

## **Nutzungsordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg**

### *I. Ziel*

Das Ziel der Nutzungsordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer ist eine effiziente Nutzung der Messzeit durch Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter der einzelnen Arbeitsgruppen der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (MLU) sowie Studierende im Rahmen von Abschlussarbeiten oder Praktika. Die hochempfindlichen und komplex zu bedienenden Hochfeld-NMR-Spektrometer sollen dabei für eingewiesene Nutzer aus den Arbeitsgruppen direkt zugänglich und nutzbar sein; Proben für nicht eingewiesene Personen werden in der Regel durch technisches Fachpersonal vermessen.

Die Arbeits- bzw. Fachgruppen der Naturwissenschaftlichen Fakultäten, die über NMR-Spektrometer verfügen, werden von einer verantwortlichen Person geführt, welche den Ablauf von Servicemessungen und die Inhalte von durchzuführenden Forschungsprojekten festlegt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG<sup>1</sup> verantwortlich ist.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

### *II. Verpflichtungen*

Die naturwissenschaftlichen Fakultäten verfügen über dezentral aufgestellte NMR-Spektrometer die mit der ausgewiesenen Spezifikation gemäß *Anlage 1* ausgestattet sind. Das Fachpersonal der einzelnen Fachgruppen führt in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durch und optimiert entsprechende Geräteparameter, die die technischen Voraussetzungen für NMR-Messungen in möglichst guter Qualität gewährleisten sollen.

Messungen im Servicebetrieb als auch im Rahmen von Forschungs Kooperationen für bzw. mit Partnern an der MLU werden üblicherweise nicht in Rechnung gestellt. Nur im Servicebetrieb des Bereichs Chemie werden die vom Institutsvorstand festgelegten Kosten pro Einzelmessung MLU-intern umgelegt. Die Betriebs- und Instandhaltungskosten werden zentral und von den Instituten bzw. den jeweiligen Arbeits-/Fachgruppen getragen. Für Messungen für bzw. mit externen Partnern an Universitäten oder Forschungsinstituten können im Einzelfall Kosten in Rechnung gestellt werden. Die Kosten sind in entsprechenden Kategorien pauschaliert und werden in Anlage 2 dieser Nutzungsordnung detailliert aufgeführt. Für externe Messungen im Rahmen von DFG-Projekten können Nutzungsgebühren gemäß der bei der DFG hinterlegten Stunden- und Tagessätze für forschungsbedingten Mehraufwand in Rechnung gestellt werden. Messanfragen aus dem kommerziellen Sektor (auch: forschende Industrie) werden im Einzelfall im Rahmen der Auftragsforschung über die Drittmittelverwaltung der MLU in Rechnung gestellt. Entsprechende Einnahmen fließen in die Instandhaltung.

---

<sup>1</sup> [https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/rechtliche\\_rahmenbedingungen/gute\\_wissenschaftliche\\_praxis/kodex\\_gwp.pdf](https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/rechtliche_rahmenbedingungen/gute_wissenschaftliche_praxis/kodex_gwp.pdf)

## Nutzungsordnung NMR, MLU Halle

Im Rahmen dieser Nutzungsordnung werden folgende Gruppenleiter sowie die Geräteverantwortlichen benannt:

Prof. Dr. Kay Saalwächter Dr. Alexey Krushelnitsky	Fachgruppenleiter NMR Geräteverantwortlicher Betty-Heimann-Str. 7 Telefon: 0356/55 28560 E-Mail: <a href="mailto:kay.saalwaechter@physik.uni-halle.de">kay.saalwaechter@physik.uni-halle.de</a>
Prof. Dr. Jochen Balbach Prof. Detlef Reichert	Fachgruppenleiter Biophysik Geräteverantwortlicher Betty-Heimann-Str. 7 Telefon: 0356/55 28550 E-Mail: <a href="mailto:jochen.balbach@physik.uni-halle.de">jochen.balbach@physik.uni-halle.de</a>
Prof. Dr. Frank Bordusa Dr. Pavlo Bielytskyi	Abteilungsleiter Naturstoffbiochemie Geräteverantwortlicher Kurt-Mothes-Str. 3a Telefon: 0345/55 24880 E-Mail: <a href="mailto:frank.bordusa@biochemtech.uni-halle.de">frank.bordusa@biochemtech.uni-halle.de</a>
Prof. Dr. René Csuk Dr. Dieter Ströhl	Fachgruppenleiter Organische Chemie II Geräteverantwortlicher Kurt-Mothes-Str. 2 Telefon: 0345/55 25660 E-Mail: <a href="mailto:rene.csuk@chemie.uni-halle.de">rene.csuk@chemie.uni-halle.de</a>

### III. Zugang und Durchführung der Nutzung

- a) Die Benutzung der Spektrometer setzt die Kenntnisnahme der Nutzungsordnung sowie eine Einweisung durch den Geräteverantwortlichen der jeweiligen Fachgruppe, die das NMR-Spektrometer betreibt, voraus.
- b) Die Benutzung der Spektrometer setzt eine Sicherheitseinweisung (gegen Unterschrift) zum Umgang mit starken Magnetfeldern und Kryogenen sowie dem sicheren Arbeiten in einem Chemie- bzw. Biochemielabor voraus.
- c) Die große Anzahl an Nutzern mit unterschiedlichen Anforderungen und Arbeitsweisen bedingt uneingeschränkt das disziplinierte Einhalten der bestehenden Regeln, sowie einen kollegialen Umgang zwischen den Nutzern und den Verantwortlichen.
- d) Zu vermessende Proben sind vor und nach der NMR-Messung außerhalb der NMR-Räumlichkeiten sicher zu lagern.
- e) Die Nutzer dokumentieren ihre Nutzungszeit und experimentelle Details in den ausliegenden Log-Büchern bzw. in einem dem NMR-Spektrometer zugeordneten elektronischen Laborbuch.
- f) Servicemessungen werden nur vom Fachpersonal durchgeführt. Hierzu geben Nutzer die Proben nach den Regeln der Serviceeinheit mit der gewünschten Auswahl an Experimenten ab und erhalten entsprechend der *Datenweitergabe* die gemessenen Spektren in elektronischer Form zurück.

g) Die Spektrometer sind mit großer Sorgfalt zu bedienen und den Anweisungen durch die Geräteverantwortlichen ist Folge zu leisten. Im Falle von gravierendem Fehlverhalten können die Rechte einzelner Nutzer durch den zuständigen Fachgruppenleiter eingeschränkt werden.

#### *IV. Datensicherung und Datenweitergabe*

Die Nutzer sind für die Datensicherung selbst verantwortlich und nutzen die in den einzelnen Arbeitsgruppen etablierte Datenarchivierung.

Die bei Servicemessungen anfallenden Daten werden den Nutzern elektronisch spätestens am Folgetag der eigentlichen Messung bereitgestellt. Die Primärdaten werden für die Nutzer ein Jahr lang gesichert und bleiben während dieser Zeit zugänglich.

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 den Nutzern.

#### *V. Datenanalyse, Urheberschaft und Veröffentlichungen*

Die Verantwortung für die Datenanalyse der Primärdaten obliegt den Nutzern. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen können auf Anfrage Hilfestellung zur Datenanalyse geben.

Das Servicepersonal ist für die Qualität der Primärdaten, die durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich, es gewährt nur für die NMR-technischen Voraussetzungen.

Die Urheberschaft für die Primärdaten und deren Analyse gehört alleinig den Nutzern, außer wenn vorher eine wissenschaftliche Zusammenarbeit mit dem Servicepersonal vereinbart wurde. Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren.

#### *VI. Pauschalierte Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten*

Die pauschalen Kosten für den externen Zugang zu den NMR-Geräten der MLU werden in Anlage 2 dieser Nutzungsordnung geregelt.

#### *VII. Gültigkeit*

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift der Gruppenleiter in Kraft. Die Nutzungsordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Halle, den 13. März 2023

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Kay Saalwächter

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Frank Bordusa

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Jochen Balbach

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. René Csuk

**Anlage 1 zur Nutzungsordnung für Kernspinresonanz-(NMR-)Spektrometer der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Gerätespezifikationen**

Fachgruppe NMR

Bezeichnung, Hersteller und Typ der Konsole	Inbetriebnahmen (Jahr), Betriebsdauer	Probenköpfe und weitere Spezifika
Bruker Avance III Festkörper-NMR 400 MHz (wide bore, 2 Kanäle, alte TecMag/AMT Verst.)	Konsole 2014, Magnet 1998, 3000 h	4 mm MAS DVT BB HXY 4 mm MAS WVT BB HX 3.2 mm MAS DVT BB HX 5 mm statisch VTN BB HX mit Goniometeroption
Bruker Avance III Festkörper-NMR 400 MHz (wide bore, 2 Kanäle)	Konsole 2008, Magnet 2004, 5000 h	
Bruker Avance II/III Festkörper-NMR 400 MHz (wide bore, 3 Kanäle, PFG unit)	Konsole 2006, (upgrade 2014) Magnet 1992, 5000 h	5 mm Diff60/Micro5, $^1\text{H}$ , X (inserts: $^2\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , $^7\text{Li}$ , $^{19}\text{F}$ )
Bruker Avance III Festkörper-NMR 200 MHz (wide bore, 1 channel)	Konsole 2011, Magnet 1998, 3000 h	5 mm statisch VTN $^1\text{H}$
3 Bruker Minispec mq 20	2006 - 2008	$^1\text{H}$ Niederfeld-Relaxometrie, 1 Gerät mit gepulster Feldgradientendiffusometrie

Fachgruppe Biophysik

Bezeichnung, Hersteller und Typ der Konsole	Inbetriebnahmen (Jahr) Betriebsdauer	Probenköpfe und weitere Spezifika
Bruker Avance III 800 MHz	Konsole 2007, (upgrade 2021) Magnet 2007, 8000 h	5 mm TXO Cryo $^{13}\text{C}$ observe, $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 5 mm TCI Cryo $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 5 mm QXI $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad.
Bruker Avance III 600 MHz	Konsole 2007, (upgrade 2020) Magnet 2007, 7000 h	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 3 mm TBI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{31}\text{P}$ – $^{15}\text{N}$ , Z-Grad 5 mm QXI $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 8 mm Mischkammerprobenkopf $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , Z-Grad.
Bruker Avance II+ 600 MHz	Konsole 2007, Magnet 2007 7000 h	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 5mm BBI $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ - $^{109}\text{Ag}$ , Z-Grad. 4 mm MAS DVT $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , 15 kHz 2.5 mm MAS VTN $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ , 35 kHz Hochdruck-Setup bis 2500 bar

## Nutzungsordnung NMR, MLU Halle

		Fachgruppe NMR: 3.2 mm MAS DVT, $^1\text{H}$ , $^2\text{H}$ , $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 24 kHz 3.2 mm MAS DVT EF $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^2\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , 24 kHz 1.3 mm MAS DTN, $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ , 70 kHz
Bruker AMX/DRX 500 MHz	Konsole 1993, Magnet 2019, 7000 h	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ Z-Grad.

## Abteilung Naturstoffbiochemie

Bezeichnung, Hersteller und Typ der Konsole	Inbetriebnahmen (Jahr) Betriebsdauer	Probenköpfe und weitere Spezifika
Bruker Avance III 700 MHz (narrow bore)	Konsole 2011, Magnet 2011 4000 h	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , Z-Grad. 5 mm BBI $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ - $^{207}\text{Pb}$ , Z-Grad. 4 mm HR-MAS DVT $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , $^2\text{H}$ , Z-Grad., 6 kHz
Bruker Avance III HD 400 MHz (narrow bore)	Konsole 2012, Magnet 2000 (dtz. defekt) 4000 h	5 mm TBI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{31}\text{P}$ – $^{15}\text{N}$ Z-Grad. 5 mm BBFO $^1\text{H}$ ( $^{19}\text{F}$ ), $^{31}\text{P}$ - $^{109}\text{Ag}$ , Z-Grad. 4 mm HR-MAS $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , $^2\text{H}$ Z-Grad. 6 kHz 4 mm HR.MAS $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{13}\text{C}$ , $^2\text{H}$ Z-Grad. 6 kHz
Magritek Spinsolve 60 MHz	2020, 500 h	$^1\text{H}$ , $^{19}\text{F}$ , $^{13}\text{C}$

## Fachgruppe Organische Chemie II

Bezeichnung, Hersteller und Typ der Konsole	Inbetriebnahmen (Jahr) Betriebsdauer	Probenköpfe und weitere Spezifika
Agilent DD2 500 MHz (narrow bore)	Konsole 2013, Magnet 1993, 6000 h	5 mm PFG OneNMR $^1\text{H}$ ( $^{19}\text{F}$ ), $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ , Z-Grad.
Agilent VNMRS 400 MHz (narrow bore)	Konsole 2011, Magnet 1994, 6000 h	5 mm PFG OneNMR $^1\text{H}$ ( $^{19}\text{F}$ ), $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ , Z-Grad.
Magritek Spinsolve 80 MHz	2019, 6000h	5 mm; $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{19}\text{F}$ ; Autosampler, Durchflussszelle
Bruker Fourier80 80 MHz	2021, 6000h	5 mm; $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$

**Anlage 2 zur Nutzungsordnung für Kernspinresonanz-(NMR-)Spektrometer der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg – Pauschale Kosten**

Die jeweilige Fachgruppe erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Spektrometern folgende pauschale Kosten:

Feldstärke	Kosten pro Stunde	Kosten pro Tag
800 MHz	60 €	1.440 €
700 MHz	50 €	1.170 €
600 MHz	40 €	960 €
500 MHz	30 €	720 €
400 MHz	30 €	720 €
400 MHz (Festkörper)	40 €	960 €
200 MHz (Festkörper)	20 €	480 €
Benchtop	20 €	480 €

Die Kosten für NMR-Spektren (500 und 400 MHz) des **Bereichs Chemie** werden auf Basis der vom Institutsvorstand jeweils festgelegten **Einzelkosten pro Messung** auf die Arbeitsgruppen **universitäts-intern umgelegt**. Diese belaufen sich derzeit auf 1 € innerhalb des Instituts für Chemie und 3 € für andere Arbeitsgruppen der MLU. Für längere nicht-Routine-messungen wird der o.g. Stundensatz angesetzt. Die Benchtop-Geräte der Chemie werden nahezu ausschließlich für Zwecke der Ausbildung von Studierenden verwendet; es werden daher keine Kosten veranschlagt.