

# Nutzungsordnung für die Geräte der NMR-Plattform an der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät der Friedrich-Schiller-Universität (FSU) Jena

## §1 Allgemeines

Die NMR-Plattform ist eine wissenschaftliche Dienstleistungseinrichtung an der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät der FSU, welche gemeinschaftlich durch das Institut für Anorganische und Analytische Chemie (IAAC) und das Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie (IOMC) betrieben wird. Sie dient der Anwendung NMR-spektroskopischer Methoden auf wissenschaftliche Fragestellungen aus den Bereichen Chemie, Biochemie, Pharmazie, Materialwissenschaften und angrenzender Forschungsgebiete sowie der Methodenentwicklung. Konfiguration und Leistungsumfang der einzelnen Geräte sind im Anhang 1 dieser Nutzungsordnung zusammengefasst sowie im Internet einsehbar (<http://www.nmr.uni-jena.de>). Wissenschaftliche und technische Ansprechpersonen sind in Anhang 2 benannt.

## §2 Durchführung von Messungen

(1) Für die Ermittlung von *Routine-NMR-Spektren* ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , einfache 2D-Korrelationen) gängiger Verbindungen stehen *ausgewiesene Selbstmessgeräte* rund um die Uhr zur Verfügung. Diese sind für die erste Charakterisierung und Reinheitsüberprüfung bevorzugt zu nutzen. Zur Auswertung steht geeignete Software zur Verfügung. Interessierte Nutzer werden durch den Leiter der NMR-Plattform oder einen von ihm autorisierten Mitarbeiter in die Bedienung der Geräte eingewiesen, erhalten eine Nutzerkennung (i.d.R. Arbeitsgruppen-gebunden) und bestätigen diese Einweisung mit ihrer Unterschrift. Die Autorisierung ist personengebunden, nicht übertragbar und kann jederzeit vom Leiter der NMR-Plattform widerrufen werden. (2) Mit der Registrierung in der Log-Datei kommt ein Messauftrag zustande (siehe §6). Für Messungen im Selbstmessbetrieb ist das Ausfüllen eines Messauftrages nicht nötig, jedoch gelten die gleichen Anforderungen an die Probenbeschaffenheit und Probenkennung wie im Service-Betrieb (s.u.). (3) In wissenschaftlich begründeten Einzelfällen können sehr erfahrene Nutzer auch zum selbständigen Messen an anderen NMR-Geräten mit höherer Feldstärke oder abweichender Konfiguration autorisiert werden.

(4) Im *Service-Betrieb* werden NMR-Messungen vorrangig *automatisiert* durchgeführt. Die Bedienung der Geräte erfolgt dabei grundsätzlich durch Mitarbeiter der NMR-Plattform. Der Nutzer hinterlegt dazu die zu messenden Proben zusammen mit dem vollständig ausgefüllten Auftragsformular an der Annahmestelle und achtet auf das Einhalten der Probenkriterien, welche auf dem Formular ausgeführt sind (siehe Anhang 3). Die aktuelle Fassung des Formulars ist im Internet abrufbar (<http://www.nmr.uni-jena.de>). (5) Messaufträge von explosiven, selbstentzündlichen oder anderweitig gefährdenden Stoffen sind der NMR-Plattform im Vorfeld eindeutig anzuzeigen. Dies gilt insbesondere für Stoffe, die besondere Schutzmaßnahmen bei einer etwaigen Beschädigung des Probenröhrchens erfordern. Radioaktive Proben können nur nach spezifischer Freigabe durch den Strahlenschutzbevollmächtigten der FSU Jena vermessen werden. (6) Nicht den Kriterien entsprechende Proben werden nicht gemessen und wieder zur Abholung bereitgestellt. Die NMR-Plattform kann eine Messung auch wegen technischer Bedenken sowie aus Sicherheitsgründen ablehnen. (7) Mit der Probenabgabe kommt ein Messauftrag zustande, für dessen Ausführung eine eindeutige Zuordnung des Nutzers und ggfs. Kostenstellenangabe nötig ist (siehe §6). Nach Abschluss der Messung werden die Proben zusammen mit dem Messauftragsformular zur Abholung an der dafür vorgesehenen Stelle hinterlegt, und dort zeitnah wieder vom Nutzer abgeholt. (8) Für länger als einen Monat nicht abgeholt Proben besteht kein Anspruch auf Rückgabe.

## §3 Messzeitvergabe

(1) Angenommene Proben werden entsprechend der wissenschaftlichen Fragestellung, der Komplexität und Menge der Probensubstanz sowie hinsichtlich betrieblicher Aspekte auf die

vorhandenen NMR-Geräte verteilt. (2) Im Service-Betrieb erfolgt die Messung der Proben grundsätzlich in der Reihenfolge ihrer Abgabe bzw. Hinterlegung an der Sammelstelle. (3) Interne Messaufträge der FSU haben Vorrang vor externen Auftragsmessungen. (4) Für instabile Proben oder Langzeitexperimente kann der Nutzer einen Termin vereinbaren und wird zu diesem Zeitpunkt priorisiert behandelt. Terminänderungen müssen spätestens am vorausgehenden Werktag mitgeteilt werden. Wird diese Frist nicht eingehalten, so kann die NMR-Plattform für die reservierte Messzeit ein Nutzungsentgelt erheben (§6).

#### §4 Qualität der Messungen

(1) Das Servicepersonal der NMR-Plattform führt regelmäßig Qualitätskontrollen mit dedizierten Standardproben an allen Spektrometern durch. Sie optimiert experimentelle und technische Parameter, um eine gleichbleibend hohe Qualität der NMR-Messungen zu gewährleisten. (2) Die Mitarbeiter der NMR-Plattform beraten den Nutzer bei der Probenoptimierung. Für eine möglicherweise abweichende Qualität der Messdaten, die aus der individuellen Probenbeschaffenheit resultiert, ist die NMR-Plattform jedoch nicht verantwortlich.

#### §5 Zugriff auf Messdaten, Datensicherung

(1) Der Umgang mit Proben und Messdaten erfolgt grundsätzlich vertraulich. Die Primärdaten werden nach Fertigstellung der Messung an das Rechenzentrum der FSU übertragen und dort für den zugangsgeschützten Abruf durch den Nutzer bereitgestellt. Die vertraulichen Zugangsdaten erhält der Nutzer auf Anfrage bei der NMR-Plattform. (2) Der Nutzer wird darauf hingewiesen, dass Primärdaten für Veröffentlichungen nach den allgemein bekannten Vorgaben der DFG mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden müssen. Dies erfolgt aktuell durch die NMR-Plattform im Archivbereich des Universitätsrechenzentrums (URZ). Für den Fall, dass dieser Archivbereich durch das URZ nicht mehr im ausreichenden Maße zur Verfügung steht, werden die Nutzer umgehend informiert. Die Verantwortung für die Aufbewahrung der Primärdaten liegt dann allein beim Nutzer.

#### §6 Nutzungsentgelte

(1) Die NMR Messungen sind grundsätzlich kostenpflichtig. Die Abrechnung erfolgt pauschalisiert, **alle Entgelte werden je angefangene Stunde Messzeit erhoben**, unabhängig von der tatsächlich durchgeführten Zahl der Experimente. (2) Die Nutzungsentgelte für *Angehörige des IAAC und des IOMC* werden intern durch die direkte Beteiligung dieser Institute an den laufenden Kosten für den Betrieb und den Erhalt der Geräte erbracht („Betreiberkreis“). (3) Von *weiteren Angehörigen der FSU Jena* werden für Messungen im Servicebetrieb nach Aufwand gestaffelte, pauschalisierte Nutzungsentgelte zur internen Verrechnung erhoben, die jährlich überprüft und nötigenfalls dem veränderten Kostenrahmen angepasst werden. Die aktuell gültigen Sätze finden sich im Anhang 4. (4) Im günstigeren automatisierten Selbstmessbetrieb gelten reduzierte Sätze (siehe Anhang 4). (5) Angehörige der FSU, die die NMR-Plattform regelmäßig in erheblichem Umfang beanspruchen, können die Aufnahme in den Betreiberkreis der NMR-Plattform beantragen bzw. dazu aufgefordert werden. (6) Für *Auftragsmessungen von Personen oder Institutionen*, die nicht der FSU angehören („Externe“), erfolgt die Abrechnung grundsätzlich nach Vollkostenrechnung, sofern keine anderslautende Vereinbarung mit der NMR-Plattform getroffen wurde. Hier wird unabhängig von der Anzahl der durchgeführten Experimente und der genutzten Geräteklasse/Feldstärke ein Entgelt erhoben, das durch eine Vollkostenrechnung ermittelt wird und in Abstimmung mit den zuständigen Stellen der Universitätsverwaltung jährlich angepasst wird. Der aktuell gültige Satz findet sich in Anhang 4. (7) Externe Auftragsmessungen müssen immer als solche bei der NMR-Plattform gekennzeichnet und angemeldet werden. Der Versuch, externe Auftragsmessungen intern abzuwickeln, ist unzulässig und führt in jedem Fall zur Nachberechnung des entsprechenden Nutzungsentgeltes für den Auftraggeber. (8) Die Entgelte für externe Nutzer verstehen sich zuzüglich Umsatzsteuer.

## §7 Urheberschaft / Veröffentlichung

(1) Die Inhaberschaft/Urheberschaft für die Primärdaten und deren Analyse liegt alleinig beim Nutzer, sofern keine weitergehende wissenschaftliche Zusammenarbeit mit der NMR-Plattform vereinbart wurde. (2) Sind Mitarbeiter der NMR-Plattform wesentlich an der Konzeption und Durchführung von Experimenten und/oder wissenschaftlichen Analyse der Daten und damit an der Erlangung wissenschaftlicher Ergebnisse beteiligt, so sind diese entsprechend den allgemein anerkannten Regeln der guten wissenschaftlichen Praxis als Co-Autor(en) in Veröffentlichungen mit aufzunehmen. Dies gilt gleichermaßen auch für Patentanmeldungen, sofern der Beitrag eine Berücksichtigung als Erfinder rechtfertigt. (3) Bei zu publizierenden Daten aus dem Servicebetrieb ohne einschlägige wissenschaftliche Beteiligung der NMR-Plattform wird um Erwähnung der NMR-Plattform in der Danksagung („Acknowledgement“) gebeten, zum Beispiel in folgender Form: “We would like to acknowledge the NMR platform at the Friedrich Schiller University Jena for support in NMR spectroscopy”.

## §8 Haftung

(1) Das Servicepersonal der NMR-Plattform ist bestrebt, so sorgfältig wie möglich mit den Proben umzugehen. Dennoch haften die Mitarbeiter der NMR-Plattform nicht für den Verlust oder das Verwechseln der Probensubstanz (z.B. an der Abgabestelle) oder für Beschädigungen des Probenröhrchens, sofern diese nicht grob fahrlässig oder vorsätzlich herbeigeführt wurde. (2) Für Reparaturen und Aufwendungen an Geräten der NMR-Plattform, die aufgrund missbräuchlichen, eigenmächtigen oder fahrlässigen Umgangs von Nutzern mit Proben oder Geräten nötig werden, sowie solchen, die durch Missachtung der Nutzerordnung oder von Anweisungen des Personals der NMR-Plattform entstehen, haftet der Nutzer, ggfs. dessen Fachvorgesetzter. (3) Die NMR-Plattform übernimmt keine Verantwortung für die Verwendung von Messdaten oder für die missbräuchliche Nutzung ihrer Einrichtungen.

## §9 Gültigkeit

Die Nutzungsordnung wird von den Institutsräten der Institute IAAC und IOMC beschlossen und mit den Unterschriften der Institutsdirektoren von IAAC und IOMC sowie des Leiters der NMR-Plattform und des Kanzlers der Friedrich-Schiller-Universität in Kraft gesetzt. Sie ist für alle Nutzer verbindlich und bleibt in der verabschiedeten letzten Fassung bis zu ihrem Widerruf gültig.

Jena, den 1.12.2015,



(Prof. Dr. Hans-Dieter Arndt, IOMC)



(Prof. Dr. Christian Robl, IAAC)



(Dr. Peter Bellstedt, Leiter der NMR-Plattform)



(Dr. Klaus Bartholmé – Kanzler der FSU)

## Anhang 1: Übersicht der vorhandenen Geräte an der NMR-Plattform (Stand 30.01.2019)

- Standort IAAC (Humboldtstraße 8, Raum K010)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung <sup>1</sup>	Selbstmessgerät
400 MHz	Avance I	BBO, z-Gradient	+25°C bis +60°C	Nein
400 MHz	Avance III	BBO, z-Gradient, ATM	-40°C bis +60°C	Nein
600 MHz	Avance III	BBO, z-Gradient, ATM QXI, xyz-Gradient, ATM CPTCI, z-Gradient, ATM	-40°C bis +60°C -40°C bis +60°C 0°C bis +60°C	Nein

- Standort IOMC 1 (Humboldtstraße 10, Raum K005B & K006)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung <sup>1</sup>	Selbstmessgerät
250 MHz	Avance I	BBO, z-Gradient	+20°C bis +60°C	Nein
300 MHz	Fourier	Dual <sup>1</sup> H/ <sup>13</sup> C, z-Gradient	-	Ja
400 MHz	Avance III	BBFO, z-Gradient	-40°C bis +60°C	Nein

- Standort IOMC 2 (ZAF, Philosophenweg 7, Raum 109)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung <sup>1</sup>	Selbstmessgerät
300 MHz	Avance I	Dual <sup>1</sup> H/ <sup>13</sup> C, z-Gradient	-	Ja
400 MHz <sup>2</sup>	Avance III	4 mm <sup>1</sup> H/X-MAS	-	Nein

- Standort IOMC 3 (CEEC, Philosophenweg 7a, Raum K001)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung <sup>1</sup>	Selbstmessgerät
500 MHz <sup>2</sup>	Avance III HD	4 mm <sup>1</sup> H/ <sup>13</sup> C HR-MAS z-Gr. BBO (Prodigy), z-Gradient	0°C bis +60°C	Ja

<sup>1</sup> Der angegebene Bereich bezieht sich auf den automatisierten Routine-Messbetrieb. In Sonderexperimenten sind ggf. auch tiefere und/oder höhere Temperaturen möglich.

<sup>2</sup> MAS und HR-MAS-Messungen stehen aufgrund der zeitintensiven Probenvorbereitung nicht für den Routine-Messbetrieb zur Verfügung. Weitere Informationen zu möglichen Sonderexperimenten erfragen Sie bitte beim NMR-Personal.

## Anhang 2: Ansprechpersonen

Dr. Peter Bellstedt                      Leiter der NMR-Plattform, wissenschaftliche Beratung, Administration  
Telefon: 03641/9-48253  
eMail: peter.bellstedt@uni-jena.de

Friederike Pielenz                      Technische Ansprechperson Hardware, Datenverarbeitung, Software  
Telefon: 03641/9-48258  
eMail: f.pielenz@uni-jena.de

Bärbel Rambach                      Technische Ansprechperson Messung, Standort IAAC  
Telefon: 03641/9-48141  
eMail: baerbel.rambach@uni-jena.de

Rica Patzschke                      Technische Ansprechperson Messung, Standorte IOMC  
Telefon: 03641/9-48248  
eMail: rica.patzschke@uni-jena.de

# Messauftrag NMR-Plattform

Datum: \_\_\_\_\_

AG / Professur : \_\_\_\_\_

Vor- u. Nachname : \_\_\_\_\_

Telefon: \_\_\_\_\_

<b>Probenbezeichnung:</b>	<input style="width: 20px; height: 20px;" type="text"/> <input style="width: 20px; height: 20px;" type="text"/> <input style="width: 20px; height: 20px;" type="text"/>	-	<input style="width: 20px; height: 20px;" type="text"/>	<b>Eingewogene Masse:</b> _____ mg
	2-3 Initialen		max. 6 stelliges Probenkürzel	
<b>Temperierung:</b>	<input type="checkbox"/> RT	<input type="checkbox"/>	_____ °C	<b>Summenformel</b> (der Monomere): _____

**Deut. Lösungsmittel:** **01 02 03 04 05 06 07 08 09 10 11 12** ← entsprechende Zahl(en) **einkreisen!**

Aceton	CD <sub>3</sub> CN	Benzol	CDCl <sub>3</sub>	D <sub>2</sub> O	DMF	DMSO	MeOD	CD <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Pyr	THF	Toluol
--------	--------------------	--------	-------------------	------------------	-----	------	------	---------------------------------	-----	-----	--------

...bei Gemischen: \_\_\_\_:\_\_\_\_  
(Verhältnis)

**Strukturvorschlag / Fragestellung / Bemerkungen:**

**Gewünschte Experimente**

bitte hier eintragen:

	Nur für Mitarbeiter NMR-Plattform:	
	EXPNO	Interne Bemerkungen (bitte ignorieren)
(1)	#	
(2)	#	
(3)	#	
(4)	#	
(5)	#	
(6)	#	

Füllhöhe: 4 cm

NMR-Röhrchen müssen mindestens 18 cm, dürfen jedoch höchstens 24 cm lang sein. Die Füllhöhe sollte exakt **4 cm** betragen. Proben, die besondere Schutzmaßnahmen bei einer etwaigen Beschädigung des Röhrchens erfordern, oder die explosiv oder selbstentzündlich sind, müssen vorher angemeldet werden. Nicht mit uns abgesprochene Auftragsmessungen unter AG-Accounts sind untersagt. Nach Fertigstellung der Messung finden Sie die Daten auf unserem Server im Rechenzentrum unter Ihrer Probenbezeichnung. **Mit Erteilung des Messauftrages bestätigen Sie die Anerkennung der geltenden NMR-Nutzerordnung.** Weitere Informationen finden Sie auch auf [www.nmr.uni-jena.de](http://www.nmr.uni-jena.de).

#### Anhang 4.

##### A) Nutzungsentgelte\* der NMR-Plattform für Angehörige der FSU (Stand 30.01.2019):

Messart bzw. Experiment	Nutzungsentgelt (pro Stunde)
Einfache Messung im Selbstmessbetrieb bei niedriger Feldstärke (250-300 MHz)	2,50 EUR
Routinemessung im Automatisierungsbetrieb bei mittlerer und hoher Feldstärke (250-600 MHz)	5 EUR
Nicht-automatisierte Sondermessungen bei hoher Feldstärke ( $\geq 500$ MHz)	25 EUR, max. 250 EUR/Tag

##### B) Nutzungsentgelt\* der NMR-Plattform für externe Auftragsmessungen (Stand 30.01.2019):

129,- EUR pro Stunde, zuzüglich Umsatzsteuer.

\* Berechnungsgrundlage ist jeweils die Netto-Messzeit laut Log-Datei des NMR-Spektrometers, bei externen Auftragsmessungen zzgl. anfallender Vor- und Nachbereitungszeit sowie Beratung.