

Technische Universität Darmstadt, Fachbereich Chemie
Abteilung für Massenspektrometrie, Alarich-Weiss-Strasse 4, 64289 Darmstadt
Homepage: <http://www.chemie.tu-darmstadt.de/massenspektrometrie>

Nutzungsordnung

1 Vorwort und Geltungsbereich

Die Abteilung für Massenspektrometrie (kurz MS-Abteilung) ist eine zentrale Einrichtung des Fachbereiches Chemie an der Technischen Universität Darmstadt. In dieser Ordnung wird die Nutzung der in der Abteilung zur Verfügung stehenden Geräte geregelt.

Sie ist verbindlich für alle, die Dienstleistungen der Abteilung für Massenspektrometrie des Fachbereiches Chemie an der Technischen Universität Darmstadt nutzen möchten.

Der Geltungsbereich dieser Nutzungsordnung umfasst die zur Abteilung gehörigen Labore A16 und A17 (Gebäude L2|02) in der Alarich-Weiss-Strasse 4, 64289 Darmstadt, mit den darin vorhandenen Geräten, sowie dem zur Probenvorbereitung und Messung erforderlichen Zubehör.

2 Ansprechpartner

- Herr Dr.-Ing. Alexander Schießer für die wissenschaftliche Beratung zu Planung und Auswertung von Experimenten
- Frau Christiane Rudolph und Frau Dipl.-Ing. Gül Sahinalp für technische Fragen

3 Nutzungsmodelle

Es wird zwischen folgenden Nutzungsmodellen unterschieden:

- **Servicebetrieb:** Die Proben werden nach geeigneter Vorbereitung abgegeben und die notwendigen Arbeiten von Mitarbeiter*innen der MS-Abteilung übernommen. Dieses Nutzungsmodell steht allen Nutzerinnen und Nutzern zur Verfügung.
- **Anwendungsbetrieb:** Hiermit ist die selbstständige Nutzung (bei geringerem Betreuungsaufwand durch Mitarbeiter*innen der Abteilung) der Geräten gemeint, sofern Messkapazitäten an diesen vorhanden sind (vgl. Punkt 5). Dieses Nutzungsmodell steht nur nach vorheriger Vereinbarung und nur nach Einarbeitung selbiger und unter Beachtung der Sicherheitsbestimmungen nach Erstunterweisung im Labor zur Verfügung. Nach Absprache können auch individuelle Nutzungskonzepte für einzelne Geräte vereinbart werden.

Dabei muss den DFG-Empfehlungen zu guten wissenschaftlichen Praxis https://www.dfg.de/foerderung/grundlagen_rahmenbedingungen/gwp entsprochen werden, jedes technische Problem und eventuelle Beschädigung der Geräte unverzüglich beim verantwortlichen Leiter der MS-Abteilung angezeigt werden und die Arbeit (inklusive der geeigneten Probenvorbereitung) so ausgeführt werden, dass Fehlfunktionen der Geräte vermieden werden.

4 Leistungsspektrum

- Wissenschaftliche Beratung zu experimentellen Fragestellungen und Datenauswertung
- Bestimmung der (akkuraten) Masse einer Zielsubstanz in geeigneten, genügend sauberen Proben im automatisierten Messbetrieb
- Bestimmung der (akkuraten) Masse bei generell geeigneten Proben aber schwierig zu detektierender Zielsubstanz im manuellen Messbetrieb
- Messungen im Kopplungsbetrieb (Massenspektrometrie zusammen mit Flüssig- oder Gaschromatographie) von für den Messbetrieb geeigneten Proben auf Anfrage und nach Verfügbarkeit der Geräte
- Erstellen eines pdf-Reports zu den Messergebnissen
- Vereinbarung zu Trainings an Geräten und zur Datenauswertung entsprechend den Zielen des/der jeweiligen Nutzers/Nutzerin und den zeitlichen Kapazitäten der Mitarbeiter*innen der Abteilung

Im **Anwendungsbetrieb** werden folgende Leistungen angeboten:

- In größerem Umfang (> 500 Proben/Jahr) gewünschte Dienstleistungen, die auch im Servicebetrieb angeboten werden
- Längerfristige Experimente an den Geräten der Abteilung mit Umlage der Verbrauchs- und Reparaturkosten und Einverständnis zur finanziellen Übernahme durch Benutzungsfehler entstandener Schäden am verwendeten Gerät
- Im Anwendungsbetrieb wird ausgesuchten Vertreterinnen oder Vertretern der nutzenden Arbeitsgruppen die Einarbeitung an den Geräten und zur Datenauswertung angeboten. Voraussetzung dafür ist das Vorhandensein einer entsprechenden beruflichen Qualifikation (abgeschlossene Berufsausbildung auf dem Gebiet der Chemie oder Masterabschluss) und die voraussichtliche Inanspruchnahme der Geräte von mindestens einem halben Jahr.

Die der MS-Abteilung aktuell zur Verfügung stehenden Geräte und ihre Spezifikationen sind auf unserer Homepage beschrieben.

5 Nutzungszeitvergabe

Für den automatisierten Servicebetrieb ist für jede Probe ein vollständig und korrekt ausgefülltes MS-Auftragsformular erforderlich, das als Download auf der unserer Homepage zur Verfügung steht. Für spezielle Verbrauchsmittel und aufwändige Probenvorbereitungen muss der Nutzer aufkommen.

Die Abgabe erfolgt in der dafür vorgesehenen Ablage im Raum A13 im Gebäude L2|02 in der Alarich-Weiss-Strasse 4, 64289 Darmstadt.

- Alle Proben werden der Reihenfolge ihres **Abgabedatums** nach an den jeweiligen Geräten mit der benötigten Untersuchungsmethode bearbeitet. Nicht erfolgreiche Messungen werden mit alternativen Ionisierungstechniken wiederholt.
- **Größere Probengebinde** (>10) können bei Überbuchung der Geräte zurückgestellt werden.
- Der **Servicebetrieb** ist bei Überbuchung der Geräte dem Anwendungsbetrieb übergeordnet.
- Der **Direkteinlassbetrieb** ist bei Überbuchung der Geräte den Kopplungstechniken (LC oder GC) übergeordnet.
- Aufträge, welche nicht aus der **Technischen Universität Darmstadt** stammen, also von externen Auftraggebern, werden ebenfalls bei Überbuchung der Geräte nachgeordnet.

6 Datenaustausch, Datenschutz und Archivierung

Alle Messergebnisse aus dem Servicebetrieb sind, soweit vorher nicht anders vereinbart, Eigentum der Auftraggebenden, werden vertraulich behandelt und werden nur an die/den Auftraggebenden übermittelt, in begründeten Fällen bekommen Kostenstellenverantwortliche Dateneinsicht.

Im Zuge der Nutzung des Services der MS-Abteilung werden zu Zwecken der Kommunikation und der Abrechnung Daten, wie Name, Dienstanschrift, Telefonnummer und eMail-Adresse erhoben. Die Erfassung der Daten ist Voraussetzung für die Nutzung des Services. Die erhobenen Daten sind nur den Verantwortlichen der Abteilung zugänglich und werden niemals an Dritte weitergegeben.

Von jeder Messung wird ein automatische Zusammenfassung (.pdf) des Messergebnisses erstellt und auf Wunsch mit der Rohdatendatei elektronisch verschickt.

Ein Datenaustausch kann mit vertretbarem Aufwand in Ausnahmefällen auch verschlüsselt per Email erfolgen, wenn vom Nutzer ausdrücklich gewünscht.

Bei zeitlich begrenzter Nutzung der Abteilung kann auf Anfrage eine andere Datentransfermöglichkeit zur Verfügung gestellt werden, z.B. eine Cloud-basierte Lösung.

Über diese Standards hinausgehende Vereinbarungen wie Geheimhaltungsvereinbarungen können mit separat zu vereinbarenden höheren Servicekosten ebenfalls abgeschlossen werden.

Nutzer*innen des Services können die Rohdaten beispielsweise mit der Freeware Mmass, mit der kostenpflichtige Auswertesoftware Mnova bearbeiten oder nach Absprache Auswertungen an den Rechnern der MS-Abteilung durchführen.

Die bei der Messung erhaltenen Daten werden zunächst auf der Festplatte des Geräterechners abgespeichert. Die Sortierung erfolgt dabei nach Arbeitskreisen. Im Anwendungsbetrieb erfolgt die Sortierung nach Nutzer*innen und Projekt. Die Daten sind durch die Nutzer*innen spätestens innerhalb von 3 Monaten zu sichern. Danach werden die Daten von dem Datenaustauschserver und Geräterechnern gelöscht und, wenn nicht anders vereinbart, von der Abteilung 10 Jahre lang archiviert.

7 Nutzungskosten

Es wird nach folgenden Nutzerkategorien unterschieden:

- Arbeitsgruppen der Technischen Universität Darmstadt
- Externe Auftraggebende

Alle Arbeitsgruppen aus der Technischen Universität Darmstadt haben die Möglichkeit, wenn Messkapazitäten verfügbar sind, die Geräte im Anwendungsbetrieb zu nutzen. Bei diesem Nutzungsmodell fällt eine jährliche Pauschale als Reparaturkostenvorauslage an. Im Servicebetrieb wird eine Verbrauchs- bzw. Reparaturkostenpauschale für jede einzelnen Messung erhoben. Messungen für externe Nutzer*innen werden entsprechend einer Vollkostenrechnung abgerechnet.

8 Anerkennung der Beiträge der Abteilung für Massenspektrometrie bei Veröffentlichungen

Die Anerkennung der Leistungen der MS-Abteilung erfolgt im Wesentlichen über Danksagungen bei Veröffentlichungen wissenschaftlicher Beiträge sowie über Koautorenschaften für die Mitarbeiter*innen der Abteilung. Empfehlungen zur Anerkennung der Leistungen der MS-Abteilung in Hinblick auf Danksagungen und Koautorenschaften werden in einem gesonderten Dokument erläutert, welches auf unserer Homepage verfügbar ist. Hier wird im Wesentlichen entsprechend allgemein akzeptierter Richtlinien zwischen Routinearbeiten, für die eine Danksagung angemessen ist, und wissenschaftliche Mitarbeit unterschieden, für die dann eine Koautorenschaft angestrebt wird.

- Bei Veröffentlichung von Daten, die unter Beteiligung der MS-Abteilung entstanden sind, ist diese Beteiligung dementsprechend in den Acknowledgements bzw. in der Danksagung kenntlich zu machen und die Referenz dem Verantwortlichen der MS-Abteilung zur Verfügung zu stellen.
- Ist die Mitarbeit der MS-Abteilung entscheidend für eine Publikation, sind die beteiligten Personen im Sinne einer guten wissenschaftlichen Praxis als Co-Autorenschaft zu berücksichtigen und bei der Erstellung des Manuskriptes zu beteiligen.

Die erhobene Kostenpauschale für die jeweilige Messung ersetzt die zuvor genannten Verpflichtungen nicht.

Die Mitarbeit bei Projekten, aus denen weitere Urheberschaften wie Patente oder ähnliches entstehen können, wird nicht als Serviceleistung erbracht. Hierfür müssen individuelle Kooperationsverträge abgeschlossen werden.

Darmstadt, den 15.03.2022

.....

Dr.-Ing. Alexander Schießer

Leiter der Abteilung für Massenspektrometrie