

Satzung des zentralen NMR-Service der *School of Natural Sciences* an der Technischen Universität München (TUM)

Stand: 22.06.2024

1. Präambel

Der zentrale NMR-Service der *School of Natural Sciences* an der Technischen Universität München (nachfolgend abgekürzt als *zentraler NMR-Service* bezeichnet) ist anhand der Konzeption und der Richtlinien des „*DFG Network of German NMR Centers (G-NMR)*“ ausgerichtet. Spezifische Aspekte, die die Gegebenheiten an der TUM berücksichtigen, werden im Folgenden definiert.

2. Personal

Gesamtverantwortlicher Leiter

Apl. Prof. Dr. Wolfgang Eisenreich
Büro: 52107 oder 22106
Tel: 089-289-13657
E-Mail: wolfgang.eisenreich@ch.tum.de

Stellvertretender Leiter

Prof. Dr. Franz Hagn (FH)

Technisches Personal

TA Manuel Meironk
Büro: 42428
Tel: 089-289-13049
E-Mail: manuel.meironk@tum.de

Stellvertretung

TA Maria Matthews

3. Definitionen

Der *zentrale NMR-Service* bedient primär die Arbeitsgruppen an der *School of Natural Sciences* (Departments Biowissenschaften, Chemie und Physik) der TUM: Die Organisation des zentralen NMR Service an den in Anhang 1 aufgelisteten Geräten erfolgt durch die 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. Die Nutzung des Service ist nur nach einer umfassenden Einweisung und Schulung erlaubt. Der Nachweis einer entsprechenden Einweisung wird vom Leiter des zentralen NMR Service protokolliert.

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 innerhalb der Gruppe und als Schnittstelle zu den Leitern der Serviceabteilung fungiert. Die Leiter der NMR Serviceabteilung und die *NMR-Officers* besitzen Weisungsbefugnis für NMR-Angelegenheiten gegenüber den Nutzern der jeweiligen Arbeitskreise.

4. Aufgaben

Der zentrale NMR-Service bietet Nutzern den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten an. Die Leiter und Mitarbeiter des NMR-Service sind für den ordnungsgemäßen Betrieb dieser NMR-Geräte verantwortlich. In regelmäßigen Abständen werden dazu Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durchgeführt. Geräte- und Messparameter werden von den Leitern 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 Mitglieder der o.g. TUM-School, sowie alle Studierenden an dieser School. Nutzer aus anderen Bereichen der TUM können auf Antrag zugelassen werden. Nutzer im Rahmen 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 temporär 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 selbst 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 selbst (im Falle von sehr erfahrenen Nutzern), einen *NMR-Officer* oder durch das Servicepersonal durchgeführt werden. Der Leiter entscheidet über die 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.

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 und *Officers* geschult, um die Wahl des Messgeräts fachgerecht selbst zu entscheiden. Im Falle von einseitiger Überlastung an 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 **AV250, DRX400** und **AV500 (im Moment nur manueller Betrieb)**, ¹³C- und andere Heterokern-Spektren am **AV250** und **DRX400** durchgeführt. Die Einteilung erfolgt anhand der Messaufgaben und der Verfügbarkeit/Auslastung der jeweiligen Messgeräte zum Zeitpunkt des Analysenauftrags.

Studierende (Master) und Wissenschaftliche Mitarbeiter:

Anspruchsvollere Messungen für Studierende (Masterarbeit) und Mitarbeiter in der Forschung werden am **AV400HD** und **AV400US** (direkte Probenköpfe, Arbeitspferde für ¹H und X-Kerne, schnelle Reaktionskontrolle) aufgesetzt. Höchste Ansprüche werden durch die beiden 500 MHz Geräte bedient: **AV500 (nur manueller Betrieb)** und **AV500HD** (inverse BBI-Probenköpfe für ¹H-detektierte Messungen, alle 2D-Spektren, Metabolomics) und **AV500c** (direkter QNP-Kryo-Kopf für ¹³C, ³¹P, ¹⁹F und ²⁹Si bei höchster Empfindlichkeit).

Hoch- oder Tieftemperaturmessungen für Studierende und Wissenschaftliche Mitarbeiter werden bevorzugt am **AV400US**, **AV300 TC (im Moment nur manueller Betrieb)** oder **DRX400 (im Moment nur manueller Betrieb)** durchgeführt. Messungen zur Zerfalls- oder Bildungskinetik werden je nach Beschaffenheit der Probe und des zu beobachtenden Kerns am **AV400HD**, **AV500 (manueller Betrieb)** und **AVHD500** (¹H), **AV500c** (¹³C, ¹⁹F, ²⁹Si oder ³¹P) oder **AV400US** (Metallkerne) eingeteilt. Schnell benötigte Messungen, z.B. im Rahmen der Reaktionskontrolle, werden bevorzugt an den Geräten **DRX400**, **AVHD400** und **AV400US** abgewickelt.

7. Datensicherung und Datenweitergabe

Nach Abschluss der Messung werden die Primärdaten umgehend und automatisch an zwei unabhängige zentrale File-Server (LOGS und LRZ-NMR-Webdisk) weitergeleitet und an den Nutzer übergeben. Die Nutzer laden über die jeweiligen Accounts die entsprechenden Files in der Regel vom LOGS-Server (<https://logs.nmr.de/facility/>) auf lokale Rechnersysteme zur weiteren Prozessierung (in der Regel mit der für alle Studierenden und Mitarbeiter frei verfügbaren Campuslizenz von MNOVA). 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. Die Archivierung der Messdaten erfolgt darüber hinaus unabhängig durch den Service auf dem LOGS-Server: <https://logs.nmr.de/facility/> und > 10 Jahre auf der unabhängigen Webdisk auf dem LRZ-Rechner: <https://webdisk.nmr.de/>.

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, möglichst optimale Spektren zu erhalten. Hierzu werden an allen Geräten periodische Tests (z.B. Humptest) durchgeführt. Die Urheberschaft für die Primärdaten und deren Interpretation obliegt allein dem Nutzer, außer wenn vorher eine wissenschaftliche Zusammenarbeit vereinbart wurde. Die Urheberschaft an den Messdaten wird gewährleistet durch individuelle Zugänge zu den Daten über die Passwortgeschützten Accounts und Bereiche der LOGS und Webdisk Server. Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren.

9. Pauschalierte Kosten für NMR-Messungen

Die pauschalierten Kosten orientieren sich an den Empfehlungen des „*DFG Networks of German NMR Centers (G-NMR)*“.

Die TUM-intern abgerechneten Kosten berücksichtigen dabei Eigenbeiträge von Arbeitsgruppen bei der Erstanschaffung der benutzten NMR-Geräte oder bei den laufenden jährlichen Kosten (z.B. Kryowartung, größere Reparaturkosten).

Die Kostenabrechnungen und –verbuchungen erfolgen durch den Leiter des zentralen NMR-Service anhand der verbrauchten Messzeiten (jeweils dokumentiert im Accounting von ICON-NMR) auf ein dafür eingerichtetes TUM-Konto. Die Einnahmen werden ausschließlich zur Deckung von laufenden Kosten im NMR-Service verwendet.

Für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten werden folgende pauschalierte akkumulierte **Kosten pro Stunde Gerätezeit** erhoben (Stand 28.05.2024).

NMR Gerät Feldstärke < 500 MHz

5,00 € (10,00 €)

NMR Gerät Feldstärke = 500 MHz und größer

10,00 € (15,00 €)

Die Kostenangaben beziehen sich auf Messungen im automatischen Probenbetrieb bzw. in Klammern durch manuell durchgeführte Aufträge.

ANHANG 1 Übersicht der Geräte im zentralen NMR-Service (Stand 28.05.2024)

Gerät	Ausstattung	Verwendung	Ansprechpartner, Raum, Alter
<p>200 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kennung: AV200</p> <p>AV-I Konsole</p> <p>Topspin 2.1</p> <p>HH005902</p> <p>Magnet gequench. Außerbetriebnahme 2023</p> <p>In Planung: Ersatz durch ein neues 400 MHz Spektrometer</p>	<p>Inverser HC- Probenkopf mit Z- Gradientenspule</p> <p>Probengeber, BACS 120</p> <p>Keine Temperiereinheit</p>	<p>Schnelle ^1H-Spektren v.a. für Studenten</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 3.000 h/Jahr</p> <p>^1H Spektren und einfache 2- dimensionale Experimente (COSY, TOCSY, HSQC, HMBC) im Rahmen von Praktika</p> <p>Probenabgabe im Raum 11005</p>	<p>Eisenreich</p> <p>Raum 16504</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: (ehemalig Jeol 270 AC): 1990</p> <p>Konsole: 2003</p> <p>Probenkopf: 2003</p>
<p>250 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kennung: AV250</p> <p>„Synthy“</p> <p>AV-I Konsole</p> <p>Topspin 2.1</p> <p>Studentengerät</p>	<p>Dual CH- Probenkopf und QNP- Probenkopf mit Z- Gradient</p> <p>Probengeber, BACS 60</p> <p>Keine Temperiereinheit</p> <p>Kein TOP-Shim</p> <p>Kein ATMA</p>	<p>Gerät für OC- Praktika (^1H, ^{13}C, einfache 2D Experimente in Automation) (8-12 Uhr, über Nacht ab 18 Uhr)</p> <p>Demogerät für Studierende: Handmessungen durch Studierende (13-18 Uhr)</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 7.000 h/Jahr</p> <p>^1H und ^{13}C Spektren in Automation für Praktika</p>	<p>Gemmecker, Brandl</p> <p>Raum 12006</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: 2000</p> <p>Konsole: 2000</p> <p>Probenkopf: 2000</p>

<p>300 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kürzel: AV300-TC</p> <p>AV-III Konsole</p> <p>Topspin 3.1</p> <p>HH001893</p> <p>Nicht mehr funktionsfähig in Automation</p> <p>In Planung: Konsolenersatz durch jüngere AV-III Konsole, ATMA-Probenkopf und Wechsler vom AVHD300 (siehe nächste Position)</p>	<p>Direkter Breitband- BB-Probenkopf mit Z-Gradientenspule</p> <p>Kein ATMA</p> <p>Temperiereinheit</p>	<p>Manuelle Messung v.a. von Heterokernen (v.a. Si)</p> <p>Titrationsexperimente</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 4.000 h/Jahr</p> <p>In Planung: Steigerung der Nutzungsdauer auf 8000 h/Jahr durch Konsolenersatz mit AV-III und Umbau des Wechslers und Probenkopfs</p>	<p>Troll</p> <p>Raum 12301</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: 1995</p> <p>Konsole: 2010</p> <p>Probenkopf: 2010</p>
<p>300 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>AVHD300</p> <p>Avance-III</p> <p>10165045</p> <p>Magnet gequencht. Außerbetriebnahme 2024</p> <p>In Planung: Ersatz durch ein neues 400 MHz Spektrometer</p> <p>Weiterverwendung der AV-III Konsole, des Probenkopfs und Wechslers am AV300 (TC)</p>	<p>Direkter Breitband BBO-Probenkopf mit automatischer Abstimmung</p> <p>Probengeber Sample X-Press</p> <p>Temperiereinheit</p>	<p>Routinespektren von allen Heterokernen (Ausnahme ¹⁹F) für Studierende (Master) und wissenschaftliche Mitarbeiter</p> <p>Heterokerne, v.a. ¹³C, ²⁹Si, ³¹P, ¹⁵N, ¹¹B, ¹⁷O etc.</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 7.000 h/Jahr</p>	<p>Eisenreich</p> <p>Raum 11005</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: 1990</p> <p>Konsole: 2014, Probenkopf: 2014</p>

400 MHz Bruker AVHD400 Avance-III	BBO-Probenkopf mit Z-Gradient Automatisch abstimmbar Probengeber: Sample X-Press Temperiereinheit	Schnelle Messung von ^1H und X- detektierten Experimenten für wissenschaftliche Mitarbeiter Nutzungsdauer: ca. 8.000 h/Jahr	Eisenreich Raum 11005 Abgeschirmter Magnet, Konsole und Probenkopf: 2014
---	---	---	---

400 MHz Bruker NEO-400T Avance Neo Konsole Topspin 4.0	Triple-Resonanz, ATMA, Sample X- Press, Temperiereinheit TBI inverser Probenkopf ^1H , BB, ^{13}C TBO direkter Probenkopf BB, ^{13}C , ^1H	Messung von Triple- Resonanzexperimenten z.B. HCP, HCSi v.a. belegt durch wissenschaftliche Mitarbeiter aus der TC und AC Nutzungsdauer: ca. 7.000 h/Jahr	Troll Raum 11007 Abgeschirmter Magnet 2018
400 MHz Bruker AV400US Avance-III Topspin 2.1 H03128MB	Direkter BB- Breitband Probenkopf mit Z- Gradientenspule Probengeber BACS 60 Temperiereinheit	Messung von ^1H (schnelle Reaktionskontrolle) und Heterokernen (^{31}P bis ^{109}Ag) Hoch- und Tieftemperatur- messungen Nutzungsdauer: ca. 8.000 h/Jahr	Matthews Raum 16510 Abgeschirmter Magnet, Konsole und Probenkopf: 2009

<p>400 MHz</p> <p>Bruker HH004607</p> <p>Kennung: DRX400</p> <p>AV-I Konsole</p> <p>Nicht mehr einsetzbar für Vollautomation</p> <p>Topspin 1.3</p> <p>In Planung: Ersatz durch komplettes 400 MHz Spektrometer oder nur Konsolenersatz</p>	<p>Direkter Breitband-BB-Probenkopf ohne Gradientenspule</p> <p>Temperiereinheit für einen großen Temperaturbereich in Automation und Langzeit</p>	<p>Messung von Heterokernen</p> <p>Hoch- und Tieftemperaturmessungen</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 3.000 h/Jahr</p>	<p>Matthews</p> <p>Raum 11001</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: 1993</p> <p>Konsole und Probenkopf: 2007</p>
<p>500 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kennung:</p> <p>AV500c</p> <p>Avance-III</p> <p>Topspin 3.6.5</p> <p>10014969</p>	<p>Direkter QNP-Cryoprobenkopf für höchstempfindliche Detektion von ^{13}C, ^{29}Si, ^{31}P und ^{19}F mit automatischer Abstimmung</p> <p>Probengeber BACS 120</p> <p>Temperiereinheit mit BCU05</p>	<p>Messungen von ^{13}C, ^{29}Si, ^{31}P und ^{19}F bei höchster Empfindlichkeit. Korrelationsexperimente mit Detektion der Heterokerne (z. B. INADEQUATE) in Vollautomation</p> <p>Anspruchsvolle ^{13}C, ^{29}Si, ^{31}P und ^{19}F</p> <p>Messungen an niedrig konzentrierten Proben von wissenschaftlichen Mitarbeitern</p> <p>Kinetik mit hoher Zeitauflösung</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 8.000 h/Jahr</p>	<p>Eisenreich</p> <p>Raum 11005</p> <p>Baujahr:</p> <p>Abgeschirmter Magnet, Konsole und Probenkopf: 2010</p> <p>PC: 2023</p>

<p>500 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kennung:</p> <p>AVHD500</p> <p>Avance-III</p> <p>10165039</p>	<p>Inverser BBI-Probenkopf mit automatischer Abstimmung (sehr gute Empfindlichkeit für ¹H Beobachtung)</p> <p>Sample XPress</p> <p>Temperiereinheit mit BCU05</p>	<p>¹H Spektren bei hohem Feld und alle 2D-Standardexperimente (COSY, NOESY, TOCSY, HSQC, HMBC) ¹H-¹³C, ¹H-¹⁵N und andere ¹H-X Experimente in Vollautomation</p> <p>Metabolomics (auch Wasserproben) in Vollautomation</p> <p>Anspruchsvolle inverse Messungen für wissenschaftliche Mitarbeiter</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 8.000 h/Jahr</p>	<p>Eisenreich</p> <p>Raum 11005</p> <p>Abgeschirmter Magnet: 2001</p> <p>Konsole und Probenkopf: 2014</p> <p>Probengeber: 2018</p>
--	--	--	--

<p>500 MHz</p> <p>Bruker</p> <p>Kennung:</p> <p>AV500</p> <p>AV-I Konsole HH006500</p> <p>Kein Probengeber</p> <p>Geplant: Ersatz durch komplettes 500 MHz Spektrometer oder Konsolenersatz</p>	<p>Inverser Dual-Probenkopf- Kein ATMA</p>	<p>Manuelle Spezialmessungen in Langzeit in der Regel für Proben < 1 mg (Spezialröhrchen)</p> <p>Nutzungsdauer: ca. 6.000 h/Jahr</p>	<p>Eisenreich</p> <p>Raum 16504</p> <p>Nicht abgeschirmter Magnet: 1995</p> <p>Konsole und Probenkopf: 2001</p>
---	--	---	---