

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. N.N.

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

02.03.2015

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 17.05.2013):

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)	HH00005905 (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 23.01.2017). Unabhängig von der unterhalb dargestellten Einteilung können Nutzer bei der DFG pauschalierte Kosten in Höhe von maximal 32.000 € pro Jahr beantragen. Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für diejenigen Arbeitsgruppen von der dargestellten Tabelle abweichen, falls sie sich bei der Eranschaffung eines NMR/EPR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.

	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, bis 31 Tage Nutzungsdauer werden die Kosten tageweise abgerechnet, bei darüber hinaus erfolgender Nutzung können keine weiteren Kosten beantragt werden.