen/download/empfehlung_wiss_praxis_0198.pdf

II. Verpflichtungen der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie bietet Nutzern Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten an.. Die Serviceabteilung führt in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durch und optimiert entsprechende Geräteparameter, die die technischen Voraussetzungen für NMR-Messungen in möglichst guter Qualität gewährleisten sollen. Für die Durchführung von NMR-Messungen fallen Kosten an, die vom Nutzer bezahlt werden müssen. Diese Kosten sind in entsprechenden Kategorien pauschaliert und werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung detailliert aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftlich- wie auch technisch-verantwortliche Personen benannt:

Prof. Harald Schwalbe	Gesamtverantwortlicher Büro: N160/314 Telefon: 069/798-29737 E-Mail: schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de
Dr. Christian Richter	Wissenschaftliche Ansprechperson Büro: N160/315 Telefon: 069/798-29137 E-Mail: ric@nmr.uni-frankfurt.de
Dr. Julia Wirmer Bartoschek	Wissenschaftliche Ansprechperson Büro: N160/315 Telefon: 069/798-29137 E-Mail: wirmer@nmr.uni-frankfurt.de
Dipl.-Ing. Reinhard Olbrich	Technische Ansprechperson Büro: N160/13-16 Telefon: 069/798-29122 E-Mail: Olbrich@chemie.uni-frankfurt.de
Stefan Bihler	Technische Ansprechperson Büro: N260/003 Telefon: 069/798- 29353 E-Mail: Bihler@pharmchem.uni-frankfurt.de

III. Voraussetzungen für den Zugang, Auswahlverfahren eines Nutzers und Durchführung der Nutzung

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die an einer deutschen wissenschaftlichen Forschungseinrichtung beschäftigt sind. Nutzer im Sinne von Auftragsforschung können auch Wissenschaftler an Firmen sein, die innerhalb der Bundesrepublik Deutschland registriert sind. Hierbei ist die Zivilklausel der Grundordnung der Goethe-Universität² zu beachten.

Zwei verschiedene Arten der Nutzung sind in der zentralen Service-Einrichtung möglich:

1. Im Regelfall wird eine Messung über die Automation mit automatischem Probenwechsler vom Nutzer gestartet. Der Messauftrag kommt hierbei durch die Eintragung in die Messliste zustande und setzt eine Erlaubnis durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers voraus.
2. Bei komplizierten Messungen ist es möglich, dass Messungen vom Servicepersonal durchgeführt werden. Hierzu müssen die Nutzer einen Antrag an die benannten Ansprechpersonen stellen. Ein Antrag hierfür ist in Anlage 3 gezeigt. Auch hier ist die Bestätigung des Antrags durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers vorausgesetzt.

Die Ansprechperson entscheidet über die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit.

Im Falle einer positiven Evaluierung benennt die Ansprechperson das NMR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin für den Zugang zu dem benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit der Ansprechperson sowie des benannten Gerätes und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, dessen Antrag als Erstes eingereicht wurde. Entsprechend werden Messungen am Probenwechsler ebenfalls in der Reihenfolge der Eintragung der Probe in die Messliste abgearbeitet.

Grundsätzlich werden die Messungen durch geschultes Personal des Instituts durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen und technischen Ansprechpersonen oder von

² vgl. Präambel der Grundordnung der Goethe-Universität: <http://www.satzung.uni-frankfurt.de/2013/Grundordnung-der-Johann-Wolfgang-Goethe-Universitaet-Frankfurt-am-Main-Stiftung-des-oeffentlichen-Rechts.pdf>

ihnen benannte Mitglieder der Arbeitsgruppe Schwalbe. In Ausnahmefällen kann es sehr erfahrenen Nutzern gewährt werden, selbst Messungen außerhalb der Automation durchzuführen. Eine vorherige Schulung und eine Einweisung in ein Gerät durch die wissenschaftliche Ansprechperson ist dafür notwendig. Die Erlaubnis, eigenständige Messungen durchzuführen, kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden.

Für den Fall, dass Unstimmigkeiten zwischen Ansprechperson und Nutzern über Nutzungszeitvergabe bestehen oder dass es sich um Spezialmessungen handelt, entscheidet der Gesamtverantwortliche der Serviceabteilung über die Nutzung.

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie verpflichtet sich, Anträge auf Nutzung, deren Evaluierung und die sich anschließende Nutzungszeitvergabe zu dokumentieren. Gemäß den DFG-Empfehlungen zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis müssen diese Unterlagen mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden.

IV. Datensicherung und Datenweitergabe

Nach Abschluss der Nutzungszeit leitet die Serviceabteilung umgehend die Primärdaten weiter, die von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie verpflichtet sich, für einen Zeitraum von einem Jahr die Primärdaten für den Nutzer zu sichern und die Weitergabe zu ermöglichen.

Der Nutzer wird darauf hingewiesen, dass im Falle einer Veröffentlichung gemäß der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis die Primärdaten mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden müssen. Die Verantwortung für die Aufbewahrung dieser Primärdaten obliegt dem Nutzer.

V. Datenanalyse, Urheberschaft und Veröffentlichungen

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Die Service Einrichtung gewährt nur für die technischen Voraussetzungen

(siehe II. - Verpflichtungen der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie).

Die Verantwortung für die Datenanalyse der Primärdaten liegt beim Nutzer. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen geben auf Anfrage Hilfestellung zur Datenanalyse.

Die Urheberschaft für die Primärdaten und deren Analyse gehört alleinig dem Nutzer, außer wenn vorher eine wissenschaftliche Zusammenarbeit vereinbart wurde.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Haben die wissenschaftlichen Ansprechpersonen wesentliche Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der -interpretation gegeben, werden sie Teil der Autorenliste.

VI. Pauschalierte Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten

Die pauschalierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten der Organische Chemie und Chemische Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung geregelt.

VII. Gültigkeit

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des Institutsleiters in Kraft und wird vom Sprecher der Gerätemanager der Organischen Chemie und Chemischen Biologie bezeugt. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Frankfurt, den

21. Mai 2013

Prof. Harald Schwalbe

(Institutsleiter Organische Chemie und
Chemische Biologie)

Dr. Christian Richter

(Sprecher der benannten Gerätemanager)

Anlage 1 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des NMR-Service der Organischen Chemie und Chemischen Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main - Gerätespezifikationen

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 21.05.2013):

400 MHz (Bruker Avance mit BACS60 Probenwechsler)	HH003200 (N160-14)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2000 Konsole, 1990 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBI Z-GRD 5mm TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C Z-GRD 5mm TBI Z-GRD Tieftemp.
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

500 MHz (Bruker Avance III HD)	(Raum N160-13)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2013 Konsole, 2013Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBO Prodigy cryo Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

300 MHz (Bruker Avance II mit BACS60 Probenwechsler)	HH003105 (Raum N160-13)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2005
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBFO Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

250 MHz (BrukerDPX mit BACS60 Probenwechsler)	HH007195 THU (Raum N160-16)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	1995 Konsole, 1987(M)
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm QNP CFSi Z-Grad
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

250 MHz (BrukerDPX)	HH005999 (Raum N160-16)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2000 Konsole, 1976 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBI Z-GRD 5mm BBO Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal für Tieftemperaturmessungen
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

600 MHz (Bruker Avance III HD)*	H031280B/1168 (Raum N140-02)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2013 Konsole, 1990 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm TCI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C Prodigy cryo Z-GRD 5 mm TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C Z-GRD 5 mm TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C XYZ-GRD 5 mm TXI ¹ H, ¹³ C, ³¹ P Z-GRD 5 mm TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C Z-GRD MAS- TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter

*eingeschränkter Zugang, nur nach Absprache mit dem gesamtverantwortlichen Leiter der NMR-Serviceabteilung

Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des NMR-Service der Organischen Chemie und Chemischen Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main – Pauschalierte Kosten

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte akkumulierte **Kosten pro Stunde Gerätezeit** (Stand 21.05.2013).

Die Kostenangaben beziehen sich auf Messungen im automatischen Probenwechslerbetrieb bzw. in Klammern durch das Servicepersonal manuell durchgeführte Aufträge. Hierbei handelt es sich um Experimente zur Analytik synthetischer Fragestellungen.

NMR Gerät Feldstärke ≤ 400 MHz	NMR Gerät Feldstärke 500 – 600 MHz
5,00 € (15,00 €)	10,00 € (20,00 €)

Des Weiteren fallen Kosten von pauschal 50 € für den Umbau bei z.B. Tieftemperaturmessungen oder CF-Korrelationen an.

Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für diejenigen Arbeitsgruppen von der oben dargestellten Einteilung abweichen, falls sie sich bei der Erstanschaffung eines NMR/EPR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.