

Nutzungsordnung für die Kernresonanzspektroskopie im Institut für Chemie der Universität Kassel

Das Kernresonanzspektroskopie-Labor (NMR-Labor) ist eine wissenschaftliche Serviceeinrichtungen des Instituts für Chemie an der Universität Kassel. Diese Nutzungsordnung regelt die Nutzung der durch sie zur Verfügung gestellten Ressourcen.

1. Geltungsbereich

Diese Nutzungsordnung bestimmt die Regeln zur Nutzung der vom NMR-Labor angebotenen Leistungen. Sie gilt für die Nutzung der dort bereitgestellten Großgeräte, der Laborräume und für die Inanspruchnahme von Leistungen des Servicepersonals.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer/innen verbindlich. Mit externen wissenschaftlich oder kommerziell ausgerichteten Einrichtungen werden zusätzlich Kooperationsverträge geschlossen, die weitere Details der Inanspruchnahme der Leistungen regeln.

2. Ausrüstung, Leistungen und Ansprechpartner

Das NMR-Labor der Universität Kassel verfügt über zwei Flüssig-NMR-Geräte:

- Varian 500 MHz VNMR5 mit OneNMR-Probenkopf
- JEOL JNM-ECZL 500 MHz mit Super-Cool-Probenkopf

Neben einfachen Direct-Observe-Messungen stehen u.a. folgende Messmethoden zur Verfügung: APT, DEPT, NOE-Differenz, HMQC, HSQC, HMBC, COSY, TOCSY, NOESY und ROESY.

Folgende Isotope können vermessen werden: H1, H2, Li7, B11, C13, N15, O17, F19, Na23, Al27, Si29, P31, V51, Se77, Sn119, Te125, Cs133, Pt195 und Pb207.

Auswertungshilfen erfolgen nur nach vorheriger Absprache und bei ausreichenden zeitlichen Kapazitäten.

Ein Anspruch auf die Auswertung von Spektren besteht nicht.

Ansprechpartner sind:

Dr. Martin Maurer, 0561 - 804 4640, (NMR-Laborleiter)

Dr. Denis Kargin, 0561 - 804 4640, (stellv. NMR-Laborleiter)

3. Nutzungsberechtigung

(1) Das Leistungsangebot richtet sich in erster Linie an

- Mitarbeiter/innen von Arbeitsgruppen und Studierende der Arbeitsgruppen des Instituts für Chemie an der Universität Kassel
- Drittmittelprojekte aus öffentlicher Hand (z.B. DFG), bzw. vergleichbarer gemeinnütziger Körperschaften
- Mitarbeiter/innen von Arbeitsgruppen anderer Institute der Universität Kassel
- Mitarbeiter/innen externer Einrichtungen und Drittmittelprojekte, die nicht unter Kategorie b) fallen, sofern es die Auslastung der Geräte und des Personals zulässt.

(2) Nutzungsberechtigt sind alle Bacheloranden, Masteranden und Doktoranden des Instituts für Chemie an der Universität Kassel. Die Nutzung durch Arbeitsgruppen anderer Institute sowie externer Einrichtungen erfolgt nur nach Absprache mit der NMR-Laborleitung.

(3) Messberechtigt sind die NMR-Laborleiter und eingeschränkt messberechtigt ist durch die Laborleitung eingewiesenes und geschultes wissenschaftliches Personal. Ein Anspruch auf selbständiges Messen besteht nicht. Messberechtigte Personen sind grundsätzlich verpflichtet, sich bei Bedarf an der Flüssiggasbetankung (N₂- und He- Füllung) sowie der regelmäßigen Reinigung der Räume zu beteiligen. Die Messberechtigung kann von der Laborleitung jederzeit widerrufen werden.

(4) In Vorgesprächen wird geprüft, ob für das jeweilige Forschungsvorhaben ausreichend freie Kapazitäten vorhanden sind und die Geräteausstattung die gewünschten Ergebnisse erwarten lässt. Bei ungeeigneten Proben oder fehlenden freien Kapazitäten kann die Durchführung von Messungen abgelehnt werden.

4. Messauftrag, Gerätebuchung und Messzeitvergabe

(1) Die Laborleitung vergibt an neue Nutzer/innen vor der ersten Service-Messung ein individuelles Namenskürzel, das bei allen Messaufträgen bzw. Probenbezeichnungen verwendet werden muss.

(2) Eine Service-Messung wird durch Abgabe einer Probe mit vollständig ausgefülltem Probenzettel in Auftrag gegeben. Die Zuordnung zu einem bestimmten Gerät, die Messzeitvergabe sowie die Durchführung der Messung erfolgt durch das Servicepersonal. Im Falle einer einseitigen Überlastung von Messgeräten kann die Laborleitung eine Umbelegung veranlassen, um beide Geräte möglichst effizient auszunutzen. Der Auftrag für eine begründete Messung an einem bestimmten Gerät muss auf dem Auftragsformular explizit vermerkt werden. Bei ungenügenden freien Kapazitäten, völliger Auslastung der Geräte, des Servicepersonals oder Gerätedefekten und Wartungsarbeiten kann es zu Verzögerungen im Messablauf oder Nichtdurchführungen von Messungen kommen. Die Bearbeitung solcher nicht bearbeiteter Proben erfolgt erst, sobald wieder freie Kapazitäten verfügbar sind. Sind Experimente mit sehr empfindlichen Proben gewünscht, werden die Nutzer/innen gebeten, konkrete Messtermine vorab mit dem Servicepersonal abzustimmen. Auf nicht abgesprochene ad-hoc-Messungen besteht auch bei empfindlichen oder dringenden Proben kein Anspruch.

Als Messzeit zählt die benötigte Zeit, in der das Gerät für andere Messungen nicht zur Verfügung steht zuzüglich etwaiger Auswertungshilfen durch das Servicepersonal.

(3) Eine kurzfristige Stornierung muss dem Servicepersonal mitgeteilt werden. Bei Nichteinhaltung abgesprochener Messterminen kann die ungenutzte Messzeit mit voller Nutzungsgebühr in Rechnung gestellt werden.

(4) Langzeitmessungen wie z.B. Nacht- oder Wochenendmessungen müssen grundsätzlich vorher reserviert werden. Kettenreservierungen, also Reservierungen mehrerer direkt aufeinanderfolgender Langzeitmessungen, sind nur in begründeten Ausnahmefällen möglich.

(5) Bei Defekten an Geräten oder Wartungsarbeiten kann die Benutzung der Geräte durch die Laborleitung eingeschränkt werden.

(6) Die NMR-Laborleiter sind berechtigt, den Verlauf von Messungen jederzeit zu kontrollieren und bei Fehlfunktion oder zur Gewährleistung eines optimalen Messbetriebs abzuberechnen.

5. Datenbereitstellung und -speicherung

(1) Nach abgeschlossener Messung erfolgt die Bereitstellung der Messdaten auf einem dafür vorgesehenen Server der Universität Kassel zum Download.

(2) Die Zugangsberechtigung zu diesem Server wird durch die NMR-Laborleitung erteilt, nachdem sie per Mail beantragt wurde. Diese Mail sollte folgendes enthalten:

- Name,
- AG,
- "Bitte um die Aufnahme in die Sekundärgruppe nmr",
- Uni-Kassel-Login (uk-Nummer)

(3) Verantwortlich für Funktion und Wartung des o.g. Servers ist das ITS der Universität Kassel. Technische Fragen oder Störungsmeldungen sind daher an das ITS direkt zu richten.

6. Nutzungskosten

(1) Mit der Erteilung eines Messauftrags bzw. der Buchung von Messzeit erklären sich die Nutzer/innen bzw. deren Arbeitsgruppenleiter/innen mit der Übernahme von Kosten nach den hier beschriebenen Modalitäten einverstanden.

(2) Die NMR-Serviceabteilung hat eine eigene Kostenstelle. Von dieser werden alle Unkosten wie Helium (fl.), Stickstoff (fl.) oder Reparaturen abgebucht. Einnahmen durch Messungen für Auftraggeber außerhalb des Instituts für Chemie werden auf diese Kostenstelle eingezahlt. Aus dem am Jahresende resultierenden Kontostand ergeben sich somit die Kosten, die durch das Institut für Chemie zu tragen sind.

(3) Die Begleichung der in (2) genannten Kosten erfolgt für die Arbeitsgruppen des Instituts für Chemie entsprechend dem prozentualen Anteil an der Gesamtmesszeit.

(4) Die Abrechnung für Drittmittelprojekte aus Kategorie 3(1)b (z.B. DFG) wird gemäß den Vorgaben der DFG ausschließlich auf Basis der in Anspruch genommenen Messstunden erstellt. Es wird ein Betrag von 20€ pro Stunde Messzeit zugrunde gelegt. Bei sehr komplexen Problemstellungen werden 40€ pro Stunde berechnet. Für Langzeitmessungen werden pauschal 80€ pro Messung berechnet.

(5) Die Abrechnung für Arbeitsgruppen der Universität Kassel, die nicht dem Institut für Chemie angehören, legt einen Betrag von 20€ pro Stunde Messzeit, Beratung und evtl. Auswertungshilfe zugrunde. Bei sehr komplexen Problemstellungen werden 40€ pro Stunde berechnet. Für Langzeitmessungen werden pauschal 100€ pro Messung berechnet.

(6) Die von externen Einrichtungen zu zahlenden Entgelte berücksichtigen alle anfallenden Kosten vollumfänglich (Vollkostenrechnung) und sind jeweils über einen gesonderten Vertrag zu regeln. Der Anteil der reinen Messzeit wird mit einem Betrag von 40€ pro Messstunde berechnet. Für Langzeitmessungen werden pauschal 150€ pro Messung berechnet.

7. Pflichten der Nutzer/innen

(1) Zu messende Proben werden im Regal gegenüber der Eingangstür des NMR-Labors (R2235, AVZ2)

abgelegt. Einem Aushang an diesem Regal kann man die allgemeinen Richtlinien für die qualitativen Anforderungen an solche Proben entnehmen. Das NMR-Labor darf grundsätzlich nicht mit Laborhandschuhen oder mit kontaminierter Kleidung betreten werden. Das angrenzende Büro (R2231, AVZ2) darf generell nicht mit Laborschutzbekleidung betreten werden. NMR-Proben oder Chemikaliengebinde sind im Büroraum nicht erlaubt.

(2) Es gelten die allgemeinen Sicherheitsvorschriften für Arbeiten in Laboratorien (BGI 850-0: Sicheres Arbeiten in Laboratorien. Grundlagen und Handlungshilfen).

(3) Im Falle einer Veröffentlichung von Ergebnissen, die durch maßgebliche Beteiligung der NMR-Serviceabteilung erzielt wurden, ist deren Beitrag kenntlich zu machen.

(4) Bei der Inanspruchnahme der Ressourcen der NMR-Serviceabteilung sind die „Empfehlungen der DFG zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis“ einzuhalten. (vgl. http://www.dfg.de/foerderung/rechtliche_rahmenbedingungen/gwp)

8. Haftung

(1) Die NMR-Serviceabteilung übernimmt keine Gewähr dafür, den speziellen Anforderungen der Nutzer/innen in vollem Umfang gerecht werden zu können. Sie übernimmt auch keine Gewähr dafür, dass die Ressourcen jederzeit fehlerfrei und ohne Unterbrechung nutzbar sind oder dass die gewonnenen Daten fehlerfrei und dauerhaft gesichert werden.

(2) Die NMR-Serviceabteilung kann ihre Nutzer/innen bei Bedarf und im Rahmen der Kapazitäten auch bei der Interpretation der Messdaten unterstützen. Die Verantwortung für die Interpretation bleibt jedoch bei den Nutzer/innen, wenn keine Mitautorenschaft des Servicepersonals in Veröffentlichungen gegeben ist.

(3) Die NMR-Serviceabteilung haftet nicht für Schäden, die den Nutzer/innen durch die Inanspruchnahme der Leistungen entstehen.