



TUBAF
Die Ressourcenuniversität.
Seit 1765.

Institut für Analytische Chemie
Zentrale NMR-Spektroskopie

Dr. Erica Brendler
Telefon: 03731 39 2266
Fax: 03731 39 3666
E-Mail:
Erica.Brendler@chemie.tu-freiberg.de
Homepage:
<https://tu-freiberg.de/institut-fuer-analytische-chemie/ausstattung/zentrale-nmr-spektroskopie>

Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)- Spektrometer der Zentralen NMR-Spektroskopie der TU Bergakademie Freiberg

I. Allgemeines

Die zentrale NMR Spektroskopie (ZNMR) der TU Bergakademie Freiberg ist organisatorisch an der Fakultät für Chemie und Physik im Institut für Analytische Chemie eingebunden.

Die ZNMR verfügt über NMR-Spektrometer gemäß Anlage 1. Die ZNMR gewährt durch den dort benannten Geräteverantwortlichen den **Nutzern** Zugang zu den Spektrometern.

Als **Nutzer** wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten der ZNMR innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einem Verantwortlichen geführt. Dieser bestimmt die Inhalte des durchzuführenden Forschungsprojekts, ist für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG¹ verantwortlich und steht für die Behebung von seiner Forschergruppe verursachte Schäden durch unsachgemäße Bedienung am Gerät in Verantwortung.

Für die Durchführung von NMR-Messungen fallen Kosten an, die von den Nutzern anteilig übernommen werden müssen.

Dabei werden folgende Nutzertypen unterschieden:

Typ 1: Nutzer, die die erforderlichen Messungen nach erfolgter Einweisung durch den Geräteverantwortlichen oder eine von ihm beauftragte Person selbständig durchführen.

a) Regelmäßige Nutzer:

Diese Nutzer erhalten ein eigenes Login an den Geräten. Sie beteiligen sich entsprechend der in Anspruch genommenen Messzeit an den anfallenden Unterhalts-, Wartungs- und Reparaturkosten für die Geräte. Die Messzeiterfassung erfolgt elektronisch über die Login-Zeiten der Nutzer.

Die zu diesem Nutzerkreis gehörenden Forschergruppen sind in Anlage 3 aufgelistet.

b) Gelegentliche Nutzer:

¹ http://www.dfg.de/download/pdf/dfg_im_profil/reden_stellungnahmen/download/empfehlung_wiss_praxis_0198.pdf

Die Nutzer können das Gästelogin der Geräte nutzen. Sie beteiligen sich entsprechend der gebuchten Messzeit an den anfallenden Unterhalts-, Wartungs- und Reparaturkosten für die Geräte. Die Messzeitpauschalen entsprechend der Empfehlungen der DFG² sind in Anlage 2 aufgeführt.

Typ 2: Nutzer, die ihre Messungen als Dienstleistung durchführen lassen.

Die Messungen werden nicht selbst sondern von Nutzern Typ 1 durchgeführt. Angepasst an die Aufgabenstellung erfolgt hier die Kostenbeteiligung über eine Pauschale pro Messung (basierend auf der in Anspruch genommenen Messzeit und Materialien) oder über die in Anspruch genommene Messzeit. Messzeitpauschalen können der Anlage 2 entnommen werden. Sich daraus ergebende Pauschalen pro Messung sind bei den Verantwortlichen im Institut für Analytische Chemie zu erfragen.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

II. Verantwortlichkeiten

Die ZNMR bietet Nutzern Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten an. Es werden in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durchgeführt und Geräteparameter optimiert, die die technischen Voraussetzungen für NMR-Messungen in möglichst guter Qualität gewährleisten sollen.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftlich- wie auch technisch-verantwortliche Personen benannt:

Lehrstuhlinhaber Analytische Chemie Prof. Dr. Carla Vogt*	Gesamtverantwortliche Büro: Lessingstraße 45 , R 1010A Telefon: 03731 393468 E-Mail: carla.vogt@chemie.tu-freiberg.de
--	--

Dr. Erica Brendler	Geräteverantwortliche Wissenschaftliche Ansprechperson Büro: Lessingstraße 45 , R 1010C Telefon: 03731 39 2266 E-Mail: erica.brendler@chemie.tu-freiberg.de
--------------------	---

Heidrun Hahn	Verantwortliche für Dienstleistungen Technische Ansprechperson Büro: CWB Nord 2.108 Telefon: 03731 39 3793 E-Mail: heidrun.hahn@chemie.tu-freiberg.de
--------------	---

2) Hinweise zu Gerätenutzungskosten und zu Gerätezentren; DFG-Vordruck 55.04

III. Voraussetzungen für den Zugang, Auswahlverfahren eines Nutzers und Durchführung der Nutzung für Nutzer Typ 1

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.

Grundsätzlich dürfen Messungen nur durch geschultes Personal durchgeführt werden. Diese sind entweder die wissenschaftlichen und technischen Ansprechpersonen der ZNMR oder durch die wissenschaftliche Ansprechperson geschulte und eingewiesene Mitglieder der Arbeitsgruppen der Nutzer Typ 1.

Eine Beantragung der Nutzung Typ 1 erfolgt **schriftlich** an den Gesamtverantwortlichen.

Die Beantragung des Ausscheidens aus dieser Nutzungsform bedarf ebenfalls **der Schriftform** an den Gesamtverantwortlichen.

Die Benennung der Nutzer erfolgt durch den Leiter der Organisationseinheiten **in schriftlicher Form** an den Geräteverantwortlichen.

Der Geräteverantwortliche entscheidet über die prinzipielle Eignung der Nutzer, und ob der jeweilige Nutzer Messungen manuell oder nur mit Hilfe des automatischen Probenwechslers durchführen darf.

Die Nutzer unter Typ 1a sind verpflichtet, sich an der Wartung (N₂-und He- Füllung) sowie der regelmäßigen Reinigung der Räume zu beteiligen. Die sich daraus ergebenden regelmäßigen Verpflichtungen sind in der jeweils aktuellen Version von Anlage 3 aufgeführt und müssen von den Nutzern selbstständig organisiert werden.

Die Vergabe von Messzeiten für Nutzer Typ 1 wird unter IV geregelt.

Die Nutzer sind nur berechtigt Messungen durchzuführen, für die sie eine Einweisung durch den Geräteverantwortlichen oder eine von ihm beauftragte Person erhalten haben. Die Nutzer verpflichten sich, die Nutzerordnung, die Laborordnung und Gefährdungsbeurteilung der ZNMR zu beachten.

Entstehen durch Zuwiderhandlungen und Nichtbeachtung der Nutzerordnung und Laborordnung der ZNMR Kosten, so gehen diese zu Lasten des Verursachers.

Die Erlaubnis, eigenständige Messungen durchzuführen, kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden.

IV. Messzeitvergabe

Anträge zur regelmäßigen Messzeitreservierung und deren Änderung können schriftlich an den Geräteverantwortlichen gestellt werden. Dieser entscheidet in Absprache mit den Lehrstuhlinhabern der anderen Nutzer über die Durchführbarkeit oder Änderungen in der Reservierung.

a) Messzeiten für Nutzer Typ 1

Folgende Messzeiten mit Stand vom 28.7.2017 wurden auf Wunsch von Nutzern Typ 1 fest reserviert und werden für die Messzeitpauschalen der Nutzer angerechnet:

Nutzer	Gerät	Zeitraum
Institut für Organische Chemie	AV 500	Wöchentlich Donnerstag & Freitag
Institut für Anorganische Chemie	Nanobay	Wöchentlich Dienstag & Mittwoch

Die Nutzer verpflichten sich, den Geräteverantwortlichen oder die technische Ansprechperson bei ggf. nicht Inanspruchnahme der reservierten Messzeit rechtzeitig zu informieren, damit die Messzeit für andere Nutzer zur Verfügung gestellt werden kann.

Die Reservierung gemäß obiger Tabelle gilt bis auf Widerruf seitens der Nutzer oder des Geräteverantwortlichen. Der Widerruf bedarf der Schriftform und ist an den Gesamtverantwortlichen der ZNMR zu richten (bei Vakanz dieser Position an den Dekan der Fakultät für Chemie und Physik).

Messzeiten außerhalb dieser festen Reservierungen werden wie folgt vergeben:

- Lehrveranstaltungen haben Vorrang gegenüber Forschungsarbeiten
- AV 500 und Nanobay:
 - o selbsttätige Eintragung der Nutzer im am Gerät ausliegenden Kalender sowie Outlook Kalender für Messzeiten bis zu einer Woche im Voraus.
 - o Bei Konflikten und Engpässen behält sich der Geräteverantwortliche vor Änderungen vorzunehmen.
 - o Für komplexere, aufwändigere Messungen, die längerfristige Planungen erfordern, kann dies in Absprache mit dem Geräteverantwortlichen vorgesehen werden.
 - o Darüber hinaus sind eigenständige langfristige Reservierungen nicht gestattet.
- Festkörper-NMR und AV 700:
 - o Die Reservierung erfolgt in Absprache mit dem Geräteverantwortlichen und wird von diesem im Gerätekalender (Outlook) vermerkt.

b) Messzeiten für Nutzer Typ 2

Die Messungen werden vom Servicepersonal durchgeführt. Hierzu müssen die Nutzer einen Antrag an eine der benannten Ansprechpersonen stellen. Die Anträge sind über die Internetseite der ZNMR zugänglich:

<https://tu-freiberg.de/institut-fuer-analytische-chemie/ausstattung/zentrale-nmr-spektroskopie>

Die Bestätigung des Antrags durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers wird vorausgesetzt.

Die Ansprechperson entscheidet über die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit.

Im Falle einer positiven Evaluierung benennt die Ansprechperson das NMR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit des Servicepersonals sowie des benannten Gerätes und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Die Nutzer kontaktieren die Ansprechperson bei Probenabgabe.

V. Datensicherung und Datenweitergabe

Nutzer nach Typ 1

sind für die Weiterleitung und Sicherung der Primärdaten eigenverantwortlich. Die ZNMR wirkt lediglich beratend und unterstützend bei der Weiterleitung der Primärdaten mit. Für die Vergabe und Einrichtung von Zugriffsrechten auf die Spektrometer-Rechner und Institutsserver ist der Leiter des Betriebsbereiches der Fakultät für Chemie und Physik zuständig:

DI (FH) Steffen Braun
Telefon: 03731 39 2319
E-Mail: steffen.braun@chemie.tu-freiberg.de

Die Zugriffsrechte werden nur nach Zustimmung durch den Geräteverantwortlichen gewährt.

Für Nutzer nach Typ 2

leitet die ZNMR nach Abschluss der Messungen die Primärdaten, welche von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind, an den Nutzer weiter. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung (z.B. Email, Filelink etc.).

Die Nutzer werden 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.

VI. Datenanalyse, Urheberschaft und Veröffentlichungen

Die ZNMR ist für die durch die Probenbeschaffenheit bedingte Qualität der Primärdaten nicht verantwortlich. Die ZNMR stellt lediglich die technischen Voraussetzungen zur Durchführung der Messungen zur Verfügung.

Die Verantwortung für die Datenanalyse der Primärdaten liegt beim Nutzer. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen geben auf Anfrage Hilfestellung zur Datenanalyse.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Haben die wissenschaftlichen Ansprechpersonen wesentliche Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der Interpretation gegeben, sollten sie Teil der Autorenliste sein, bei kleineren Beiträgen in den acknowledgements mit aufgeführt werden.

VII. Kostenpauschalen für den Zugang zu den NMR-Geräten

Die pauschalierten Kosten für die Nutzer für den Zugang zu den NMR-Geräten der ZNMR an der Fakultät für Chemie und Physik der TU Bergakademie Freiberg werden in Anlage 2 der Nutzerordnung geregelt.

VIII. Gültigkeit

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des Leiters NMR-Spektroskopie der Fakultät für Chemie und Physik in Kraft. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Freiberg,

16. Mai 2024

Prof. Carla Vogt

Dr. Erica Brendler

Gesamtverantwortliche ZNMR-Spektroskopie

Geräteverantwortliche ZNMR-Spektroskopie

Anlage 1

zur Nutzerordnung für NMR- Geräte innerhalb der ZNMR der TU Bergakademie Freiberg an der Fakultät für Chemie und Physik / Institut für Analytische Chemie

Gerätespezifikationen

400 MHz Bruker Nanobay mit Nanobay Samplecase Probenwechsler	
Standort:	E.107
Aggregatzustand der Probe:	Lösungs-NMR
Anschaffung:	2014
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8000 Stunden pro Jahr
Probenköpfe:	5 mm BBO Z-GRD, ATM 10 mm BBO 5mm 1H/13C TXI Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	2 Sender
Geräteverantwortlicher:	Dr. Erica Brendler

500 MHz Bruker Avance III mit BACS60 Probenwechsler	AV 500
Standort:	E.107
Aggregatzustand der Probe:	Lösungs-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2007
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8000 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm TBI 1H/13C/BB Z-GRD 5mm BBFO Z-GRD, ATM 5mm TXO 1H/13C/19F Z-GRD, ATM
Weitere Spezifikationen:	5 Sender, 2*H/F, 2*BB, 2H
Geräteverantwortlicher:	Dr. Erica Brendler

400 MHz WB Bruker Avance III HD	AV 400 WB
Standort:	E.110
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2015 Konsole, 2014 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8000 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	PH MAS DVT 400 WB BL4 X/Y/H PH MAS DVT 400 WB BL7 PH MAS VTN 400 WB BL2.5 # PH MAS DVT 400 WB BL1.9 (Exp.Physik) # PH static in situ real time NMR (Exp.Physik)
Weitere Spezifikationen:	3 Sender, 2 BB, 1HF
Geräteverantwortlicher:	Dr. Erica Brendler

700 MHz Bruker Avance NEO**AV 400 WB**

Standort:	E.110
Aggregatzustand der Probe:	Lösungs- und Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2018/2019
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8000 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm BBO 5 mm TXI PH MAS DVT 700S3, BL 1.3, N-P/F-H PH MAS DVT 700 X/Y/H, BL 3.2, 109Ag-23Na/H PH MAS DVT 700S3, BL 2.5, Trigamma PH MAS DVT 700S3, BL 2.5, Dual
Weitere Spezifikationen:	3 Sender, 2 BB, 1H/F
Geräteverantwortlicher:	Dr. Erica Brendler

Anlage 2

zur Nutzerordnung für NMR- Geräte innerhalb der ZNMR der TU Bergakademie Freiberg an der Fakultät für Chemie und Physik/ Institut für Analytische Chemie

Messzeitpauschalen

Nutzer nach Typ 1a

beteiligen sich entsprechend der in Anspruch genommenen Messzeit an den real anfallenden Unterhalts-, Wartungs- und Reparaturkosten für die Geräte. Diese können für einzelne Zeiträume auch unter oder über den unten angegebenen Stundenpauschalen liegen. Die Messzeiterfassung erfolgt elektronisch über die Login-Zeiten der Nutzer.

Andere Nutzer:

Die zentrale NMR Spektroskopie an der Fakultät für Chemie und Physik der TU Bergakademie Freiberg erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte akkumulierte **Kosten pro Stunde Gerätezeit** (Stand 16.05.2024):

Die Kostenangaben beziehen sich auf selbst durchgeführte Messungen für Nutzer nach Typ 1b und Messungen durch das Servicepersonal im automatischen Probenwechslerbetrieb bzw. manuell durchgeführte Aufträge (*kursiv*). Hierbei handelt es sich um Experimente zur Analytik synthetischer Fragestellungen.

Lösungs-NMR 400 MHz	Lösungs-NMR 500 MHz	Festkörper-NMR 400 MHz Lösung + Festkörper 700 MHz
5,00 € / 15,00 €	10,00 € / 20,00 €	20,00 €

Des Weiteren fallen Kosten von pauschal 25 € für den Umbau bei **z.B.** Fluor-, Tieftemperaturmessungen oder Probenkopfwechsel an.

Aus den o.g. Kosten ergeben sich Kostenpauschalen für bestimmte Messmethoden (1D, HMBC, HSQC, H,H-COSY etc.) und Isotope (¹H, ²⁹Si, ¹³C etc.), die je nach Aufgabenstellung die dafür benötigte Messzeit und Verbrauchsmaterialien berücksichtigen. Die Höhe dieser Pauschalen können bei den wissenschaftlichen und technischen Ansprechpersonen erfragt werden.

Anlage 3

zur Nutzerordnung für NMR- Geräte innerhalb der ZNMR der TU Bergakademie Freiberg an der Fakultät für Chemie und Physik/ Institut für Analytische Chemie

Nutzer Typ 1a:

Zu diesem Nutzerkreis gehören Forscher und Forschergruppen der Institute:

Lösungs- NMR:

- Organische Chemie AK Mazik
- Anorganische Chemie AK Kroke
- Anorganische Chemie AK Frisch
- Physikalische Chemie AK Mertens
- Physikalische Chemie AK Plamper
- Analytische Chemie

Festkörper-NMR

- Analytische Chemie
- Physikalische Chemie AK Mertens
- Anorganische Chemie AK Kroke
- Anorganische Chemie AK Frisch

Regelmäßige Verpflichtungen:

- Organische Chemie AK Mazik: wöchentliche Stickstofffüllung am AV 500
- Anorganische Chemie AK Kroke: wöchentliche Stickstofffüllung am Nanobay
- Organische Chemie AK Mazik, Anorganische Chemie AK Kroke: wöchentliche Reinigung E.105-107
- Analytische Chemie: wöchentliche Stickstofffüllung am AV 400 WB, wöchentliche Reinigung E.108-110