



Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer im Zuständigkeitsbereich von Prof. Dr. Christina M. Thiele, Organische Strukturanalytik, Fachbereich Chemie der Technischen Universität Darmstadt

Clemens-Schöpf-Institut für
Organische Chemie und Bio-
chemie

Prof. Dr. Christina M. Thiele

I. Definitionen

Das Fachgebiet Organische Strukturanalytik von Prof. Dr. Christina M. Thiele vergibt durch die benannten Verantwortlichen Zugang zu seinen NMR-Geräten. Die Spezifikationen der NMR-Geräte sind in Anlage 1 aufgeführt.

Alarich-Weiss-Str. 16
D - 64287 Darmstadt

Tel. +49 6151 16 - 21830
Fax +49 6151 16 - 21828
cthiele@thielelab.de

Als Nutzer wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten des Fachgebiets innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einer/m Verantwortlichen geführt, die/der auch die Inhalte des durchzuführenden Forschungsprojekts bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG (https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/rechtliche_rahmenbedingungen/gute_wissenschaftliche_praxis/kodex_gwp.pdf) verantwortlich ist.

Datum
13.01.23

Ihre Nachricht

Unser Zeichen

Die Nutzerordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

II. Verpflichtungen des Fachgebiets

Das Fachgebiet bietet Nutzern Zugang zu NMR-Geräten an, deren Leistung dem ausgewählten Gerätetyp und der technischen Zusatzausstattung entsprechend (spezifiziert in Anlage 1). Die verantwortlichen Gerätemanager führen in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen

Stadt- und Kreissparkasse Darmstadt
IBAN DE 36 5085 0150 0000 7043 00
BIC HELADEF1DAS

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 in Anlage 2 dieser Nutzerordnung detailliert aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftliche Ansprechpersonen benannt:

Prof. Dr. Christina M. Thiele Leiterin des Fachgebiets Organische Strukturanalytik
L2|07 7
Tel. +49 6151 16 21830
eMail: cthiele@thielelab.de

Dr. Volker Schmidts verantwortlicher Gerätemanager
L2|07 8
Tel. +49 6151 16 21829
eMail: vschmidts@thielelab.de

Für bestimmte Geräte, Messmethoden oder Fragestellungen können weitere Mitarbeiter als wissenschaftliche Ansprechpartner mit passender Expertise benannt werden.

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

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die Mitglied einer anerkannten wissenschaftlichen Forschungseinrichtung sind. Nutzer im Sinne von Auftragsforschung oder wissenschaftlichen Dienstleistungen können auch in Firmen beschäftigte Wissenschaftler/innen sein. Hierbei ist die Zivilklausel der Grundordnung der Technischen Universität Darmstadt (https://www.intern.tu-darmstadt.de/media/dezernat_ii/ordnungen/grundordnung_2016.pdf) 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 ist die wissenschaftliche Zusammenarbeit. Dies ist mit der Komplexität der experimentellen Durchführung wie auch den zeitintensiven Messungen begründet.

Als Ausnahme kann ausreichend qualifizierten Nutzern ein eigenverantwortlicher Zugang zu den NMR-Geräten gewährt werden. Der Kenntnisstand der Nutzer kann z.B. durch eigene Publikationen



nachgewiesen sein. Der eigenverantwortliche Zugang wird bei den pauschalisierten Kosten (Anlage 2) gesondert berücksichtigt.

Auftragsforschung und wissenschaftliche Dienstleistungen für Firmen erfordern gesonderte Forschungsverträge, in denen ggf. Geheimhaltungsvereinbarungen, IP-Regelungen und weitere formale juristische Fragen geklärt sind. Wissenschaftliche Dienstleistungen in kleinem Umfang können über ein vereinfachtes Angebot-Bestellung-Verfahren abgewickelt werden. Die Kosten hierfür werden gemäß den gesetzlichen Vorgaben und Regeln der Technischen Universität Darmstadt zu wirtschaftlichen Tätigkeiten über Vollkostenkalkulation bestimmt und in gesonderten vertraglichen Vereinbarungen geregelt; Anlage 2 dieser Nutzerordnung gilt in diesem Fall nicht.

Die wissenschaftliche Ansprechperson beurteilt die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit und entscheidet in Abstimmung mit der Leiterin des Fachgebiets über die Annahme des Antrags. Im Falle einer positiven Evaluierung wird das zur Verfügung stehende NMR-Gerät und die zugewiesene maximale Dauer der Nutzung. Die Evaluierung dauert maximal 10 Arbeitstage.

Die wissenschaftliche Ansprechperson einigt sich mit den Nutzern auf die spezifische Terminierung der Nutzung am benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit des benannten Geräts, wobei Fachgebiets-interne Messungen Vorrang haben, sowie nach den Möglichkeiten der Nutzer, Proben herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um Zugang zu einem NMR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, welches die Projektskizze als Erstes eingereicht hat.

Grundsätzlich werden die Messungen durch das geschulte Personal des Fachgebiets durchgeführt. Diese sind entweder die wissenschaftlichen Ansprechpersonen oder von ihnen benannte Mitarbeiter. In Ausnahmefällen können auch qualifizierte Nutzer eigenverantwortliche Messungen durchführen. Unabhängig vom Kenntnisstand ist eine vorherige Einweisung in die Besonderheiten des jeweiligen NMR-Geräts und/oder eine Schulung zu technischen oder wissenschaftlichen Aspekten der jeweiligen NMR-Messungen notwendig und wird durch die wissenschaftliche Ansprechperson durchgeführt. Die Erlaubnis zur eigenverantwortlichen Nutzung kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden.

Das Fachgebiet 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 Fachgebiets die an der Probe des Nutzers aufgenommenen Primärdaten umgehend weiter. Dies kann durch den Versand von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Das Fachgebiet verpflichtet sich die Primärdaten für einen Zeitraum von einem Jahr zu sichern und die Möglichkeit zur Weitergabe sicherzustellen.

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 Fachgebiet ist für die Qualität der Primärdaten, soweit sie durch die jeweiligen Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Das Fachgebiet gewährleistet lediglich die technischen Voraussetzungen (siehe *II. Verpflichtungen des Fachgebiets*) zur Nutzung der NMR-Geräte.

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 der Nutzer kann die Datenanalyse auch vollständig von den Mitarbeitern des Fachgebiets übernommen werden. Daher teilen sich die Nutzer und Mitarbeiter die Urheberschaft über die Primärdaten und ggf. deren Analyse. Die Urheberschaft für Daten die im Rahmen eines eigenverantwortlichen Zugangs gemäß *III. Voraussetzungen für den Zugang, Auswahlverfahren der Nutzer und Durchführung der Nutzung* entstanden sind, liegen alleine beim Nutzer.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Durch wesentliche Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. deren Interpretation werden Mitarbeiter des Fachgebiets Teil der Autorenliste. Auch hier stellt der eigenverantwortliche Zugang durch qualifizierte Nutzer eine Ausnahme dar.

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

Die pauschalisierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten des Fachgebiets Organische Strukturanalytik der Technischen Universität Darmstadt werden in Anlage 2 dieser Nutzerordnung geregelt.

VII. *Gültigkeit*

Die Nutzerordnung tritt mit Unterschrift der Fachgebietsleiterin Prof. Dr. Christina M. Thiele in Kraft und wird vom verantwortlichen Gerätemanager Dr. Volker Schmidts bezeugt. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf oder ihrer Aktualisierung gültig.

Darmstadt, den 17.01.2023

Prof. Dr. Christina M. Thiele
(Fachgebietsleiterin Organische Strukturanalytik)

Dr. Volker Schmidts
(verantwortlicher Gerätemanager)



Anlage 1 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer bei Prof. Dr. Christina M. Thiele, Organische Strukturanalytik, Fachbereich Chemie der Technischen Universität Darmstadt – Gerätespezifikationen

Das Fachgebiet Organische Strukturanalytik am Fachbereich Chemie der Technischen Universität Darmstadt umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 05.01.2023):

700 MHz Bruker Avance III HD	Ord.Nr. 10140663 (Raum L2 07 23)
Anschaffung / Inbetriebnahme	Konsole & Magnet 2014
Durchschnittliche Betriebsdauer	7400 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe	5 mm QCI cryo $^1\text{H}/^{19}\text{F}$ - $^{31}\text{P}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ -D Z-GRD 5 mm TBI $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -BB-D Z-GRD
Weitere Spezifikationen	Vierkanal-Messungen, ^2H Entkopplung, BB-Bereich ^{31}P – ^{109}Ag , Temperierung via BCU-II von 233 K bis 353 K
600 MHz Bruker Avance III	Ord.Nr. 10023981 (Raum L2 07 23)
Anschaffung / Inbetriebnahme	Konsole & Magnet 2011
Durchschnittliche Betriebsdauer	7400 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe	5 mm TBI $^1\text{H}/^{31}\text{P}$ -BB-D Z-GRD 4 mm HR-MAS ^1H - ^{13}C -D Z-GRD
Weitere Spezifikationen	Dreikanal-Messungen, BB-Bereich ^{31}P – ^{109}Ag , HR-MAS bis 16 kHz Spinning Rate, Temperierung via BCU-Xtreme von 233 K bis 353 K, N_2 -Verdampfer für Tieftemperaturmessungen bis ca. 180 K
400 MHz Bruker Avance III HD	Ord.Nr. 10140679 (Raum L2 07 23)
Anschaffung / Inbetriebnahme	Konsole & Magnet 2014
Durchschnittliche Betriebsdauer	2400 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe	5 mm BBFO BB/ ^{19}F - ^1H -D Z-GRD 10 mm SELX ^{13}C - $^1\text{H}/^{19}\text{F}$ -D Z-GRD ET 5 mm DIFF30L ^1H - ^{13}C -D Z-GRD / XYZ GRD Voxalytic LiquidVoxel Micro-Helmholtz coil array
Weitere Spezifikationen	Zweikanal-Messungen, BB-Bereich ^{31}P – ^{109}Ag , Temperierung via BCU-II von 233 K bis 353 K, ET Probenkopf für Hochtemperaturmessungen bis 483 K, Diffusionsprobenkopf mit 3*60 A Gradientenverstärker XYZ



400 MHz Bruker Avance III HD (Imaging-Konfiguration)	Ord.Nr. 10140679 (Raum L2 07 23)
Anschaffung / Inbetriebnahme	Konsole & Magnet 2014
Durchschnittliche Betriebsdauer	2400 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe	Micro5 body with inserts: 5 mm $^1\text{H}/^{19}\text{F}$, 10 mm $^1\text{H}/^{19}\text{F}$, 5 mm ^1H , 10 mm ^1H , 5 mm ^{19}F , 8 mm ^2H
Weitere Spezifikationen	Micro-Imaging-Messungen mit ParaVision, 3*60 A Gra- dientenverstärker XYZ, Temperierung via BCU-II von 233 K bis 353 K,

Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer bei Prof. Dr. Christina M. Thiele, Organische Strukturanalytik, Fachbereich Chemie der Technischen Universität Darmstadt – Pauschalierte Kosten für Nutzung im Rahmen wissenschaftlicher Zusammenarbeit

Das Fachgebiet Organische Strukturanalytik am Fachbereich Chemie der Technischen Universität erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte Kosten (Stand 05.01.2023). Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für Nutzer von der dargestellten Tabelle abweichen, falls sie sich bei der Erstanschaffung eines NMR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.

Nutzungsdauer	Feldstärke 400 MHz	Feldstärke 600 MHz	Feldstärke 700 MHz
Bis zu 7 Tagen	960 €/Tag (40,00 €/h)*	1.200 €/Tag (50,00 €/h)*	1.400 €/Tag (60,00 €/h)*
Zwischen 8 und 20 Tagen	800 €/Tag (33,34 €/h)*	1.000 €/Tag (41,67 €/h)*	1.200 €/Tag (50,00 €/h)*
Zwischen 21 und 31 Tagen (Festpreis)	16.000 € (21,51 €/h)**	20.000 € (26,88 €/h)**	24.000 € (32,86 €/h)**

* zur Information, Kosten werden tageweise abgerechnet.

** zur Information, bis 31 Tage Nutzungsdauer werden die Kosten tageweise abgerechnet.