

Nutzerordnung

des Servicebereichs „Chemische Analytik“
an der **Abteilung Pharmazeutische & Medizinische Chemie**

des **Pharmazeutischen Instituts** der **Mathematisch-Naturwissenschaftlichen
Fakultät, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn**

Präambel

Die **Analytik chemischer Verbindungen** nimmt in der **pharmazeutischen Forschung** und Lehre einen sehr breiten Raum ein. Eine der originären Aufgaben von Pharmazeut*innen ist die Sicherung der Arzneimittelversorgung der Bevölkerung in hoher Qualität. Hier spielt neben der qualitativen Analytik auch die quantitative Analytik eine wichtige Rolle. Pharmazeut*innen werden zu Expert*innen für Analytik ausgebildet.

Die Pharmazie an der **Exzellenz-Universität Bonn** nimmt eine zentrale Rolle in den Lebenswissenschaften ein und ist in der *Transdisciplinary Research Area (TRA) Life & Health* verankert. In Forschung und Lehre ist die interdisziplinär ausgerichtete Pharmazie breit vernetzt, sowohl innerhalb der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät, als auch über Fakultätsgrenzen hinweg, v.a. mit der Medizinischen Fakultät. Das aus der Fachgruppe Pharmazie heraus gemeinsam mit Mediziner*innen gegründete **Pharma-Zentrum Bonn (PZB)**, ein Forschungszentrum für Innovative Arzneimittel und Pharmakotherapie (Pharma-Zentrum Bonn, PZB, www.pharmazentrum.uni-bonn.de) vernetzt die an Arzneimittel-Forschung interessierten Arbeitsgruppen über die Fakultätsgrenzen hinweg.

Die Abteilung für Pharmazeutische & Medizinische Chemie (Leiterin: C.E. Müller) und die Abteilung für Pharmazeutische & Zellbiologische Chemie (F. Hansen, Nachfolge M. Wiese) der Fachgruppe Pharmazie haben die chemische Großgeräte-Analytik schon **vor über 20 Jahren zentralisiert** und bieten für die gesamte Pharmazie und darüber hinaus, für das **Pharma-Zentrum Bonn** und weitere Interessenten und Kooperationspartner einen **analytischen Service** an. Dieses **Chemische Analytik-Zentrum**, in dem Hochfeld-NMR-Spektrometer, Massenspektrometer und Kapillarelektrophorese-Geräte der Fachgruppe Pharmazie zusammengeführt und betreut werden, arbeitet eng mit der Analytik-Abteilung der benachbarten Chemischen Institute zusammen. Im Bereich Massenspektrometrie sind die Schwerpunkte komplementär: Während die Chemie ihren Fokus auf **qualitative MS-Analytik** und **MS-Imaging** setzt, besitzt die Pharmazie langjährige Expertise auf dem Gebiet der **quantitativen Analytik**.

§ 1 Geltungsbereich

Diese Nutzerordnung regelt die Nutzung der Ressourcen und angebotenen Leistungen des Servicebereichs „Chemische Analytik“ an der Abteilung Pharmazeutische & Medizinische Chemie des Pharmazeutischen Instituts der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn. Die Regelung umfasst die Nutzung der bereitgestellten Geräte, der angeschlossenen Steuer- und Auswerterechner, der darauf installierten Software sowie der Laborräume und der Beratung und Anleitung durch Servicepersonal. Die Regelungen sind für alle Nutzer*innen des Servicebereichs verbindlich. Der Servicebereich steht den Arbeitsgruppen der Universität Bonn sowie externen Nutzer*innen zur Verfügung. Mit externen Einrichtungen, wie den Partnern des Pharmazentrums Bonn (PZB) werden zusätzliche Kooperationsverträge geschlossen, die detailliert die Inanspruchnahme der Leistungen regeln.

§ 2 Ausrüstung und Ansprechpartner

Die Plattform „Chemische Analytik“ der Abteilung Pharmazeutische & Medizinische Chemie besteht aus mehreren hochwertigen Analysegeräten: NMR-Spektrometern (500 und 600 MHz), Massenspektrometer (Triple-Quadrupol LC-ESI-MS; Single-Quadrupol-LC-ESI-MS; DC-MS) und mehreren Kapillarelektrophorese- (CE-) Geräten mit UV- und Fluoreszenzdetektoren.

Zum Betrieb der Geräte werden professionelles Personal und etablierte Betriebsprotokolle vorgehalten. Die vorhandenen Geräte und Anlagen der Plattform Chemische Analytik ermöglichen die präzise quantitative und qualitative Analyse einer großen Anzahl an chemischen Proben, die nach aktuellen wissenschaftlichen Richtlinien und Standards durchgeführt werden. Die Leitung des Servicebereichs liegt bei Prof. Dr. Christa E. Müller und Prof. Dr. Finn Hansen.

§ 3 Leistungen

Die angebotenen Dienstleistungen der Plattform Chemische Analytik umfassen:

1. Die qualitative NMR-Spektroskopie mit modernen 500- und 600-Spektrometern. Es können ^1H -, ^{13}C -, ^{15}N -, ^{19}F - und ^{31}P -Messungen inklusive 2D-Techniken wie NOESY, TOCSY, COSY, HSQC und HMBC durchgeführt werden. Damit ist die Strukturaufklärung von Naturstoffen und synthetischen Verbindungen, kleinen Molekülen und Verbindungen höherer Molmassen (Oligo- und Polypeptide, Oligonucleotide) möglich.
2. Qualitative und quantitative LCMS-Analysen mit den vorhandenen Systemen. Neben klassischen Analysen werden auch Analyte aus biologischen Matrices, wie Blut und Gewebe, bestimmt. Dazu gehört die professionelle Etablierung eines Extraktionsverfahrens und der geeigneten analytischen MS-Methoden, sowohl in negativen als auch in positiven MS-Modi sowie MS-MS-Analysen. LCMS-Analysen können auch für die Reinheitskontrolle und Stabilitätsbestimmung von Proben eingesetzt werden.
3. Trenn- und Nachweisverfahren mithilfe der Kapillarelektrophorese (CE) und UV- bzw. Fluoreszenz-Detektion. Mit elektronenkinetischer Injektion können geladene Analyte angereichert und anschließend schnell getrennt werden. Verschiedene Stacking-Verfahren sowie die Fluoreszenz-Detektion führen zu einer hohen Empfindlichkeit.

Die Nutzer*innen der Plattform Chemische Analytik werden sowohl technisch als auch wissenschaftlich durch Mitarbeiter*innen des Servicebereichs bei der Konzeption, Durchführung und Ergebnisanalyse beraten und unterstützt. In Einzelfällen kann nach einer Einweisung eine Art „Führerschein“ erworben werden, um anschließend die entsprechenden Geräte eigenständig zu nutzen.

§ 4 Voraussetzungen für die Nutzung

Vor der ersten Nutzung des Servicebereichs muss eine persönliche oder telefonische Besprechung der Messungen zwischen den Nutzer*innen und der Servicebereichsleiterin bzw. dem entsprechenden Ansprechpartner stattfinden. Dabei werden die experimentelle Fragestellung und sich daraus ergebende Anforderungen an das Probenmaterial für die Messung besprochen. Alle Mitglieder des Servicebereichs verpflichten sich, die Angaben des Nutzers vertraulich zu behandeln.

Die Nutzer*innen melden sich dazu selbständig bei der entsprechenden Kontaktperson, die auf der Internetseite angegeben ist. Die Nutzer*innen müssen sich vor der Nutzung der Leistung des Servicebereichs schriftlich bereit erklären, die Nutzungsordnung anzuerkennen und mit der Übernahme der entstandenen Kosten einverstanden zu sein.

§ 5 Nutzungsberechtigung und Priorisierung

Die Leistungen und Ressourcen des Servicebereichs stehen allen Arbeitsgruppen innerhalb und außerhalb der Universität Bonn zur Verfügung. Die Leistungen des Servicebereichs können in einem angemessenen Zeitraum nach Eingang der ersten Anfrage in Anspruch genommen werden. Im Falle der Auslastung der Kapazitäten des Servicebereichs werden die Anfragen folgendermaßen priorisiert:

1. Anfragen aus der Fachgruppe Pharmazie und Mitgliedern des Pharmazentrums Bonn
2. Anfragen aus der Universität Bonn
3. Externe Anfragen

Können wegen Überbuchungen nicht alle Nutzungsanfragen erfüllt werden, entscheidet die Leitung des Servicebereichs über die Zuteilung von Servicezeiten an den Geräten (und folgt dabei der oben genannten Priorisierung). In begründeten Fällen kann bestimmten Projekten durch die Leitung des Servicebereichs Vorrang eingeräumt werden.

§ 6 Benutzungszeit und Gerätebuchungen

Die Service-Messung wird durch Abgabe einer Probe mit vollständig ausgefülltem Auftragsformular in Auftrag gegeben. Die Zuordnung zu einem bestimmten Gerät, die Messzeitvergabe sowie die Durchführung der Messung erfolgt durch das Servicepersonal der einzelnen Messbereiche. Im Falle einer einseitigen Überlastung von Messgeräten können die Leiter*innen der Serviceabteilungen eine Umbelegung veranlassen, um den Gerätepool möglichst effizient zu nutzen. Der Auftrag für eine begründete Messung an einem bestimmten Gerät muss auf dem Auftragsformular explizit vermerkt werden. Eine NMR-Service-Messung in der Automation wird mit einem automatischen Probenwechsler gestartet. Die Messzeit beginnt mit dem Einsetzen der Probe in das Gerät und endet mit dem Auswurf der Probe. Bei komplizierten Messungen ist es möglich, dass Messungen vom Servicepersonal manuell durchgeführt werden.

Hierzu müssen die Nutzer*innen einen Termin mit dem Servicepersonal abstimmen. Dabei zählt als Messzeit die benötigte Zeit, in der das Gerät für andere Messungen nicht zur Verfügung steht.

Sofern alle in § 4 genannten Voraussetzungen erfüllt sind, wird den Nutzer*innen eine Nutzungszeit, z.B. für Messungen der gewünschten Proben, zugesprochen. Die Messzeit kann von den Nutzer*innen storniert werden. Diese Stornierung muss dem Servicebereich zum frühestmöglichen Zeitpunkt mitgeteilt werden. Bei kurzfristigen Stornierungen (weniger als 24 Stunden vor der Buchung) können Stornierungskosten erhoben werden. Bei unangekündigter Nichteinhaltung der Messzeiten wird die volle Nutzungsgebühr in Rechnung gestellt.

§ 7 Datenspeicherung und –bereitstellung

Der Servicebereich sichert die vertrauliche Behandlung und Speicherung der erhobenen Daten zu. Die Daten werden mind. 1 Jahr auf einem zugangsbeschränkten Server des Pharmazeutischen Instituts gespeichert. Die erhobenen Rohdaten werden mithilfe der Software des Servicebereichs in eine für alle gängigen Standardauswerteprogramme nutzbare Form gebracht. Die Auswertung der Daten erfolgt in der Regel außerhalb des Servicebereichs, kann aber auf Anfrage durch diesen beratend begleitet werden.

Der Servicebereich verpflichtet sich, den Nutzer*innen kurzfristig Zugang zu den gespeicherten Messdaten zu gewähren.

§ 8 Gebühren

Als Beteiligung an den Kosten der Gerätenutzung inklusive Verbrauchsmaterial werden Gebühren erhoben. Für alle akademischen und nicht-kommerziellen Nutzer*innen gilt eine verbindliche Gebührentabelle, deren aktuellste Version auf der Internetseite eingesehen werden kann. Für externe kommerzielle Unternehmen gelten andere Gebührensätze. Nach Klärung der experimentellen Anforderungen und deren Umfang kann eine Abschätzung der zu erwartenden Gebühren vorgenommen und den Nutzer*innen mitgeteilt werden.

§ 9 Pflichten der Nutzer*innen

Die Nutzer*innen sind verpflichtet, die Laborgeräte der Serviceabteilung sowie deren Steuer- und Auswerterechner ausschließlich nach vorheriger Einweisung und anhand der erlernten Bedienungsvorgaben in Gebrauch zu nehmen.

Der Arbeitsplatz ist einwandfrei zu hinterlassen. Vorhersehbare Beeinträchtigungen des Laborbetriebes sind zu unterlassen. Darüber hinaus sind Handlungen zu vermeiden, die zu Schäden an der Infrastruktur führen oder andere Nutzer*innen in ihrer Tätigkeit beeinträchtigen können. Sollte ein Gerät oder Arbeitsplatz stark verschmutzt hinterlassen werden, wird die zum Reinigen benötigte Zeit zum Servicetarif in Rechnung gestellt. Sollte dies trotz entsprechender Mahnung wiederholt vorkommen, wird dem Nutzer/der Nutzerin die Messerlaubnis entzogen.

Es gelten die allgemeinen Sicherheitsvorschriften für Arbeiten in Laboratorien. Im Fall einer Veröffentlichung von Ergebnissen, die durch maßgebliche Beteiligung des Servicebereichs erzielt wurden, ist dessen Beitrag kenntlich zu machen. Die Nutzer*innen verpflichtet sich, der Leitung des Servicebereiches auf Anfrage

Publikationen anzugeben, in denen Daten enthalten sind, die mit Unterstützung des Servicebereiches generiert wurden.

Bei Inanspruchnahme der Ressourcen des Servicebereiches sind die „Empfehlungen der DFG zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis“ (https://www.dfg.de/foerderung/grundlagen_rahmenbedingungen/gwp/index.html) einzuhalten.

§ 10 Haftung

Der Servicebereich übernimmt keine Gewähr dafür, den speziellen Anforderungen der Nutzer in vollem Umfang gerecht werden zu können. Er übernimmt auch keine Gewähr dafür, dass die Ressourcen jederzeit fehlerfrei und ohne Unterbrechung nutzbar sind oder dass die gewonnenen Daten fehlerfrei und dauerhaft gesichert werden.

Der Servicebereich unterstützt seine Nutzer*innen bei Bedarf und im Rahmen der Kapazitäten bei der Interpretation der Messdaten. Die Verantwortung für die Interpretation bleibt jedoch bei den Nutzer*innen.

Der Servicebereich haftet nicht für Schäden, die den Nutzer*innen durch die Inanspruchnahme der Leistungen entstehen. Davon ausgenommen sind Schäden an Leib und Leben, die seitens des Servicebereichs vorsätzlich oder grob fahrlässig verursacht wurden.

Anlage

Preisliste für Arbeitsgruppen der Universität Bonn und für Arbeitsgruppen externer Einrichtungen

Für die Nutzung der Geräte und Serviceleistungen werden die unten aufgelisteten Gebühren erhoben. Die dargestellten Grundpreise enthalten anteilige Personalkosten sowie typisches Verbrauchsmaterial.

Es wird darauf hingewiesen, dass die Nutzungsgebühren regelmäßig evaluiert werden und entsprechend angepasst werden können. Sämtliche Betriebs-, Wartungs- und Reparaturkosten der Serviceeinheiten werden von den Nutzer*innen aus den Instituten bzw. Abteilungen der Fachgruppe Pharmazie getragen. Die Verteilung der für den Betrieb der Serviceeinheiten anfallenden Kosten zwischen den Instituten und Abteilungen der Fachgruppe Pharmazie wird innerhalb der Fachgruppe Pharmazie geregelt. Die Einteilung der Nutzergruppen berücksichtigt die Eigenbeiträge von aktuellen und ehemaligen Arbeitsgruppen der Fachgruppe Pharmazie bei der Erstanschaffung eines Gerätes. Jede registrierte Arbeitsgruppe erhält regelmäßig (mindestens jährlich) eine Zusammenstellung der Messungen/Nutzungszeiten und der daraus resultierenden Kosten. Die Zustellung erfolgt an die zuständigen Leiter*innen der Arbeitsgruppen.

Für die Nutzung der der Geräte der Plattform chemische Analytik gelten ab 01.07.2021 folgende Gebühren:

1. Abteilung NMR

NMR-Preise pro Probe:

für Mitglieder der Fachgruppe Pharmazie:

die erste Stunde: **25 €**

jede weitere angefangene Stunde: **5 €**

für externe Arbeitsgruppen:

nach Absprache

Komplexe NMR-Experimente erfordern deutlich mehr Aufwand, sowie ggf. wissenschaftliche Unterstützung bei der Vorbereitung, Durchführung und Datenprozessierung und können daher mit höheren Stundensätzen bis zu 40 Euro berechnet werden. Preisanfragen für Spezialmessungen sollen daher bitte vorab erfolgen.

2. Abteilung LCMS

für Mitglieder der Fachgruppe Pharmazie:

LC-ESI-MS: SQ-Messungen an der LC/MSD **24 €/h**

Das entspricht einem Preis von 6 bis 12 € pro Messung im Standardbetrieb

QTRAP: **35 €/h**, sowie nach Absprache

Advion Expression cms: **3 €** pro Messung im Selbstmessbetrieb

für externe Arbeitsgruppen:

auf Absprache

3. Abteilung Kapillarelektrophorese

Berechnung der Kosten auf Anfrage