

Nutzungsordnung für die Geräte der MS-Plattform an der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät der Friedrich-Schiller-Universität (FSU) Jena

§1 Allgemeines

Die MS-Plattform ist eine wissenschaftliche Dienstleistungseinrichtung an der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät der FSU, welche gemeinschaftlich durch das Institut für Anorganische und Analytische Chemie (IAAC) und das Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie (IOMC) betrieben wird. Sie dient der Anwendung massenspektroskopischer Methoden auf wissenschaftliche Fragestellungen aus den Bereichen Chemie, Biochemie, Pharmazie, Materialwissenschaften und angrenzender Forschungsgebiete sowie der Methodenentwicklung. Konfiguration und Leistungsumfang der einzelnen Geräte sind im Anhang 1 dieser Nutzungsordnung zusammengefasst sowie im Internet einsehbar (<http://www.ms.uni-jena.de>). Wissenschaftliche und technische Ansprechpersonen sind in Anhang 2 benannt.

§2 Durchführung von Messungen

(1) Für die Ermittlung von Massenspektren stehen innerhalb der Arbeitsgruppen rund um die Uhr die entsprechenden Geräte zur Verfügung. Diese Geräte sind den Arbeitsgruppen zugeordnet und werden durch diese priorisiert genutzt. Messungen der MS-Plattform werden in den bereitgestellten (Google) Kalendern angemeldet.

Die Autorisierung zur Messung an diesen Geräten ist personengebunden, nicht übertragbar und kann jederzeit vom Leiter der MS-Plattform oder den Arbeitsgruppenleitern widerrufen werden.

(2) Im Service-Betrieb werden MS-Messungen vorrangig automatisiert durchgeführt. Die Bedienung der Geräte erfolgt dabei grundsätzlich durch Mitarbeiter der MS-Plattform. Der Nutzer hinterlegt dazu die zu messenden Proben zusammen mit dem vollständig ausgefüllten Auftragsformular an der Annahmestelle und achtet auf das Einhalten der Probenkriterien, welche auf dem Formular ausgeführt sind (siehe Anhang 3). Die aktuelle Fassung des Formulars ist im Internet abrufbar (<https://www.ms.uni-jena.de>).

(3) Messaufträge von explosiven, selbstentzündlichen oder anderweitig gefährdenden Stoffen sind der MS-Plattform im Vorfeld eindeutig anzuzeigen. Dies gilt insbesondere für Stoffe, die besondere Schutzmaßnahmen bei einem etwaigen Austreten der Probe erfordern. Radioaktive Proben können nur nach spezifischer Freigabe durch den Strahlenschutzbevollmächtigten der FSU Jena vermessen werden. Biologische Proben dürfen nur gemessen werden, wenn eine der Probe angemessene, protokollierte Inaktivierung stattgefunden hat.

(4) Proben, die nicht den Kriterien entsprechen, können nicht gemessen werden und werden wieder zur Abholung bereitgestellt. Die MS-Plattform kann Messungen auch wegen technischer Bedenken, sowie aus Sicherheitsgründen ablehnen oder eine geeignete, komplementäre Analytik im Vorfeld der Messung einfordern.

(5) Mit der Probenabgabe kommt ein Messauftrag zustande, für dessen Ausführung eine eindeutige Zuordnung des Nutzers und ggfs. Kostenstellenangabe nötig ist (siehe §6). Nach Abschluss der Messung werden die Proben zusammen mit dem Messauftragsformular zur Abholung an der dafür vorgesehenen Stelle hinterlegt, und dort zeitnah wieder vom Nutzer abgeholt.

(6) Für länger als einen Monat nicht abgeholte Proben besteht kein Anspruch auf Rückgabe.

§3 Messzeitvergabe

(1) Angenommene Proben werden entsprechend der wissenschaftlichen Fragestellung, der Komplexität und Menge der Probensubstanz sowie hinsichtlich betrieblicher Aspekte auf die vorhandenen MS-Geräte verteilt.

(2) Im Service-Betrieb erfolgt die Messung der Proben grundsätzlich in der Reihenfolge ihrer Abgabe bzw. Hinterlegung an der Sammelstelle.

(3) Interne Messaufträge der FSU haben Vorrang vor externen Auftragsmessungen.

(4) Für instabile Proben oder Langzeitexperimente kann der Nutzer einen Termin vereinbaren und wird zu diesem Zeitpunkt priorisiert behandelt. Terminänderungen müssen spätestens am vorausgehenden Werktag mitgeteilt werden. Wird diese Frist nicht eingehalten, so kann die MS-Plattform für die reservierte Messzeit ein Nutzungsentgelt erheben (§6).

§4 Qualität der Messungen

(1) Das Servicepersonal der MS-Plattform führt regelmäßig Qualitätskontrollen mit dedizierten Standardproben an allen Spektrometern durch. Sie optimiert experimentelle und technische Parameter, um eine gleichbleibend hohe Qualität der MS-Messungen zu gewährleisten. (2) Die Mitarbeiter der MS-Plattform beraten den Nutzer bei der Probenoptimierung. Für eine möglicherweise abweichende Qualität der Messdaten, die aus der individuellen Probenbeschaffenheit resultiert, ist die MS-Plattform jedoch nicht verantwortlich.

§5 Zugriff auf Messdaten, Datensicherung

(1) Der Umgang mit Proben und Messdaten erfolgt grundsätzlich vertraulich. Die Primärdaten werden nach Fertigstellung der Messung an das Rechenzentrum der FSU übertragen und dort für den zugangsgeschützten Abruf durch den Nutzer bereitgestellt. Die vertraulichen Zugangsdaten erhält der Nutzer auf Anfrage bei der MS-Plattform.

(2) Der Nutzer wird darauf hingewiesen, dass Primärdaten für Veröffentlichungen nach den allgemein bekannten Vorgaben der DFG mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden müssen. Dies erfolgt aktuell durch die MS-Plattform im Archivbereich des Universitätsrechenzentrums (URZ). Für den Fall, dass dieser Archivbereich durch das URZ nicht mehr im ausreichenden Maße zur Verfügung steht, werden die Nutzer umgehend informiert. Die Verantwortung für die Aufbewahrung der Primärdaten liegt dann allein beim Nutzer.

§6 Nutzungsentgelte

(1) Die MS-Messungen sind grundsätzlich kostenpflichtig. Die Abrechnung erfolgt pauschalisiert, alle Entgelte werden je angefangene Stunde Messzeit erhoben, unabhängig von der tatsächlich durchgeführten Zahl der Experimente.

(2) Die Nutzungsentgelte für *Angehörige des IAAC und des IOMC* werden intern durch die direkte Beteiligung dieser Institute an den laufenden Kosten für den Betrieb und den Erhalt der Geräte erbracht ("Betreiberkreis").

(3) Von *weiteren Angehörigen der FSU Jena* werden für Messungen im Servicebetrieb nach Aufwand gestaffelte, pauschalisierte Nutzungsentgelte zur internen Verrechnung erhoben, die jährlich überprüft und nötigenfalls dem veränderten Kostenrahmen angepasst werden. Die aktuell gültigen Sätze finden sich im Anhang 4.

(4) Im günstigeren automatisierten Selbstmessbetrieb gelten reduzierte Sätze (siehe Anhang 4).

(5) Angehörige der FSU, die die MS-Plattform regelmäßig in erheblichem Umfang beanspruchen, können die Aufnahme in den Betreiberkreis der MS-Plattform beantragen bzw. dazu aufgefordert werden.

(6) Für *Auftragsmessungen von Personen oder Institutionen*, die nicht der FSU angehören ("Externe"), erfolgt die Abrechnung grundsätzlich nach Vollkostenrechnung, sofern keine anderslautende Vereinbarung mit der MS-Plattform getroffen wurde. Hier wird abhängig von der genutzten Gerätekategorie/Auflösung ein Anzahlunabhängiges Entgelt erhoben, das durch eine Vollkostenrechnung

ermittelt wird und in Abstimmung mit den zuständigen Stellen der Universitätsverwaltung jährlich angepasst wird. Der aktuell gültige Satz findet sich in Anhang 4.

(7) Externe Auftragsmessungen müssen immer als solche bei der MS-Plattform gekennzeichnet und angemeldet werden. Der Versuch, externe Auftragsmessungen intern abzuwickeln, ist unzulässig und führt in jedem Fall zur Nachberechnung des entsprechenden Nutzungsentgeltes für den Auftraggeber.

(8) Die Entgelte für externe Nutzer verstehen sich zuzüglich Umsatzsteuer.

§7 Urheberschaft / Veröffentlichung

(1) Die Inhaberschaft/Urheberschaft für die Primärdaten und deren Analyse liegt alleinig beim Nutzer, sofern keine weitergehende wissenschaftliche Zusammenarbeit mit der MS-Plattform vereinbart wurde.

(2) Sind Mitarbeiter der MS-Plattform wesentlich an der Konzeption und Durchführung von Experimenten und/oder wissenschaftlichen Analyse der Daten und damit an der Erlangung wissenschaftlicher Ergebnisse beteiligt, so sind diese entsprechend den allgemein anerkannten Regeln der guten wissenschaftlichen Praxis als Co-Autor(en) in Veröffentlichungen mit aufzunehmen. Dies gilt gleichermaßen auch für Patentanmeldungen, sofern der Beitrag eine Berücksichtigung als Erfinder rechtfertigt.

(3) Bei zu publizierenden Daten aus dem Servicebetrieb ohne einschlägige wissenschaftliche Beteiligung der MS-Plattform wird um Erwähnung der MS-Plattform in der Danksagung ("Acknowledgement") gebeten, zum Beispiel in folgender Form: "We would like to acknowledge the MS platform at the Friedrich Schiller University Jena for support in mass spectrometry".

§8 Haftung

(1) Das Servicepersonal der MS-Plattform ist bestrebt, so sorgfältig wie möglich mit den Proben umzugehen. Dennoch haften die Mitarbeiter der MS-Plattform nicht für den Verlust oder das Verwecheln der Probensubstanz (z.B. an der Abgabestelle) oder für Beschädigungen des Probenröhrchens, sofern diese nicht grob fahrlässig oder vorsätzlich herbeigeführt wurde.

(2) Für Reparaturen und Aufwendungen an Geräten der MS-Plattform, die aufgrund missbräuchlichen, eigenmächtigen oder fahrlässigen Umgangs von Nutzern mit Proben oder Geräten nötig werden, sowie solchen, die durch Missachtung der Nutzerordnung oder von Anweisungen des Personals der MS-Plattform entstehen, haftet der Nutzer, ggfs. dessen Fachvorgesetzter.


(3) Die MS-Plattform übernimmt keine Verantwortung für die Verwendung von Messdaten oder für die missbräuchliche Nutzung ihrer Einrichtungen.

§9 Gültigkeit


Die Nutzungsordnung wird von den Institutsräten der Institute IAAC und IOMC beschlossen und mit den Unterschriften der Institutsdirektoren von IAAC und IOMC sowie des Leiters der MS-Plattform und des Kanzlers der Friedrich-Schiller-Universität in Kraft gesetzt. Sie ist für alle Nutzer verbindlich und bleibt in der verabschiedeten letzten Fassung bis zu ihrem Widerruf gültig.

Jena, den 28.11.2017,


(Prof. Dr. Hans-Dieter Arndt, IOMC)


(Dr. Nico Ueberschaar, Leiter der MS-Plattform)


(Prof. Dr. Georg Pohnert, IAAC)


(Dr. Klaus Bartholmé, Kanzler der FSU)

Anhang 1: Übersicht der vorhandenen Geräte an der MS-Plattform (Stand 15.12.2017)

IAAC I

SSQ710

Single Quad-MS mit Proben Direkteinlass und EI, CI und FAB (optional) Ionisierung
(Nutzung vorwiegend für: Messung von unpolaren Reinsubstanzen, Substanz vorab-Charakterisierung)

MAT95

Hochauflösendes Sektorfeld-Gerät mit ESI, EI oder CI Ionisation.
(Nutzung vorwiegend für: Messung von polaren Reinsubstanzen, Substanz vorab-Charakterisierung)

LC-Trap

Ionenfallen-Massenspektrometer gekoppelt an eine binäre HPLC.
(Nutzung vorwiegend für: Reaktionskontrollen)

IAAC II

UHPLC-Orbitrap

Thermo Q-Exactive plus Massenspektrometer gekoppelt an ein UHPLC System mit Autosampler, 6-fach Säulenwechsler, DAD. Ionisierungsmöglichkeiten umfassen ESI, APCI oder AP-MALDI.
(Nutzung vorwiegend für: Metabolomics, besonderes komplexe Trennprobleme/Analyten)

GC-Orbitrap

Thermo Q-Exactive GC gekoppelt an einen GC-Chromatograph mit S/SL oder PTV Injektionssystem und Liquid-handling Autosampler. Ionisation ist möglich mit EI oder CI.
(Nutzung vorwiegend für: Metabolomics, besonderes komplexe Analyten)

GC-ISQ

Thermo single-quad GC-MS gekoppelt an ein GC-Chromatograph mit S/SL Injektion. Die Ionisation wird mit EI durchgeführt.
(Nutzung vorwiegend für: Einfache Quantifizierungen, Reaktionskontrollen)

IOMC I

UHPLC-QTOF

Bruker maxis impact (QTOF) gekoppelt an ein UHPLC System mit Autosampler, 2-fach Säulenwechsler und DAD. Ionisation ist ESI.

(Nutzung vorwiegend für: Substanzcharakterisierungen und Hochauflösung IOMC)

LC-Trap

Finnigan MAT Ionenfallen-Massenspektrometer gekoppelt an ein Shimadzu HPLC-System.

(Nutzung vorwiegend für: Reaktionskontrollen IOMC)

GC-QI

Agilent/HP single-quad GC-MS gekoppelt an ein GC-Chromatograph mit S/SL Injektion. Die Ionisation wird mit EI durchgeführt.

(Nutzung vorwiegend für: Reaktionskontrollen IOMC)

IOMC II

MALDI-TOF

Bruker UltraFlex III MALDI TOF/TOF.

(Nutzung vorwiegend für: Polymercharakterisierung)

HPLC-QTOF

Bruker micrOTOF Q (QTOF) gekoppelt an ein HPLC Agilent System mit Autosampler, Ionisation ist ESI.

(Nutzung vorwiegend für: Polymercharakterisierung)

Anhang 2: Ansprechpersonen

Direkte Ansprechpersonen der MS-Plattform:

Dr. Nico Ueberschaar Leiter der MS-Plattform, wissenschaftliche Beratung, Administration
Telefon: 03641 / 9 48120
E-Mail: nico.ueberschaar@uni-jena.de

Monika Heineck Technische Mitarbeiterin (Ansprechperson Hardware, Datenverarbeitung)
Telefon: 03641 / 9 48071
E-Mail: monika.heineck@uni-jena.de

Sigrid Schönau Technische Mitarbeiterin (Ansprechperson Hardware)
Telefon: 03641 / 9 48071
E-Mail: sigrid.schönau@uni-jena.de

Ansprechpersonen innerhalb der weiteren Standorte der MS-Plattform (nicht der MS-Plattform unterstellt)

Dr. Lydia Seyfahrt Wissenschaftliche Mitarbeiterin (Ansprechperson Hardware,
Datenverarbeitung)
Standort: IOMC: AG-Arndt, Lessingstraße 8
Telefon: 03641 / 9 48298
E-Mail: lydia.seyfarth@uni-jena.de

Nicole Fritz Technische Mitarbeiterin (Ansprechperson Hardware)
Standort: ZAF: AG-Schubert, Philosophenweg 7
Telefon: 03641 / 9 48575
E-Mail: nicole.fritz@uni-jena.de

Hannes Richter Technischer Mitarbeiter (Ansprechperson Hardware)
Standort: IAAC: AG-Pohnert, Lessingstraße 8
Telefon: 03641 / 9 48951
E-Mail: hannes.richter@uni-jena.de

Anhang 3: Musterformular für Probenmessung im Servicebetrieb

<input type="checkbox"/> nicht IAAC/IOMC	Messauftrag MS-Plattform	Datum: _____
AG / Professur: _____	Telefon: _____	
Vor- u. Nachname: _____	E-Mail: _____	@uni-jena.de

Probenbezeichnung: _____ <small style="display: block; text-align: center;">2 Initialen max 4 stelliges Probenkürzel</small>	eingewogene Masse / Konzentration: _____ <input type="checkbox"/> biol. Inaktivierung <input checked="" type="checkbox"/> toxisch <input checked="" type="checkbox"/> karzinogen
Temperierung: <input checked="" type="checkbox"/> RT <input type="checkbox"/> _____ °C <input type="checkbox"/> sauerstoffempfindlich:	<input type="checkbox"/> feuchtigkeitsempfindlich Kann die Probe zum Lösen mit <input checked="" type="checkbox"/> Ultraschall und / oder <input checked="" type="checkbox"/> Wärme behandelt werden?

Summenformel: _____ Wiederholeinheit (für Polymere): _____ molare Masse: _____ Löslichkeit: mindestens 0,1 mg / mL in: _____ (erlaubte Lösungsmittel siehe unten)
--

Strukturvorschlag / Fragestellung / Bemerkung / Synthesbedingungen mit Edukten und allen Reagenzien / Lösungsmitteln bei Polymeren bitte Wiederholeinheit und ggf. Mn/PDI von NMR oder SEC angeben

Reinsubstanz
 Reaktionskontrolle

chromatographische Kopplung: <input checked="" type="checkbox"/> keine <input type="checkbox"/> GC <input type="checkbox"/> LC Wenn GC oder LC bitte Begründung: _____ Bei Reaktionskontrolle und LC-MS bitte unbedingt RP-DC anfertigen und überprüfen ob Komponenten nicht eluieren.
--

Ionisation: <input checked="" type="checkbox"/> MS-Plattform soll entscheiden <input type="checkbox"/> EI <input type="checkbox"/> CI <input type="checkbox"/> ESI <input type="checkbox"/> APCI <input type="checkbox"/> MALDI

Gewünschte Auflösung: <input checked="" type="checkbox"/> < 2.000 2.000 < <input type="checkbox"/> * < 50.000 <input type="checkbox"/> * > 50.000 *Für Auflösungen > 2.000 bitte Begründung: _____ <input checked="" type="checkbox"/> MS <input type="checkbox"/> MS ² Wenn MS ² bitte Begründung: _____
--

Kann die Probe Rückstände von DMSO, DMF, ionischen Flüssigkeiten, Metallsalzen oder Proteinen enthalten? Wenn ja, welche: _____
--

Erlaubte Lösungsmittel, geeignetsten sind fett gedruckt: *(max. 50 Vol% in Mischung mit fett gedruckten) LC-ESI/APCI-MS: H₂O, ACN, MeOH, EtOH, i-Propanol, THF* GC-EI/CI-MS: DCM, Et₂O, Pentan, Hexan, CHCl₃, Aceton, Benzol, Toluol, Methanol, Pyridin ESI-Direktinjektion: MeOH, ACN, H₂O, EtOH, THF* MALDI: ACN, MeOH, i-Propanol, Aceton, Wasser, CHCl ₃ , DCM, THF	Hiermit bestätige ich die Richtigkeit meiner Angaben, Unterschrift:
--	---

Anhang 4: Nutzungsentgelte

A) Nutzungsentgelte* der MS-Plattform für Angehörige der FSU (Stand 15.12.2017):

Messart bzw. Experiment	Nutzungsentgelt (pro Messung bei 1 - 3 Proben)	Nutzungsentgelt (pro Stunde bei > 3 Proben)
Einfache ¹ Messung mit Direktinjektion und Einheitsmassenauflösung ²	2,50 €	10 €
Einfache ¹ Messung mit Direktinjektion und Hochauflösung ²	5 €	20 €
Einfache ¹ Messung mit chromatographischer Kopplung ³ und Einheitsmassenauflösung	8 €	16 €
Einfache ¹ Messung mit chromatographischer Kopplung ³ und Hochauflösung	16 €	32 €
Einfache Messung (MALDI) ⁴	5 €	10 €
Nicht-automatisierte Sondermessungen ⁵ mit Hochauflösung (≥ 10000 FWHM)	25 €	50 € max. 250 €/Tag

¹ Messung mit universellen Standard-Bedingungen im Full-Scan Mode

² Pro Messung wird mit 15 min kalkuliert.

³ Messung mit universellen Standard-Gradienten auf Standard C18 (LC) bzw. 5% Phenyl (GC) Phase im Full-Scan Mode

⁴ Pro Messung wird mit einer halben Stunde inklusive Kalibration kalkuliert

⁵ Messung mit besonderen Anforderungen an Chromatographie wie speziellen Eluenten, MSⁿ-Experimente, Zusatz von Additiven oder Optimierung an MS- oder Chromatographie-Parametern.

B) Nutzungsentgelt* der MS-Plattform für externe Auftragsmessungen (Stand 10.10.2019):

Messart bzw. Experiment	Nutzungsentgelt (pro Stunde) zzgl. Umsatzsteuer
Beratung, Vor-, Nachbereitung, Datenauswertung	87,17 €
Einfache ¹ Messung mit Direktinjektion und Einheitsmassenauflösung ²	82,69 €
Einfache ¹ Messung mit Direktinjektion und Hochauflösung ²	93,19 €
Einfache ¹ Messung mit chromatographischer Kopplung ³ und Einheitsmassenauflösung	88,99 €
Einfache ¹ Messung mit chromatographischer Kopplung ³ und Hochauflösung	105,79 €
Einfache Messung (MALDI) ⁴	87,17 €
Nicht-automatisierte Sondermessungen ⁵ mit Hochauflösung (≥ 10000 FWHM)	139,67 €

* Berechnungsgrundlage ist jeweils die Netto-Messzeit laut Log-Datei des Massenspektrometers, bei externen Auftragsmessungen zzgl. anfallender Vor- und Nachbereitungszeit sowie Beratung und Datenauswertung. Erklärung siehe Punkt A.