



UNIVERSITÄT
PADERBORN

**Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer
im Department Chemie der Universität Paderborn**

I. Definitionen

Die zentrale Analytik des Departements Chemie vergibt durch einen benannten Verantwortlichen Zugang zu den Kernspinresonanzgeräten.

Die zentrale Analytik des Departments Chemie umfasst Kernspinresonanzgeräte mit ausgewiesener Spezifikation gemäß *Anhang 1*.

Als *Nutzer* wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern und Forscherinnen bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten der zentralen Analytik 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 DFG verantwortlich ist.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

II. Verpflichtungen der zentralen Analytik des Departments Chemie

Die Analytik 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 (d.h. der jeweiligen Arbeitsgruppe) bezahlt werden müssen. Diese Kosten sind in entsprechenden Kategorien pauschaliert und werden im *Anhang 2* dieser Nutzerordnung aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftlich- bzw. technisch-verantwortliche Personen benannt:

PD Dr. Hans Egold Gesamtverantwortlicher und wissenschaftliche Ansprechperson
Büro: NW2.822
Telefon: 05251/60-2489 (Büro)
 05251/60-2130 (NMR-Labor)
E-Mail: hans.egold@upb.de

Karin Stolte Technische Ansprechperson
Büro: K1.21
Telefon: 05251/60-2130
E-Mail: karin.stolte@upb.de

Andrea Harbarth Technische Ansprechperson (Vertretung für Frau Stolte)
Büro: K4.27
Telefon: 05251/60-5710
E-Mail: andrea.harbarth@upb.de

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

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die an einer deutschen Hochschule oder wissenschaftlichen Forschungseinrichtung beschäftigt sind. Eine Nutzung durch andere Bereiche (z. B. Industrie) ist im Rahmen von Kooperationen oder als Auftragsforschung möglich; in diesem Fall gelten nicht die im *Anhang 2* genannten Pauschalkosten. Drei verschiedene Arten der Nutzung sind in der zentralen Service-Einrichtung möglich:

1. Im Regelfall wird eine Messung über die Automation mit automatischem Probenwechsler vom Servicepersonal gestartet. Der Messauftrag¹ ist mit der Probe beim Servicepersonal abzugeben. Die Messung setzt eine Erlaubnis durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers voraus.
2. Komplizierte Messungen werden vom Servicepersonal ohne Automation durchgeführt. Hierzu müssen die Nutzer einen Messauftrag¹ bei den benannten Ansprechpersonen

¹ Das Formular für den Messauftrag ist auf der Internetseite der Zentralen Analytik erhältlich.

abgeben. Auch hier ist die Bestätigung des Antrags durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers vorausgesetzt.

3. Durch den Gesamtverantwortlichen speziell eingewiesene Nutzer können eigenverantwortlich nicht automatisierte Messungen am NMR AV300 oder automatisierte Messungen am NMR AV500 durchführen. Die Messungen sind in einem ausliegenden Logbuch zu dokumentieren. Die Einträge im Logbuch gelten als Bestätigung, dass der Kostenstellenverantwortliche die Messungen genehmigt hat.

Die Ansprechperson entscheidet, ob die Durchführung einer Messung technisch machbar bzw. wissenschaftlich sinnvoll ist. Im Falle einer positiven Evaluierung benennt die Ansprechperson das NMR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden, wie auch die erforderliche Dauer der Nutzung. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR-Gerät beworben haben, erhält in der Regel dasjenige Projekt den Vorzug, dessen Antrag als Erstes eingereicht wurde. Entsprechend werden Messungen am Probenwechsler ebenfalls in der Reihenfolge des Eingangs der Proben abgearbeitet.

Grundsätzlich werden die Messungen durch geschultes Personal des Instituts durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen und technischen Ansprechpersonen. Sehr erfahrene Nutzer können werden, selbst Messungen außerhalb der Automation durchführen. Eine vorherige Schulung und eine Einweisung in ein Gerät durch den Gesamtverantwortlichen ist dafür zwingend 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, entscheidet der Gesamtverantwortliche der Serviceabteilung über die Nutzung.

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 geschieht über eine gesicherte Datenfernübertragung auf einen gesicherten Datensever. Die Zentrale Analytik 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 Analytik ist für die Qualität der Primärdaten, soweit sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Die Service-Einrichtung gewährt nur für die technischen Voraussetzungen (siehe II. - Verpflichtungen der Zentralen Analytik des Departments Chemie).

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

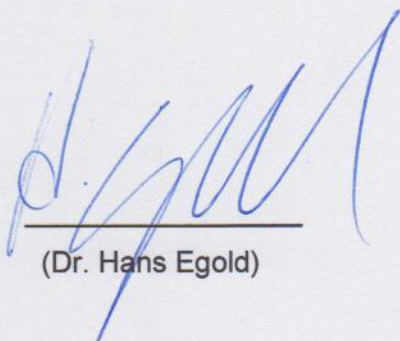
VI. *Pauschalisierte Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten*

Die pauschalisierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten der Zentralen Analytik des Departments Chemie der Universität Paderborn werden im *Anhang 2* dieser Nutzerordnung geregelt.

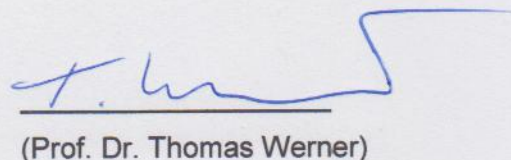
VII. *Gültigkeit*

Die aktualisierte Version der Nutzerordnung tritt mit Unterschrift des Sprechers des Departments Chemie und des Gesamtverantwortlichen der Zentralen Analytik des Departments Chemie in Kraft.

Paderborn, den 01.01.2024



(Dr. Hans Egold)



(Prof. Dr. Thomas Werner)

**Anlage 1 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb der
Zentralen Analytik des Departments Chemie der Universität Paderborn -
Gerätespezifikationen**

Die Zentrale Analytik des Departments Chemie umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 01.01.2024):

**300 MHz (Bruker Avance I,
kein Probenwechsler)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung/Inbetriebnahme:	1988(Magnet), 2003(Konsole)
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm QNP-Kopf (^1H , ^{13}C , ^{29}Si , ^{31}P) 5 mm SEI-Dualkopf (^1H , ^{19}F)
Weitere Spezifikationen:	2 Kanäle
Zuständigkeit:	Dr. Hans Egold, Karin Stolte

**500 MHz (Bruker Avance I,
BACS60 Probenwechsler)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung/Inbetriebnahme:	2003
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm PA BBO (BB / ^1H), Z-Grad mit ATM 5 mm TBI ($^1\text{H}/^{31}\text{P}/\text{BB}$), Z-Grad
Weitere Spezifikationen:	3 Kanäle Tiefentemperaturmessungen möglich
Kühlung der Proben:	LN2-Adapter
Zuständigkeit:	Dr. Hans Egold, Karin Stolte

**700 MHz (Bruker NEO,
SampleXpress Probenwechsler)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung/Inbetriebnahme:	2017
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm PA BBI (BB/ ^1H), Z-Grad mit ATM (-50°C bis 150°C) 5 mm CPP BBO (BB/ ^1H und ^{19}F), Z-Grad (-40°C bis 80°C) mit ATM
Kühlung der Proben:	BCU II (bis -40°C)
Weitere Spezifikationen:	3 Kanäle
Zuständigkeit:	Dr. Hans Egold, Karin Stolte

Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb der Zentralen Analytik des Departments Chemie der Universität Paderborn - Pauschalierte Kosten²

Die Zentrale Analytik des Departments Chemie erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte akkumulierte **Kosten pro Messung** (Stand 01.01.2023 siehe unten). Jährlich werden alle angefallenen Verbrauchs- und Reparaturkosten der NMR-Abteilung summiert und die anfallenden Kosten auf die Arbeitsgruppen umgerechnet. D.h. die Kosten pro Messung variieren jedes Jahr. Die unten aufgeführten Kosten aus dem Jahr 2023 sind typisch.

NMR AVANCE 300

0,65 € (z.B. ¹H oder ¹⁹F mit 16 Scans)

NMR AVANCE 500

0,65 € (kurze Messung wie z.B. ¹H mit 16 Scans)

1,30 € (längere Messung z.B. ¹³C mit 256 Scans)

2,50 € (2D-Spektren)

NMR ASCEND 700

0,65 € (kurze Messung wie z.B. ¹H oder ¹⁹F mit 16 Scans, ¹³C mit 64 Scans)

1,30 € (längere Messungen von z.B. dünnen Proben, 2D-Messungen mit NUS, NOAH/NUS)

5 bis 20 € (Messungen über 20 min und mehr. Je nach Aufwand [20 € pro Stunde].

Typischerweise von Hand parametrisiert und ohne Automatik gemessen. Beispiele: 2D-Spektren mit spezieller Parametrisierung, T₁- oder T₂-Messungen, DOSY, pNMR, VT-NMR usw.)

² Die Pauschalkosten gelten für Nutzer deutscher Hochschulen oder Forschungseinrichtungen. Für sonstige Nutzer gelten Preise auf Anfrage.