

Operating concept (General Rules of Usage) for the NMR spectrometer at the NMR group in the Institute of Biophysics and physical Biochemistry of the Regensburg university.

I Definitionen

Der NMR-Lehrstuhl des Instituts für Biophysik und physikalische Biochemie vergibt durch den benannten Verantwortlichen (Prof. Dr. Remco Sprangers) Zugang zu den NMR-Geräten.

Als Nutzer wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einem Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte des durchzuführenden Forschungsprojekts bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG* verantwortlich ist. Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

II. Verpflichtungen des NMR Lehrstuhls

Der NMR-Lehrstuhl des Instituts für Biophysik und physikalische Biochemie bietet Nutzern Zugang zu NMR-Geräten an, deren Leistung dem ausgewählten Gerätetyp und dem der technischen Zusatzausstattung entsprechen (spezifiziert in Anlage 1). Die Gerätemanager führen in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen 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 im Anhang 2 an diese Nutzerordnung detailliert aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftliche Ansprechpersonen benannt: Prof. Remco Sprangers; E-Mail: remco.sprangers@ur.de

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

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die an einer deutschen wissenschaftlichen Forschungseinrichtung beschäftigt sind. Nutzer im Sinne von Auftragsforschung können auch Wissenschaftler an Firmen sein. 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 zu den NMR-Geräten ist die wissenschaftliche Zusammenarbeit. Dies ist mit der Komplexität der experimentellen Durchführung wie auch den zeitintensiven Messungen begründet. Als Ausnahme kann Nutzern ein eigenverantwortlicher Zugang zum NMR-Gerät gewährt werden, der Kenntnisstand kann z.B. durch eigene Publikationen nachgewiesen sein. Der eigenverantwortliche Zugang wird bei den pauschalierten Kosten (Anhang 2) gesondert berücksichtigt.

Die wissenschaftliche Ansprechperson beurteilt die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit und legt den Antrag dem Beirat zur Entscheidung vor. Dieser Beirat besteht aus dem Lehrstuhlinhaber und Repräsentanten von DFG-geförderten und nicht DFG-geförderten Verbundprojekten. Im Falle einer positiven Evaluierung benennt der Beirat das NMR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Evaluation dauert maximal 10 Arbeitstage. Die wissenschaftliche Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin für den Zugang zu dem benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit des benannten Gerätes, wobei Lehrstuhl-interne Messungen Vorrang haben, und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, welches die Projektskizze als erstes eingereicht hat. Für

den Fall, dass Unstimmigkeiten zwischen dem Beirat und Nutzern über Nutzungszeitvergabe bestehen, entscheidet der Lehrstuhlinhaber über die Nutzung.

Grundsätzlich werden die Messungen durch das geschulte Personal des Lehrstuhls durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen Ansprechpersonen oder von ihnen benannte Mitglieder des Lehrstuhls. In Ausnahmefällen kann es sehr erfahrenen Nutzern gewährt werden, selbst Messungen durchzuführen. Eine vorherige Schulung und eine Einweisung in ein Gerät durch die wissenschaftliche Ansprechperson ist dafür notwendig. Die Erlaubnis, eigenständige Messungen durchzuführen, kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden. Der Lehrstuhl 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 Lehrstuhls die Primärdaten umgehend weiter, die von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Der Lehrstuhl verpflichtet sich, für einen Zeitraum von einem Jahr die Primärdaten für den Nutzer zu sichern und die Weitergabe zu ermöglichen. 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, Urhebererschaft und Veröffentlichungen

Der Lehrstuhl ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Der Lehrstuhl gewährleistet nur die technischen Voraussetzungen (siehe II, Verpflichtungen des NMR Lehrstuhls). 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 des Nutzers bezüglich Biomolekularer NMR-Spektroskopie kann die Datenanalyse im Rahmen der wissenschaftlichen Zusammenarbeit auch von den Mitarbeitern des Lehrstuhls vollständig übernommen werden. Daher teilen sich Nutzer und Mitarbeiter die Urhebererschaft über die Primärdaten und deren Analyse.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Durch die wesentlichen Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der Interpretation werden die Mitarbeiter Teil der Autorenliste. Die Ausnahme stellt hier der eigenverantwortliche Zugang durch sehr erfahrene Nutzer dar.

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

Die pauschalierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten des NMR-Lehrstuhls am Institut für Biophysik und physikalische Biochemie der Universität Regensburg werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung geregelt, in Einklang mit den "Hinweise zu Gerätenutzungskosten und zu Gerätezentren" der DFG (DFG-Vordruck 55.04 – 06/14).

VII. Gültigkeit

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des Lehrstuhlinhabers in Kraft. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Anlage 1 zur Nutzerordnung für NMR-Geräte.

Der Lehrstuhl umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 01.07.2018):

- 800 MHz Advance III HD mit 5 mm TCI cryo Probenkopf: 1H,15N,13C (+ 2H Entkopplung) und X-Y-Z GRD.

- 600 MHz Advance III HD mit 5 mm Prodigy TCI Probenkopf: 1H,15N,13C (+ 2H Entkopplung) und Z GRD.
- 500 MHz Advance III HD mit 5 mm Prodigy TCI Probenkopf: 1H,15N,13C (+ 2H Entkopplung) und Z GRD oder 1.3 mm high speed (67 kHz) MAS Probenkopf: 1H, 15N, 13C (+ 2H Entkopplung)/ 4 mm broadband MAS Probenkopf (15N-31P, 1H).

Anlage 2 zur Nutzerordnung für NMR-Geräte - Pauschalierte Kosten

Der Lehrstuhl erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten pauschalierte Kosten laut DFG-Vordruck 55.04 – 06/14. Diese Kosten werden tageweise abgerechnet.

Für die Nutzung als wissenschaftliche Zusammenarbeit gilt:

Feldstärke 500–600 MHz:

Nutzungsdauer NMR-Geräten bis zu 7 Tagen: 960 €/Tag (40 €/h)

Nutzungsdauer NMR-Geräten zwischen 8 und 20 Tagen: 800 €/Tag (33.34 €/h)

Nutzungsdauer NMR-Geräten zwischen 21 und 31 Tagen (Festpreis): 16.000 € (21,51 €/h)

Feldstärke 800 MHz:

Nutzungsdauer NMR-Geräten bis zu 7 Tagen: 1.440 €/Tag (60 €/h)

Nutzungsdauer NMR-Geräten zwischen 8 und 20 Tagen: 1.200 €/Tag (50 €/h)

Nutzungsdauer NMR-Geräten zwischen 21 und 31 Tagen (Festpreis): 24.000 € (32,86 €/h)

Alle anfallenden Reparaturkosten werden vom Lehrstuhl getragen bzw. sind pauschal in den Nutzungskosten enthalten. Von dieser Regelung ausdrücklich ausgenommen sind grob fahrlässige oder vorsätzliche Beschädigungen. Deren Kosten sind in jedem Falle alleine vom Verursacher zu tragen.

Nutzer können bei der DFG pauschalierte Kosten in Höhe von maximal 32.000 € pro Jahr beantragen. Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für diejenigen Arbeitsgruppen von der dargestellten Tabelle abweichen, falls sie sich bei der Erstanschaffung eines NMR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.

*)http://www.dfg.de/download/pdf/dfg_im_profil/reden_stellungnahmen/download/empfehlung_wiss_praxis_1310.pdf