

**Nutzungsordnung**  
des  
**Center of Molecular and Structural Analytics**  
an der  
**Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf**  
**(CeMSA@HHU)**

**Präambel**

1. Das CeMSA@HHU bietet als Serviceeinrichtung der Wissenschaftlichen Einrichtung Chemie der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf einen Analytik-Service mit den Abteilungen (i) Kernresonanzspektroskopie und (ii) Massenspektrometrie. Weitere Abteilungen können dem Zentrum beitreten, wenn Methoden von allgemeinem Interesse angeboten werden.
2. Einem Beitritt muss der Vorstand des CeMSA@HHU mit einfacher Mehrheit zustimmen.
3. Die Abteilungen sind finanziell unabhängig.
4. Das CeMSA@HHU ist ein Gerätezentrum der WE Chemie.

**§ 1 Nutzung der Gerätezentren**

1. Der Service des CeMSA@HHU steht allen wissenschaftlich tätigen Mitarbeiter\*innen der Heinrich-Heine-Universität offen. Der Service ist grundsätzlich nur für wissenschaftliche Zwecke, nicht für die Krankenversorgung vorgesehen. Anderenfalls ist die Ziffer 3 dieses Paragraphen zu berücksichtigen. Die Nutzung erfolgt im Rahmen der Nutzungsordnung.
2. Eine Übersicht über den angebotenen Service ist auf der Homepage der Abteilungen unter <https://cems.hhu.de> zu finden. Weitere Messmethoden können bei Bedarf im Rahmen der bestehenden Möglichkeiten und Ressourcen (personell und infrastrukturell) etabliert werden. Die Geräteausstattung ist im Anhang I dieser Ordnung aufgelistet.

Die Gebühren sind in der Gebührenordnung in Anhang II geregelt und auf der Homepage des CeMSA@HHU veröffentlicht.

Messungen für Wissenschaftler\*innen anderer Universitäten und Forschungsinstitute können im Rahmen einer Kooperation durchgeführt werden.

3. Eine externe Nutzung zum Beispiel durch Auftraggeber aus der Industrie oder die wissenschaftlich tätigen Mitarbeiter\*innen der An-Institute ist möglich, wenn freie Kapazitäten vorhanden sind. Gleiches gilt für eine Nutzung für krankenversorgende Zwecke aus dem Bereich der Medizin. Hierzu ist jeweils eine vertragliche Regelung zwischen der Heinrich-Heine-Universität und dem Auftraggeber notwendig. Die Kosten werden unter Zugrundelegung einer Vollkostenrechnung geltend gemacht.
4. Nutzer\*innen können in begründeten Fällen durch die/den Manger\*in des CeMSA@HHU von der weiteren Nutzung der Geräte ausgeschlossen werden.

## **§ 2 Eigenständige Messungen**

1. Messungen im CeMSA@HHU erfolgen in der Regel im Vollservice (siehe Anhang I). Wird selbstständiges Messen an einem Gerät genehmigt, so ist die Nutzung dieses Gerätes nur nach einer spezifischen Einweisung für dieses Gerät gestattet. Es ist prinzipiell untersagt, grundlegende Einstellungen und Konfigurationen eines Gerätes ohne ausdrückliche Genehmigung durch das Personal des CeMSA@HHU vorzunehmen. Die Nutzer\*innen sind verpflichtet, die überlassenen Geräte sachgemäß und pfleglich zu behandeln.
2. Für Schäden an Geräten, die durch unsachgemäße Bedienung hervorgerufen werden, ist die Arbeitsgruppe der/des jeweiligen Nutzers\*in\* verantwortlich. Die Arbeitsgruppe muss die Reparaturkosten übernehmen. Eigenständige Messungen sind nur möglich, wenn die/der zuständige Arbeitsgruppenleiter\*in dies ausdrücklich genehmigt.
3. Im Falle von technischen Defekten, Software-Problemen oder Ähnlichem, muss die/der Nutzer\*in seine Arbeiten sofort unterbrechen und ist verpflichtet, dies der/dem zuständigen Ansprechpartner\*in umgehend mitzuteilen. Es ist nicht erlaubt, eigenständig Reparaturversuche zu unternehmen.
4. Für die Einhaltung der geltenden gesetzlichen Bestimmungen (u. a. Gentechnikverordnung, Gefahrstoffverordnung, Strahlenschutzverordnung) sind die Forschenden/Nutzenden eigenständig verantwortlich.

## **§ 3 Terminvereinbarung**

1. Messungen in der NMR-Abteilung erfolgen nach einem intelligenten Probenmanagement unter Berücksichtigung der Messdauer, um eine optimale Nutzung der Geräte und einen zeitnahen Service zu gewährleisten. Prinzipiell werden Proben in der Reihenfolge des Eingangs bearbeitet, Messungen mit langen Messzeiten werden aber auf die Nacht oder das Wochenende verschoben, um einen effizienten und zeitnahen Service zu garantieren. Für Spezial-Messungen die nicht in der Automation erfolgen können (Hochtemperatur, Tieftemperatur, selektive Experimente, zeitkritische Experimente) ist eine vorherige Terminabsprache mit dem technischen Personal (ca. 1 Woche im Voraus) erforderlich.
2. Messungen in der Massenspektrometrie-Abteilung erfolgen nach einem intelligenten Probenmanagement. Prinzipiell werden Proben allerdings in der Reihenfolge des Eingangs bearbeitet. Für Spezial-Messungen ist eine vorherige Terminabsprache (ca. 1 Woche im Voraus) erforderlich.

## **§ 4 Datenspeicherung und –sicherung**

1. Die Daten der NMR-Abteilung werden direkt auf den Messrechnern gespeichert und auf einen Fileserver der Universität kopiert. Zur Datensicherung werden Backups der Daten durchgeführt. Auf den Fileserver können die Nutzer zugreifen. Es wird den Nutzern empfohlen, die Daten darüber hinaus im Institut zu archivieren.
2. Die Daten der Massenspektrometrie-Abteilung werden auf den Messrechnern gespeichert und zusätzlich auf externen Festplatten gesichert. Die Daten können den Nutzern\*innen auf Wunsch per E-Mail zur Verfügung gestellt werden.

## § 5 Publikationen

1. Werden Daten oder Bilder in Publikationen einer Arbeitsgruppe verwendet, die an Geräten des CeMSA@HHU erzeugt oder als Service erstellt wurden, soll das „Center of Molecular and Structural Analytics“ der Heinrich-Heine-Universität namentlich in der Danksagung erwähnt werden. Textvorschläge sind in Anhang III zusammengestellt.
2. Leisten Mitarbeiter\*innen des CeMSA@HHU einen erheblichen wissenschaftlichen Input zu Projekten, sollen sie als Coautoren in resultierenden Publikationen genannt werden. Die Kriterien der *Ordnung über die Grundsätze zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf* finden Anwendung.
3. Alle unter Absatz 1 und Absatz 2 genannten Publikationen sollen den Abteilungsleitern\*innen des CeMSA@HHU mitgeteilt werden.

## § 6 Änderungen der Ordnungen

Eine Änderung der Nutzungsordnung des Gerätezentrums wird durch den Vorstand der WE Chemie beschlossen.

## § 7 Anerkennung dieser Nutzungsordnung

Messungen für eine Arbeitsgruppe sind nur möglich, wenn die/der Arbeitsgruppenleiter(in) oder ein(e) andere(r) Zeichnungsberechtigte(r) die Nutzungsordnung akzeptiert hat.

Nutzungsordnung genehmigt am 30.8.2022 durch den Vorstand der WE Chemie

Ich erkenne diese Nutzungsordnung an

---

Datum

---

Titel und Name in Druckbuchstaben

---

Unterschrift

# Anhang I

## Probenabgabe und Geräteausstattung

1. Probenabgabe:
  - a. Die Probenvorbereitung obliegt den Nutzer\*innen. Die Proben werden gelöst, in ein passendes NMR-Röhrchen eingefüllt und mit einem Auftragszettel versehen. Die Probenabgabe in der NMR-Abteilung erfolgt durch Einstellen der Proben in den Probenschrank der NMR-Abteilung.  
(vor Raum 26.43.U1.13).
  - b. Die Probenabgabe in der Massenspektrometrie-Abteilung erfolgt durch Einstellen der Proben in den Probenschrank der Massenspektrometrie-Abteilung. Einzelheiten zur Probenvorbereitung finden sich je nach Methode auf der Homepage des CeMSA@HHU.  
(vor Raum 26.43.U1.34).
2. Geräteausstattung:
  - a. NMR-Spektroskopie
    - Bruker Avance III – 300
    - Bruker Avance III - 600
  - b. Massenspektrometrie
    - Finnigan Trace DSQ mit Trace GC Ultra (Thermo)
    - MALDI TOF/TOF UltrafleXtreme (Bruker Daltonics)
    - Finnigan LCQ Deca (Thermo Quest)
    - UHR-QTOF maXis 4G (Bruker Daltonics)
    - TSQ 7000 (Finnigan MAT)

## Anhang II

### Gebührenordnung für interne Nutzer

#### § 1 Grundsätze

Diese Gebührenordnung gilt nur für Abteilungen der Heinrich-Heine-Universität. Die Personalkosten für die Mitarbeiter\*innen werden von den beteiligten Lehrstühlen und aus Mitteln des CeMSA@HHU finanziert. Alle anderen Kosten (Verbrauchsmaterial, Reparaturen, ...) werden auf die Nutzer\*innen umgelegt.

#### § 2 NMR

1. Jede Arbeitsgruppe erhält im ersten Halbjahr des Folgejahres eine Abrechnung für das abgelaufene Jahr. In Rechnung gestellt werden die Messstunden des abgelaufenen Jahres. Auf Anfrage wird eine Zwischenrechnung erstellt.  
Kühlmittel für Tieftemperaturmessungen werden von den Nutzer\*innen bereitgestellt.
2. Die Messzeit für das 300 MHz-Spektrometer wird mit dem Gewichtungsfaktor 0,85 multipliziert, die Messzeit für das 600 MHz Spektrometer mit dem Gewichtungsfaktor 1,15.<sup>1</sup>
3. Für die Festlegung der Nutzungskosten werden die *Hinweise zu Gerätenutzungskosten und Gerätezentren* der DFG (DFG-Vordruck 55.04 – 11.21) berücksichtigt.
4. Die Kosten für 2023 betragen x.xx €/h.

---

<sup>1</sup> Die Messzeiten auf dem 600 MHz-Spektrometer liegen deutlich unter den Messzeiten auf dem 300 MHz Spektrometer. Die Anrechnungsfaktoren für die Messzeit berücksichtigen diesen Fakt.

5. Typische Messzeiten für Standardexperimente auf den verschiedenen Spektrometern<sup>2 3</sup>:

	<b>300 MHz</b>	<b>600 MHz</b>
<b>Experiment</b>	<b>t/min</b>	<b>t/min</b>
<b><sup>1</sup>H (16 Pulse)</b>	2	1
<b><sup>13</sup>C (1024 Pulse)</b>	66	51
<b>COSY (128 * 4 Pulse)</b>	15	14
<b>NOESY (256 * 16 Pulse)</b>	182	172
<b>ROESY (256 * 16 Pulse)</b>	175	170
<b>HSQC (256 * 4 Pulse)</b>	28	27
<b>HMBC (128 * 8 Pulse)</b>	36	32

### § 3 Massenspektrometrie

1. Jede Arbeitsgruppe erhält im Frühjahr des Folgejahres eine Abrechnung für das abgelaufene Jahr.
2. Dabei werden HR-MS- und LC/MS-Messungen doppelt gewichtet.
3. Die Kosten für 2023 für eine einfache Messung betragen x.xx €.

---

<sup>2</sup> Bei gleicher Anzahl von Pulsen verbessert sich das signal/noise mit steigender Feldstärke deutlich.

<sup>3</sup> Zu den angegebenen Zeiten kommen ca. 5 min pro Probe (nicht pro Messung) für das Handling der Probe (Probenroboter und Thermostatisierung).

## Anhang III

### Danksagungen

Im Folgenden finden Sie Vorschläge für eine Danksagung in Deutsch und in Englisch

1. Deutsch

a. Version 1

Ich danke/Wir danken dem CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics an der **H**einrich-**H**eine-**U**niversität) für die Aufnahme der massenspektrometrischen und NMR-spektroskopischen Daten.

b. Version 2

Ich danke/Wir danken dem CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics an der **H**einrich-**H**eine-**U**niversität) für die Aufnahme der massenspektrometrischen Daten.

c. Version 3

Ich danke/Wir danken dem CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics an der **H**einrich-**H**eine-**U**niversität) für die Aufnahme der NMR-spektroskopischen Daten.

2. Englisch

a. Version 1

Thanks to the CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics @ **H**einrich **H**eine **U**niversity) for recording the mass-spectrometric and the NMR-spectroscopic data.

b. Version 2

Thanks to the CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics @ **H**einrich **H**eine **U**niversity) for recording the mass-spectrometric data.

c. Version 3

Thanks to the CeMSA@HHU (**C**enter for **M**olecular and **S**tructural **A**lytics @ **H**einrich **H**eine **U**niversity) for recording the NMR-spectroscopic data.

3. In Falle der Nutzung von durch die DFG geförderte Geräte soll diese Danksagung ergänzt werden durch:

Deutsch: Wir danken der DFG für die Förderung des <Gerätebezeichnung> (<Grantnummer>).  
Englisch: Thanks to the German Science Foundation (DFG) for funding the <Gerätebezeichnung> (<Grantnummer>).

Wurden mehrere Geräte genutzt, warden diese entsprechend aufgezählt.

4.

Die Gerätebezeichnung und die Grantnummer kann folgender Tabelle entnommen werden.

Gerätebezeichnung		Grantnummer
Deutsch	Englisch	
600 MHz NMR-Spektrometer	600 MHz NMR-spectrometer	INST 208/535-1