

Nutzungsordnung der zentralen NMR-Serviceabteilung des Instituts für Organische Chemie, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Universität Leipzig

Stand: 11.01.2021

1. Präambel

Der zentrale NMR-Service des Instituts für Organische Chemie, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Universität Leipzig (zentraler NMR-Service) orientiert sich an den Empfehlungen des „*DFG Network of German NMR Centers (G-NMR)*“ (www.g-nmr.de) und der DFG zum Betrieb von Gerätezentren. Spezifische Aspekte, die die Gegebenheiten an der Universität Leipzig berücksichtigen, werden in den folgenden Paragraphen definiert.

2. Personal

Gesamtverantwortlicher Leiter

Dr. Maik Icker (MI)
Büro: Technikum Analytikum, R170, Linnéstraße 3, 04103 Leipzig
Tel: 0341/97-36560
E-Mail: maik.icker@uni-leipzig.de

Stellvertretende Leiter

Dr. Martin Kretzschmar
Büro: Organische Chemie, R165, Johannisallee 29, 04013 Leipzig
Tel: 0341/97-36574
E-Mail: martin.kretzschmar@uni-leipzig.de

Dr. Marcel Sickert
Büro: Organische Chemie, R162, Johannisallee 29, 04013 Leipzig
Tel: 0341/97-36557
E-Mail: marcel.sickert@uni-leipzig.de

Technisches Personal

Katrin Hoffmann
Büro: Technikum Analytikum, R171, Linnéstraße 3, 04103 Leipzig
Tel: 0341/97-36561
E-Mail: katrinh@chemie.uni-leipzig.de

N.N.

3. Definitionen

Der *zentrale NMR-Service* bedient hauptsächlich die Professuren/Arbeitsgruppen am Institut für Organische Chemie der Universität Leipzig: Die Organisation des zentralen NMR Service an den in Anhang 1 aufgelisteten Geräten erfolgt durch den benannten Leiter.

Als *Nutzer* wird eine Arbeitsgruppe bestehend aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten des zentralen NMR-Service erhalten. Die Arbeitsgruppe wird von einem Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte der durchzuführenden Messungen bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG verantwortlich ist. Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

In jedem Arbeitskreis gibt es in der Regel mindestens einen benannten „*NMR-Officer*“ (Verantwortlicher der Arbeitsgruppe und/oder NMR-Experte innerhalb der Arbeitsgruppe), der/die als direkter Ansprechpartner für die einzelnen Nutzer und als Schnittstelle zu den Leitern der Serviceabteilung fungiert. Die Leiter der NMR Serviceabteilung und die *NMR-Officers* besitzen Weisungsbefugnis für NMR-Angelegenheiten gegenüber Mitarbeitern der jeweiligen Arbeitskreise.

4. Aufgaben

Der zentrale NMR-Service bietet Nutzern den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten an. Der Leiter und Mitarbeiter des NMR-Service sind für den ordnungsgemäßen Betrieb dieser NMR-Geräte zuständig. In regelmäßigen Abständen werden Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durchgeführt. Geräte- und Messparameter werden von dem Leiter in enger Rückkopplung mit den Arbeitsgruppen an die jeweiligen Messprobleme angepasst, um eine möglichst hohe Qualität der Spektren zu gewährleisten.

5. Voraussetzungen für den Zugang und Auswahlverfahren eines Nutzers

Messberechtigt sind alle wissenschaftlichen Mitarbeiter des Instituts für Organische Chemie der Universität Leipzig, sowie alle Studierenden an diesem Institut. Nutzer aus anderen Instituten und Fakultäten der Universität Leipzig können auf Antrag zugelassen werden. Nutzer im Sinne von Kooperationen bzw. Auftragsforschung können auch Wissenschaftler an anderen Hochschulen im In- und Ausland sein, sowie Firmen, die innerhalb der Bundesrepublik Deutschland registriert sind.

Die hohe Anzahl an Nutzern mit unterschiedlichen Bedürfnissen und Arbeitsweisen bedingt uneingeschränkt das disziplinierte Einhalten der bestehenden Regeln, sowie einen weit reichenden kollegialen Umgang zwischen den Nutzern und den Verantwortlichen. Im Falle von gravierendem andauerndem Fehlverhalten können die Rechte einzelner Nutzer oder einzelner Arbeitskreise eingeschränkt werden, sowie der Betriebsmodus durch die Leiter angepasst werden.

6. Durchführung und Einteilung der Messungen

Durchführung:

Zwei verschiedene Arten der Nutzung sind im zentralen NMR-Service möglich:

1. Automation: Im Regelfall wird eine Messung über die Automation mit automatischem Probenwechsler vom Nutzer gestartet. Der Messauftrag kommt hierbei durch die Eintragung in die Messliste im ICON-NMR und Logbuch zustande. Die Aufträge werden in der Regel in der Reihenfolge der Eintragung der Probe in ICON-NMR abgearbeitet.

2. Manuelle Messung: Bei komplizierten Messungen ist es möglich, dass Messungen auf Antrag der Nutzer an Herrn Dr. Icker oder dessen Stellvertreter selbst (im Falle von sehr erfahrenen Nutzern), einen *NMR-Officer* oder durch das Servicepersonal durchgeführt werden. Der Leiter oder sein Stellvertreter entscheiden über die zeitliche, technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit. Im Falle einer positiven Evaluierung wird das NMR-Gerät benannt, an dem die Messungen durchgeführt werden, sowie auch die Dauer und der Termin der Nutzung. Die Messzeiten für manuelle Messungen werden im Logbuch des jeweiligen Geräts mit Angabe der Nutzergruppe dokumentiert.

Die zentrale NMR-Service 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.

Einteilung:

Die Einteilung der Messungen auf die vorhandenen Messgeräte (Anhang 1) hängt jeweils von der Beschaffenheit der Probe und der jeweiligen Fragestellung ab. Nutzer (wissenschaftliche Mitarbeiter) werden in regelmäßigen Abständen von dem Leiter geschult, um die Wahl des Messgeräts fachgerecht selbst zu entscheiden. Im Falle einseitiger Überlastung von Messgeräten kann der Leiter eine Umbelegung veranlassen, um den Gerätepool möglichst effizient auszunutzen.

Studierende (Bachelor):

¹H-Spektren und einfache Korrelationsexperimente für Studierende im Rahmen von Praktika und Bachelorarbeiten werden in der Regel am Bruker Fourier 300 und Varian MERCURYplus 300, andere Heterokern-Spektren am Varian MERCURYplus 400 durchgeführt. Die Einteilung erfolgt anhand der Messaufgaben und der Verfügbarkeit/Auslastung der jeweiligen Messgeräte zum Zeitpunkt des Analysenauftrags.

Studierende (Masterarbeit) und Wissenschaftliche Mitarbeiter:

Anspruchsvolle Messungen für Studierende (Masterarbeit) und Wissenschaftliche Mitarbeiter in der Forschung werden am Bruker AVIII 400 und Varian MERCURYplus 400 (direkte Probenköpfe, Arbeitspferde für ¹H und X-Kerne, schnelle Reaktionskontrolle) aufgesetzt. Höchste Ansprüche werden durch das Bruker AVIII 400 bedient.

Hoch- oder Tieftemperaturmessungen für Studierende und Wissenschaftliche Mitarbeiter werden bevorzugt am Varian MERCURYplus 400 bzw Bruker AVIII 400 durchgeführt. Messungen zur Zerfalls- oder Bildungskinetik werden je nach Beschaffenheit der Probe und des zu beobachtenden Kerns am Bruker AVIII 400 und Varian MERCURYplus 400 eingeteilt.

Schnell benötigte Messungen, z.B. im Rahmen der Reaktionskontrolle, werden bevorzugt am Varian MERCURYplus 300 (^1H , ^{19}F) abgewickelt.

7. Datensicherung und Datenweitergabe

Nach Abschluss der Messung werden die Primärdaten umgehend und automatisch an einen zentralen File-Server weitergeleitet und an den Nutzer übergeben. 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 der Primärdaten obliegt dem Nutzer.

8. Datenanalyse, Urheberschaft und Veröffentlichungen

Der zentrale NMR-Service ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Die Service-Einrichtung gewährt nur für die technischen Voraussetzungen. 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.

9. Kosten für NMR-Messungen

Die Kostenerhebung für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten wird, wie in Anlage 2 festgehalten, geregelt. Die Abrechnung der anfallenden Kosten beruht auf einem Punktesystem. Dabei wird jedes durchgeführte NMR-Experiment mit einer bestimmten Anzahl von Punkten bewertet und die jährlich tatsächlich anfallenden Betriebs- und Reparaturkosten auf die gesammelten Punkte der Nutzer umgerechnet.

Die detaillierten Kostenabrechnungen und –verbuchungen erfolgen durch den Leiter des zentralen NMR-Services anhand der akkumulierten Messpunkte (jeweils dokumentiert im Accounting von ICON-NMR bzw. im Logbuch) auf ein dafür eingerichtetes Konto der Universität Leipzig. Die Einnahmen werden ausschließlich zur Deckung von anfallenden Kosten im NMR-Service verwendet.

10. Gültigkeit

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des Institutsleiters und des Leiters der NMR-Service-Einheit in Kraft. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Leipzig, den 11. Januar 2021

Prof. Dr. Thorsten Berg

(Institutsleiter Organische Chemie)

Dr. Maik Icker

(Leiter des zentralen NMR-Service)

ANHANG 1 Übersicht der verfügbaren Geräte im zentralen NMR-Service

Gerät	Ausstattung	Verwendung	Ansprechpartner, Raum
400 MHz Bruker AVANCE III HD mit SampleExpress Lite TopSpin 3.6 mit Icon-NMR	Direkter Zweikanalprobenkopf (BBFO, ^{19}F auf BB-Kanal, ^{31}P - ^{199}Hg und ^{17}O - ^{109}Ag), Temperiereinheit	Automatisierte Messungen von allen Kernen und 2D-Experimenten: H,H-COSY, TOCSY, NOESY, CH-HSQC, CH-HMBC	Maik Icker Katrin Hoffmann <i>N.N.</i> Labor 110 TA
300 MHz Varian MERCURYplus 300 OpenVnmrJ	Direkter Zweikanal-Probenkopf (^{13}C und ^{31}P auf innerer Spule, ^1H und ^{19}F außen), Temperiereinheit	Manuelle Messungen von ^1H -, ^{19}F - (konzentrierte Proben) und ^{13}C -Spektren sowie 2D-Experimente: H,H-COSY, TOCSY, NOESY, CH-HSQC, CH-HMBC	Maik Icker Katrin Hoffmann <i>N.N.</i> Labor 172 TA
400 MHz Varian MERCURYplus 400 OpenVnmrJ	Direkter Zweikanalprobenkopf (AutoX, ^{19}F auf äußerer H-Spule, ^{31}P - ^{199}Hg und ^{17}O - ^{109}Ag), Temperiereinheit	Manuelle Messungen von allen Kernen und 2D-Experimente: H,H-COSY, TOCSY, NOESY, CH-HSQC, CH-HMBC Messung ^{19}F -entkoppelter ^{13}C -Spektren	Maik Icker Katrin Hoffmann <i>N.N.</i> Labor 172 TA
300 MHz Bruker Fourier 300 TopSpin 3.2	Direkter Zweikanal-Probenkopf (nur ^{13}C und ^1H), Temperiereinheit	Manuelle Messungen von ^1H - und ^{13}C -Spektren	Maik Icker Katrin Hoffmann <i>N.N.</i> Labor 262 TA

Anlage 2

Die Abrechnung der anfallenden Kosten beruht auf einem Punktesystem. Dabei wird jedes durchgeführte NMR-Experiment mit einer bestimmten Anzahl von Punkten bewertet und die jährlich tatsächlich anfallenden Betriebs- und Reparaturkosten auf die gesammelten Punkte der Nutzer umgerechnet.

Als Punkteschlüssel zur Abrechnung gilt folgende Aufteilung:

Experiment	Punktwert	Experiment	Punktwert	Experiment	Punktwert
¹ H	1	NOESY1D	2	NOESY/ROESY	3
¹³ C	2	H,H-COSY	2	Variable Temp.	5
¹⁹ F	1	TOCSY	3	Titration/Kinetik	5
³¹ P / ¹¹ B	2	HSQC	3		
X-Kerne	3	HMBC	3		

Der Punktwert variiert je nach Abrechnungsperiode, da sich vor allem die Reparaturkosten für die NMR-Geräte von Jahr zu Jahr unterscheiden.