

G-NMR-Treffen 26.03.2013, BMRZ/Frankfurt/Main

Ergebnisprotokoll

Participants:

Asami	Sam	BNMRZ/TU München
Avdesh	Avdesh	MPI of Heart and Lung research
Baldus	Johanna	Goethe University Frankfurt
Bermel	Wolfgang	Bruker BioSpin GmbH
Betz	Marco	Goethe University Frankfurt
Buchinger	Edith	Goethe University Frankfurt
Carlomagno	Teresa	EMBL Heidelberg
Chatterjee	Deep	Goethe University Frankfurt
Corbeski	Ivan	Goethe University Frankfurt
Ferner	Jan	Goethe University Frankfurt
Gemmecker	Gerd	BNMRZ/TU München
Glaubitz	Clemens	Goethe University Frankfurt
Graf	Jürgen	Ruprecht-Karls University Heidelberg
Gränz	Markus	Goethe University Frankfurt
Griesinger	Christian	MPI for biophysical chemistry
Gutmann	Torsten	Technische Universität Darmstadt
Hackl	Thomas	University of Hamburg
Haeßner	Rainer	TU München
Haupt	Erhard	University of Hamburg
Hauswald	Hans - Jochen	Ruhr University of Bochum
John	Michael	Universität of Goettingen
Jonker	Henry	Goethe University Frankfurt
Kaur	Jagdeep	MPI of Biophysics
Köck	Matthias	Alfred Wegener Institut
Kuhn	Stefan	Universität Köln/Aachen
Laguerre	Aisha	Goethe University Frankfurt
Liermann	Johannes	Johannes Gutenberg University Mainz
Löhr	Frank	Goethe University Frankfurt
Lopez	Jakob J.	Magic Angle Solutions
Mao	Jiafei	Goethe University Frankfurt
Mathieu	Daniel	Bruker Biospin GmbH
Matysik	Jörg	Universität Leipzig
Prisner	Thomas	Goethe University Frankfurt
Reggelin	Michael	TU Darmstadt
Richter	Christian	Goethe University Frankfurt
Sattler	Michael	TU München und Helmholtz Zentrum
Scheler	Ulrich	Leibniz Institut f. Polymerforschung e.V.
Schloerer	Nils	University of Cologne
Schwalbe	Harald	Goethe University Frankfurt

Schwarzinger	Stephan	Uni Bayreuth
Schweimer	Kristian	Uni Bayreuth
Shenderovich	Ilya	University of Regensburg
Stoll	Raphael	Ruhr University of Bochum
Thiele	Christina	TU Darmstadt
Tikole	Suhas Shivaji	Goethe University Frankfurt
Watcharin	Waralee	Goethe University Frankfurt
Wirmer-Bartoschek	Julia	Goethe University Frankfurt
Xie	Xiulan	Philipps-Universität Marburg

DFG Gerätezentren, Nutzerordnungen und Nutzungskosten

- H. Schwalbe präsentiert Voraussetzungen und Möglichkeiten der Einrichtung von DFG-Gerätezentren
- Andere Forschungsbereiche (MRI, Massenspektrometrie, Elektronenmikroskopie) haben sich bereits auf Pauschalen für Gerätenutzung geeinigt. Sofern die Voraussetzungen für ein DFG-Gerätezentrum gegeben sind, eröffnet das die Möglichkeit, Nutzungskosten in DFG-Anträgen einzuwerben.
Aspekte und Voraussetzungen hierzu wurden diskutiert. Entsprechende Information wird über die G-NMR E-Mail-Verteilerliste und Webseite <http://www.g-nmr.de> verteilt (dort ist auch eine online-Anmeldung für den E-Mail-Verteiler möglich).
- Das BMRZ wird exemplarisch Nutzerordnungen sowohl für die Service- als auch Bio-NMR-Geräte über G-NMR verfügbar machen.
- Die G-NMR-Teilnehmer werden gebeten, diese Informationen bei ihren Institutionen zu verbreiten und zu diskutieren.

Im Anschluss an die Diskussion im Plenum haben wurden Aspekte zu Pulssequenzstandardisierung und Standardexperimenten für Lösungs- und Festkörper-NMR-Spektroskopie in separaten Gruppen diskutiert, die entsprechenden Protokolle sind im Anhang.

Anhänge

- 1) Protokoll der Arbeitsgruppe Lösungs-NMR und Lehrkonzepte
- 2) Protokoll der Arbeitsgruppe Festkörper-NMR
- 3) Entwurf Nutzerordnung Forschungsgeräte
- 4) Entwurf Nutzerordnung Servicegeräte

G-NMR-Treffen 26.03.2013, BMRZ/Frankfurt/Main

Protokoll zum TOP „Lösungs-NMR“

I. Standardisierte Tests (Vorschlag vom BMRZ, Frankfurt)

Proben:

- 0.3 - 3% CHCl₃ in Acetone-d₆
- 0.1% Ethylbenzol in CDCl₃
- ASTM (60% C₆D₆ / 40% p-Dioxane)
- 10% Ethylbenzol in CDCl₃
- Sucrose (2 mM in H₂O)
- [¹³C, ¹⁵N]-Ubiquitin

Verwendung von Bruker Standard-Tests:

- WS: Wasserunterdrückungstest an 2mM Sucrose, Shim + ¹H-Puls
- Lsrh: Lineshape mit Rotation, Shim
- Lsnh: Lineshape ohne Rotation, Shim + Störungen
- SNH: Protonempfindlichkeit
- SNA: Kohlenstoffempfindlichkeit ohne Entkopplung
- SNC: Kohlenstoffempfindlichkeit mit ¹H-Entkopplung

Diskussionspunkte

Spektrometer im OC-Betrieb:

- ganzes Programm im Probenwechslerbetrieb sinnvoll; im manuellen Betrieb zu aufwendig für Routinechecks;
- kann evtl. durch Sucrose-Messung ersetzt werden (anstatt CHCl₃ für *lineshape* und Ethylbenzol für S/N; weitere Einzel-Messungen dann nur bei Auffälligkeiten nötig);
- bei Probenköpfen mit bekannt schlechter Wasserunterdrückung (alte BB-Köpfe, „Vorwärtsdetektion-Köpfe“ etc.) Sucrose/H₂O nicht sinnvoll; besser klassisch CHCl₃ / EB;
- evtl. noch Überprüfung der Linearität (zeigt Veränderungen im Sendepfad, dann evtl. neue CORTAB erstellen);
 - am einfachsten z.B. durch Messung des betr. Hard- und Entkopplerpulses;
 - für ¹H gibt es bei Bruker z.B: einen Hardware-Test mit gedoptem Wasser: gut für genauere Überprüfung der Linearität (in längeren Abständen) – aber in der Form nur für ¹H möglich;
- ¹⁵N-Harnstoff/¹³C-MeOH -Probe: automat. Pulskalibrierung möglich (auf PAROPT-Basis); auch ²H-Pulsbestimmung möglich;
- evtl. *natural abundance* Test-HSQC an einfachen Verbindungen;

Bio-NMR:

- Testserie an Ubiquitin (per MULTIZG)
- S/N aus HSQCs problematisch: aus definierter Reihe auslesen (bzw. „höchste Reihe“) führt oft zu grossen Variationen; evtl. besser $\text{Integral}(\text{Signal})/\text{Integral}(\text{noise region})$ – müsste noch ausgearbeitet werden;
- Schwankungen in Wasserunterdrückung beeinflussen S/N:
grössere SW, um *noise* fern vom H₂O zu bestimmen / getrennt Prozessieren (bcmo=no/quad für Wasserunterdrückung, bcmo=qpol für S/N)

Parametersätze für Standard-Tests können über G-NMR-Webseite zur Verfügung gestellt werden; BMRZ/Frankfurt und BNMRZ/TUM werden repräsentative Daten zum Performance-Vergleich zur Verfügung stellen.

Ubiquitin-Proben aus EINEM *batch* für alle Interessierten gemeinsam bestellen? (Alternativen zu Ubiquitin wg. Alterung?)

II. Experiment-Bibliothek / Vereinheitlichung von Pulsprogrammen

Eingestellte Pulsprogramme müssen von jedem (entspr. ausgebildetem!) NMR-Nutzer problemlos verwendbar sein!

- Grundlage für Bruker-Pulsprogramme sollten (soweit möglich) Bruker-Standarddefinitionen sein;
- W. Bermel (Bruker) bietet seine Hilfe an, Pulsprogramme auf PROSOL-Kompatibilität zu überprüfen;
- bei Experimenten von allgemeinem Interesse Übernahme in die Bruker-Standard-Bibliothek
- bei aller nötigen Sorgfalt aber keine Haftung für Hardware-Schäden durch eingestellte Pulsprogramme möglich – Nutzer müssen auf Kompatibilität mit ihren Geräten achten!
- G-NMR wird prinzipiell "Pulsprogramme" aller Hersteller aufnehmen; allerdings bleibt dann die Frage der Überprüfung der Programme offen (alleinige Verantwortung der Autoren)
- Kontaktaufnahme mit Agilent, um Interesse/Möglichkeiten zur Mitarbeit auszuloten

TOP „Lehre / Ausbildung“

Vorbild EMBO-Kurse – allerdings zu wenige Plätze!

MPI Göttingen veranstaltet ebenfalls regelmässig Aus-/Fortbildungskurse für Mitarbeiter.

- evtl. Übernahme als regelmässiges, für alle offenes Programm
- sollte von Diplom- /Master- / Doktoranden möglichst FRÜH besucht werden (nicht erst im letzten Promotionsjahr!)
- keine rein passive Veranstaltung, sondern mit praktischen Übungen zum Mitmachen

G-NMR Meeting, Solid-State NMR Subgroup

Frankfurt/M. 26.3.2013

Participants:

- Johanna Baldus, Frankfurt
- Clemens Glaubitz, Frankfurt
- Bernd Reif, München
- Ulrich Scheler, Dresden
- Barth van Rossum, FMP Berlin
- Marcella Orwick, FMP Berlin
- Jörg Matysik, Leipzig

Protocol

1. Solid-state NMR Workshop

- General agreement that a national solid-state NMR workshop could be helpful
- It should provide more hands-on experiences and less theory than the more advanced solid-state NMR Summer school
- Possible content/format:
 - Understanding basics solid-state NMR building blocks, which will be of interest to both bio-, materials- and polymer people
 - This could include for example: REDOR, R2, C7, FSLG, CP/DCP, DARR/PDSD/RFDR etc.
 - Format could involve hands-on experiments on spectrometer plus simulating the same experiments by SIMPSON
 - Workshop could be run in Frankfurt, maybe 2014
 - Open to all in terms of instructors and participants

2. MAS: Setting the magic angle, shimming

- Correct adjustment of magic angle essential for all MAS applications
- Established procedure using KBr seems sufficient
- On certain probes (especially if flip is needed for insert/eject) or for very sensitive experiments stability of MAS can be a problem
- Shimming on adamantane seems also sufficient
- No need for further actions or standardization

3. Chemical shift referencing

- Unification of referencing is important, at least for more commonly used nuclei such as ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P , ^2H and ^1H
- Referencing via the ^{13}C resonances of adamantane with respect to DSS and via gyromagnetic ratios (see Zilms & BMRB) seems best procedure
- No further action needed

4. Standard samples for setting up experiments and for comparing specs

- Based on experiences of various labs, microcrystalline protein samples are not considered suitable standards due to reproducibility and long-term stability problems
- Ideal seem solid/crystalline peptides, such as:
 - o fMLF (fully characterized, published data, very stable)
 - o AGG (very sharp lines)
 - o Ac-ValLeu
- Not yet decided which of these peptides is best
- If needed by different groups, production of a larger amount could be organized
- To do: Final decision for one or more peptide standards, organization of production

4b.

- A set of standard experiments for easy use will be set up at each lab according to the specific expertise

5. CORTAB

- Considered as essential
- Should be done once per year

6. Drift problem at high field magnets

- So far, no good general lock solution available
- Best option seems 4-channel MAS probe with 2H channel which could be used for locking
- So far, lack of data for comparing drift rates
- To do: provide data on field drifts

7. How to compare probe / spectrometer performance

- Essential but tricky details...
- After long discussions, it seems best to start with crystalline α -glycine for defined S/N comparison
- Important Define CP, SW (ppm), spinning speed, offsets, NS
- To do:
 - o Johanna will suggest precise protocol
 - o This will be distributed to partners for further comments
 - o If accepted, all partners will start to collect S/N data on their instruments

8. Pulse sequence library

- Barth reports on progress in Oschkinat lab on development of BRUKER pulse sequence library
- Contains so far 30-40 tested and documented sequences
- Not yet officially released, discussions with Bruker to add to official distribution
- Considered as very important progress, should be continued and supported

9. Other German Solid-state NMR Labs to be involved

- Huster, Leipzig
- Ulrich, Karlsruhe
- von der Günne, LMU / Gießen
- Buntkowski, Darmstadt
- Heise, Jülich
- Lange, Göttingen
- Saalwächter, Halle
- ... others...? Check G-NMR Liste

10. Expertise

- On the G-NMR Web page we will collect where special equipment and expertise is available, e.g. FAST-MAS, DNP, "uncommon" nuclei, ^1H detection...

Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)- und Elektronenspinresonanz-(EPR)- Spektrometer am Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) der Goethe Universität Frankfurt am Main

I. Definitionen

Das Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz vergibt durch die benannten Verantwortlichen *Zugang* zu den NMR/EPR-Geräten. Mitglieder im BMRZ sind Arbeitskreise, die eigenverantwortlich NMR- oder EPR-Forschung betreiben (2013: Prof. Clemens Glaubitz, Festkörper-NMR und DNP, Prof. Volker Dötsch, Lösungsmittel-NMR, Prof. Peter Güntert, Computergestützte NMR-Spektroskopie, Prof. Thomas Prisner, EPR und DNP, Prof. Harald Schwalbe, Lösungsmittel-NMR, Prof. Jens Wöhnert, Lösungsmittel-NMR).

Das BMRZ umfasst *NMR- und EPR-Geräte mit ausgewiesener Spezifikation gemäß Anlage 1.*

Als *Nutzer* wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten des BMRZs 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.

II. Verpflichtungen des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz

Das BMRZ bietet Nutzern Zugang zu NMR-Geräten an, deren Leistung dem ausgewählten Gerätetyp und dem der technischen Zusatzausstattung entsprechen (spezifiziert in Anlage 1). Die Gerätemanager des BMRZ führen in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durch und optimieren 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 wissenschaftliche Ansprechpersonen benannt:

Prof. Clemens Glaubitz	Geschäftsführender Direktor des BMRZ Büro: N202/006 Telefon: 069/798-29927 E-Mail: glaubitz@chemie.uni-frankfurt.de
Dr. Christian Richter	Wissenschaftliche Ansprechperson für Lösungsmittel-NMR Büro: N160/315 Telefon: 069/798-29137 E-Mail: ric@nmr.uni-frankfurt.de
Dr. Frank Löhr	Wissenschaftliche Ansprechperson für Lösungsmittel-NMR Büro: N230/123 Telefon: 069/798-29627 E-Mail: murph@bpc.uni-frankfurt.de
Dr. Johanna Baldus	Wissenschaftliche Ansprechperson für Festkörper- NMR/DNP Büro: N202/003 Telefon: 069/798-29930 E-Mail: j.baldus@em.uni-frankfurt.de

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

Dr. XY

Wissenschaftliche Ansprechperson für EPR und
Lösungsmittel-DNP
Büro: N140
Telefon: 069/798-
E-Mail:

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.

Nutzer müssen einen Antrag an die benannten wissenschaftlichen Ansprechpersonen stellen. Die Einreichung einer evaluationsfähigen Projektskizze in Schriftform ist in jedem Fall erforderlich, diese kann bevorzugt über elektronische Kommunikationsmedien erfolgen.

Der Regelfall für den Zugang zu den NMR-Geräten des BMRZ ist die wissenschaftliche Zusammenarbeit. Dies ist mit der Komplexität der experimentellen Durchführung wie auch den zeitintensiven Messungen begründet.

Als Ausnahme kann Nutzern ein eigenverantwortlicher Zugang zu dem NMR/EPR-Gerät gewährt werden, der Kenntnisstand kann z.B. durch eigene Publikationen nachgewiesen sein. Der eigenverantwortliche Zugang wird bei den pauschalierten Kosten (Anhang 2) gesondert berücksichtigt.

Die wissenschaftliche Ansprechperson beurteilt die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit und legt den Antrag dem Beirat des BMRZ zur Entscheidung vor. Dieser Beirat besteht aus dem Vorstand des BMRZ und Repräsentanten von DFG geförderten und nicht DFG geförderten Verbundprojekten. Im Falle einer positiven Evaluierung benennt der Beirat des BMRZ das NMR/EPR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Evaluation dauert maximal 10 Arbeitstage.

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>

Die wissenschaftliche Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin für den Zugang zu dem benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit des benannten Gerätes, wobei BMRZ-interne Messungen Vorrang haben, und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR/EPR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, welches die Projektskizze als erstes eingereicht hat.

Für den Fall, dass Unstimmigkeiten zwischen dem Beirat des BMRZ und Nutzern über Nutzungszeitvergabe bestehen, entscheidet der geschäftsführende Direktor des BMRZs über die Nutzung.

Grundsätzlich werden die Messungen durch das geschulte Personal des BMRZs durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen Ansprechpersonen oder von ihnen benannte Mitglieder des BMRZ. In Ausnahmefällen kann es sehr erfahrenen Nutzern gewährt werden, selbst Messungen 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.

Das BMRZ 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 leiten die Mitarbeiter des BMRZs die Primärdaten umgehend weiter, die von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Das BMRZ 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

Das BMRZ ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Das BMRZ gewährleistet nur die technischen Voraussetzungen (siehe II. - Verpflichtungen des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz).

Auf der Grundlage einer wissenschaftlichen Zusammenarbeit, teilen sich Nutzer und wissenschaftliche Ansprechperson die Verantwortung für die Primärdaten bzw. deren Analyse. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen geben volle Unterstützung während der Datenanalyse. Je nach Erfahrungsgrad des Nutzers bezüglich Biomolekularer NMR/EPR-Spektroskopie kann die Datenanalyse im Rahmen der wissenschaftlichen Zusammenarbeit auch von den Mitarbeitern des BMRZs vollständig übernommen werden. Daher teilen sich Nutzer und Mitarbeiter die Urheberschaft über die Primärdaten und deren Analyse.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Durch die wesentlichen Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der ~Interpretation werden die Mitarbeiter Teil der Autorenliste. Die Ausnahme stellt hier der eigenverantwortliche Zugang durch sehr erfahrene Nutzer.

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

Die pauschalierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz der Goethe Universität Frankfurt am Main werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung geregelt.

VII. Gültigkeit

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des geschäftsführenden Direktors des BMRZ in Kraft und wird vom Sprecher der Gerätemanager des BMRZ bezeugt. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Frankfurt, den

14. November 2013

Prof. Clemens Glaubitz

(Geschäftsführender Direktor des BMRZ)

Dr. Johanna Baldus

(Sprecherin der benannten Gerätemanager)

**Anlage 1 zur Nutzerordnung für NMR/EPR-Geräte innerhalb des Biomolekularen
Magnetresonanz Zentrums der Goethe Universität Frankfurt am Main -
Gerätespezifikationen**

Das BMRZ umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 14.11.2013):

950 MHz Bruker (Avance III)	HH001506 (Raum N202-10)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2007
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TCI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal + ^2H Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
900 MHz (Bruker Avance I)	HH007499 (Raum N202-10)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C XYZGRD 5 mm TXI ^1H , ^{13}C , ^{31}P XYZGRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD MAS - TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal + ^2H Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
WB-850 MHz (Bruker Avance III)	HH0005905 (Raum N202-11)
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2008
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HCN 3.2mm MAS HCN 3.2mm MAS HX (^{15}N - ^{31}P)
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

800 MHz (Bruker Avance I)	HH007599 (Raum N201-08)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2001 Konsole, 1995 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C XYZGRD 5 mm QXI ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P XYZ-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + ^2H Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
800 MHz (Bruker DRX)	HH001499 (Raum N165/3108)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 1999
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{13}C , ^{31}P Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Sridhar Sreeramulu
700 MHz (Bruker Avance I)	HH007201 (Raum N201-08)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + ^2H Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
WB-600 MHz (Bruker Avance I)	HH008601 (Raum N202-11)
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HXY 4mm MAS HXY efree 4mm MAS HX (^{15}N - ^{31}P) 4mm MAS HFX static flat coil HX
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

600 MHz (Bruker Avance III)	HH001806 (Raum N201-08)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2006 Konsole, 1995 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD 5 mm TCI cryo ^1H , ^{31}P , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + ^2H Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr

600 MHz (Bruker Avance II)	HH001293 (Raum N201-09)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2003 Konsole, 1986 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TCI cryo ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + ^2H Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr

600 MHz (Bruker DRX mit BACS60 Probenwechsler)	HH001499 (Raum N165/3108)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 1999
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Sridhar Sreeramulu

500 MHz (Bruker Avance II)	HH002293 (Raum N201-09)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2003 Konsole, Magnet 1993
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI ^1H , ^{15}N , ^{13}C XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Frank Löhr

500 MHz (Bruker DRX)	HH003594 (Raum N201-09)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	1995 Konsole, 1985(M)
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI ¹ H, ¹⁵ N, ¹³ C XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + ² H Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Frank Lühr

WB-400 MHz (Bruker Avance II) – DNP fähig	HH006605 (Raum N202-11)
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2006
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	Mehrere spezielle Probenköpfe zur Entwicklung von Lösungsmittel-NMR-DNP Methoden
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

WB-400 MHz (Bruker Avance II) – DNP fähig	HH008701 (Raum N202-11)
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HXY 3.2mm Cryo-MAS HCN with wave guide for DNP 7mm MAS HX (²⁹ Si- ³¹ P) static flat coil HXY
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

**180 GHz G-Band Spektrometer
(Eigenbau)**

Anschaffung / Inbetriebnahme:
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr
Spezifikationen:
Weitere Spezifikationen:
Zuständigkeit: Dr. N.N.

**Bruker Elexsys E580 X- und Q-Band
Spektrometer**

Anschaffung / Inbetriebnahme:
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr
Spezifikationen:
Weitere Spezifikationen:
Zuständigkeit: Dr. N.N.

**Bruker cw ESP300 X-Band
Spektrometer**

Anschaffung / Inbetriebnahme:
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr
Spezifikationen:
Weitere Spezifikationen:
Zuständigkeit: Dr. N.N.

**EPR S-Band Spektrometer
(Eigenbau)**

Anschaffung / Inbetriebnahme:
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr
Spezifikationen:
Weitere Spezifikationen:
Zuständigkeit: Dr. N.N.

Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) der Goethe Universität Frankfurt am Main – Pauschalierte Kosten

Das Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte Kosten (Stand 14.11.2013):

	Feldstärke 500 – 600 MHz	Feldstärke 700 – 800 MHz	Feldstärke ≥ 900 MHz (bzw. 850 MHz WB)
Nutzung als wissenschaftliche Zusammenarbeit	Nutzungsdauer an NMR-Geräten bis zu 7 Tagen:		
	960 €/Tag (40 €/h)*	1.440 €/Tag (60 €/h)*	1.920 €/Tag (80 €/h)*
	Nutzungsdauer an NMR-Geräten zwischen 8 und 20 Tagen:		
	800 €/Tag (33,34 €/h)*	1.200 €/Tag (50 €/h)*	1.600 €/Tag (66,67 €/h)*
	Nutzungsdauer an NMR-Geräten von 21-31 Tagen (Festpreis)		
	16.000 € (21,51 €/h)**	24.000 € (32,86 €/h)**	32.000 € (43,02 €/h)**

* zur Information, Kosten werden Tageweise abgerechnet.

** zur Information, bei 31 Tagen Nutzungsdauer, Kosten werden Tageweise abgerechnet.

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, Urhebererschaft 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

14. November 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 14.11.2013):

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 14.11.2013):

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.