

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

§1 Allgemeines

Die NMR-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 NMR-spektroskopischer 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.nmr.uni-jena.de>). Wissenschaftliche und technische Ansprechpersonen sind in Anhang 2 benannt.

§2 Durchführung von Messungen

- (1) Für die Aufnahme von **Routine-NMR-Spektren** (^1H , ^{13}C , einfache 2D-Korrelationen) gängiger Verbindungen stehen **ausgewiesene Selbstmessgeräte** rund um die Uhr zur Verfügung. Diese sind für die erste Charakterisierung und Reinheitsüberprüfung bevorzugt zu nutzen. Zur Auswertung steht geeignete Software zur Verfügung. Interessierte Nutzer werden durch den Leiter der NMR-Plattform oder einen von ihm autorisierten Mitarbeiter in die Bedienung der Geräte eingewiesen, erhalten eine Nutzerkennung (i.d.R. Arbeitsgruppen-gebunden) und bestätigen diese Einweisung mit ihrer Unterschrift. Die Autorisierung ist personengebunden, nicht übertragbar und kann jederzeit vom Leiter der NMR-Plattform widerrufen werden.
- (2) Mit der Registrierung als Nutzer der Abteilung kommt ein Messauftrag zustande (siehe §6). Für Messungen im Selbstmessbetrieb ist das Ausfüllen eines Messauftrages nicht nötig, jedoch gelten die gleichen Anforderungen an die Probenbeschaffenheit und Probenkennung wie im Service-Betrieb (s.u.).
- (3) In wissenschaftlich begründeten Einzelfällen können sehr erfahrene Nutzer auch zum selbständigen Messen an anderen NMR-Geräten mit höherer Feldstärke oder abweichender Konfiguration nach einem vom Leiter der Plattform durchgeführten Training autorisiert werden.
- (4) Im **Service-Betrieb** werden NMR-Messungen im Auftrag durchgeführt. Die Bedienung und die Wahl der für die Untersuchung geeigneten Geräte erfolgt dabei grundsätzlich durch Mitarbeiter der NMR-Plattform (siehe §3). Die Nutzer hinterlegen dazu die zu messenden Proben nach Ausfüllen des Auftragsformulars auf der Webseite (<http://www.nmr.uni-jena.de>) an der Annahmestelle und achten auf das Einhalten der Probenkriterien, welche auf dem Formular ausgeführt sind (siehe Anhang 3). Ein Strukturvorschlag ist mit jeder Probe einzureichen.
- (5) Messaufträge von explosiven, selbstentzündlichen oder anderweitig gefährdenden Stoffen sind der NMR-Plattform im Vorfeld eindeutig anzuzeigen. Dies gilt insbesondere für Stoffe, die besondere Schutzmaßnahmen bei einer etwaigen Beschädigung des Probenröhrchens erfordern. Radioaktive Proben können nur nach spezifischer Freigabe durch den Strahlenschutzbevollmächtigten der FSU Jena vermessen werden.
- (6) Nicht den Kriterien entsprechende Proben werden nicht gemessen und wieder zur Abholung bereitgestellt. Die NMR-Plattform kann eine Messung auch wegen technischer Bedenken sowie aus Sicherheitsgründen ablehnen.
- (7) 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 an der dafür vorgesehenen Stelle hinterlegt und dort zeitnah wieder vom Nutzer abgeholt. Die Messdaten sind über das abteilungseigene LIMS zugänglich (siehe §5).

(8) 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 NMR-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 können die Nutzer einen Termin vereinbaren, sie werden zu diesem Zeitpunkt priorisiert behandelt. Terminänderungen müssen spätestens am vorausgehenden Werktag mitgeteilt werden. Wird diese Frist nicht eingehalten, so kann die NMR-Plattform für die reservierte Messzeit ein Nutzungsentgelt erheben (§6).

§4 Qualität der Messungen

(1) Das Servicepersonal der NMR-Plattform führt regelmäßig Qualitätskontrollen mit dedizierten Standardproben an allen Spektrometern durch. Die Abteilung optimiert experimentelle und technische Parameter, um eine gleichbleibend hohe Qualität der NMR-Messungen zu gewährleisten.

(2) Die Mitarbeiter der NMR-Plattform beraten die Nutzer bei der Probenoptimierung. Für eine möglicherweise abweichende Qualität der Messdaten, die aus der individuellen Probenbeschaffenheit resultiert, ist die NMR-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 auf den abteilungseigenen Server der Plattform und an das Rechenzentrum der FSU übertragen und so für den zugangsgeschützten Abruf durch die Nutzer bereitgestellt. Die vertraulichen Zugangsdaten erhalten die Nutzer auf Anfrage bei der NMR-Plattform.

(2) Die Nutzer werden darauf hingewiesen, dass Primärdaten für Veröffentlichungen nach den allgemein bekannten Vorgaben der DFG mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden müssen. Dies erfolgt aktuell durch die NMR-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 NMR 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 automatisierten Selbstmessbetrieb gelten reduzierte Sätze (siehe Anhang 4).

(5) Angehörige der FSU, die die NMR-Plattform regelmäßig in erheblichem Umfang beanspruchen, können die Aufnahme in den Betreiberkreis der NMR-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 NMR-Plattform getroffen wurde. Hier wird unabhängig von der Anzahl der durchgeführten Experimente und der genutzten Geräteklasse/Feldstärke ein Entgelt erhoben, das durch eine Vollkostenrechnung ermittelt 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 NMR-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 NMR-Plattform vereinbart wurde.

(2) Sind Mitarbeiter der NMR-Plattform wesentlich an der Konzeption und Durchführung von Experimenten und/oder der 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 NMR-Plattform wird um Erwähnung der NMR-Plattform in der Danksagung („Acknowledgement“) gebeten, zum Beispiel in folgender Form: "We would like to acknowledge the NMR platform at the Friedrich Schiller University Jena for support in NMR spectroscopy". Die korrekte Zitierung der genutzten Spektrometer und (wo zutreffend) der Drittmittelförderung ist jeweils auf der entsprechenden Geräteseite angegeben (<https://nmr.uni-jena.de/de/spektrometer.php>).

§8 Haftung

(1) Das Servicepersonal der NMR-Plattform ist bestrebt, so sorgfältig wie möglich mit den Proben umzugehen. Dennoch haften die Mitarbeiter der NMR-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 NMR-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 NMR-Plattform entstehen, haftet der Nutzer, ggfs. dessen Fachvorgesetzter.

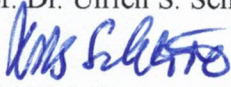
(3) Die NMR-Plattform übernimmt keine Verantwortung für die Verwendung von Messdaten oder für die missbräuchliche Nutzung ihrer Einrichtungen.

§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 NMR-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 15.12.2025,


(Prof. Dr. Ulrich S. Schubert, IOMC)


(Dr. Nils Schlörer, Leiter der NMR-Plattform)


(Prof. Dr. Birgit Weber, IAAC)


(Dr. Thoralf Held - Kanzler der FSU)

Anhang 1: Übersicht der vorhandenen Geräte an der NMR-Plattform (Stand 15.12.2025)

• Standort IAAC (Humboldtstraße 8, Raum K010)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung ¹	Selbstmessgerät
400 MHz	Avance I	BBO, z-Gradient	+25°C bis +60°C	Nein
400 MHz	Avance III	BBO, z-Gradient, ATM	-40°C bis +60°C	Nein
600 MHz	Avance III	CPTCI, z-Gradient, ATM BBO, z-Gradient, ATM QXI, xyz-Gradient, ATM	0°C bis +60°C -40°C bis +60°C -40°C bis +60°C	Nein
800 MHz	Avance NEO	CPTCI, z-Gradient, ATM	0°C bis +60°C	Nein

• Standort IOMC 1 (Humboldtstraße 10, Raum K005B & K006)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung ¹	Selbstmessgerät
250 MHz	Avance I	BBO, z-Gradient	+20°C bis +60°C	Nein
300 MHz	Avance NEO	BBFO, z-Gradient, ATM	-	Ja
500 MHz	Avance NEO	BBFO Prodigy, ATM Diff50, DOSY probe TBI H-C-BB, z-Gradient	-40°C bis +60°C -40°C bis +60°C -40°C bis +60°C	Nein

• Standort IOMC 2 (ZAF, Philosophenweg 7, Raum 109)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung ¹	Selbstmessgerät
300 MHz	Avance I	Dual 1H/13C, z-Gradient	-	Ja
300 MHz	Avance NEO	BBFO, z-Gradient, ATM	-	Ja
400 MHz ²	Avance III	4 mm 1H/X-MAS	-	Nein

• Standort IOMC 3 (CEEC, Philosophenweg 7a, Raum K001)

Feldstärke	Konsole	Probenkopf	Temperierung ¹	Selbstmessgerät
500 MHz ²	Avance III HD	4 mm 1H/13C HR-MAS z- Gr.	0°C bis +60°C	Nein

¹ Der angegebene Bereich bezieht sich auf den automatisierten Routine-Messbetrieb. In Sonderexperimenten sind ggf. auch tiefere und/oder höhere Temperaturen möglich.

² MAS und HR-MAS-Messungen stehen aufgrund der zeitintensiven Probenvorbereitung nicht für den Routine-Messbetrieb zur Verfügung. Weitere Informationen zu möglichen Sonderexperimenten erfragen Sie bitte beim NMR-Personal.

Anhang 2: Ansprechpersonen

Dr. Nils Schlörer	Leiter der NMR-Plattform, Hardware, wissenschaftliche Beratung, Lehre, Administration Telefon: 03641/9-48253 eMail: nils.schloerer@uni-jena.de
Dr. Dolores Díaz	Wissenschaftliche Beratung, Ansprechperson Datenverarbeitung, Software, NMR-Experimente Telefon: 03641/9-48258 eMail: maria.dolores.diaz.hernandez@uni-jena.de
Bärbel Rambach	Technische Ansprechperson Messung, Standorte IAAC & IOMC Telefon: 03641/9-48141 eMail: baerbel.rambach@uni-jena.de
Rica Patzschke	Technische Ansprechperson Messung, Standorte IOMC & IAAC Telefon: 03641/9-48248 eMail: rica.patzschke@uni-jena.de
Leon Lange	Technische Ansprechperson Messung, Standorte IOMC & ZAF/CEEC Telefon: 03641/9-48258 eMail: leon.xavier.lange@uni-jena.de

Anhang 3: Musterformular für Probenmessung im Servicebetrieb

NMR-Plattform, Messauftrag

Name _____

Arbeitsgruppe/Professur _____ Pos.-Nr. (Wechsler) _____

Probenbez. (Sample I.D.) _____

Datum (Date) _____ Telefon _____

Lösungsmittel (Solvent)

Chloroform-d

Aceton-d6

Benzol-d6

DMSO-d6

D₂O

Methanol-d4

Andere (other): _____

Strukturvorschlag (Proposed structure)

Einwaage (mg): _____ ¹H-NMR ¹³C-NMR

Summenformel: _____ Standardspektrum Standardspektrum

Temperierung: _____ Lösungsmittelunterdr. APT

RT _____ °C (solvent suppression)

1D sel. NOE DEPT

Lange Relaxationszeit

(long relaxation delay)

2D-Experimente

COSY

NOESY

HSQC

HMBC

Sonstige Experimente (other type of exp.)

○

Name _____

Arbeitsgruppe _____

Probenname _____

Lösungsmittel _____

Pos.Nr. _____

Andere Kerne (bitte spezifizieren)
(Other nuclei: Please specify) _____

Besondere Probenbehandlung
(Special care for sample?) _____

NMR-Röhrchen müssen mindestens 18 cm und dürfen höchstens 24 cm lang sein. Die Füllhöhe sollte exakt 4 cm betragen. Proben, die besondere Schutzmaßnahmen bei einer etwaigen Beschädigung des Röhrchens erfordern oder die explosiv, bzw. selbstentzündlich sind, müssen vorher angemeldet werden. Nicht mit uns abgesprochene Auftragsmessungen unter AG-Accounts sind untersagt. Nach Abschluss der Messung finden Sie die Daten auf unserem Server. Mit Erteilung des Messauftrages bestätigen Sie die Anerkennung der geltenden NMR-Nutzerordnung. Weitere Informationen finden Sie unter www.nmr.uni-jena.de

Anhang 4.

A) Nutzungsentgelte* der NMR-Plattform für Angehörige der FSU (Stand 15.12.2025):

Messart bzw. Experiment	Nutzungsentgelt (pro Stunde) ¹
Einfache Messung im Selbstmessbetrieb bei niedriger Feldstärke (300 MHz)	10 EUR
Routinemessung durch Mitarbeiter bei mittlerer Feldstärke (400 MHz)	15 EUR
Routinemessung durch Mitarbeiter bei hoher Feldstärke mit Kryosonde (500 bzw. 600 MHz)	20, bzw. 25 EUR
Sondermessungen durch Mitarbeiter bei hoher Feldstärke (≥ 500 MHz) oder Festkörper-Proben	30 EUR, max. 300 EUR/Tag

¹ Der jeweilige Stundensatz ist als Mindestpauschale auch bei kürzerer Messzeit gültig

B) Nutzungsentgelt* der NMR-Plattform, externe Auftragsmessungen (Stand 15.12.2025):

139,- EUR pro Stunde, zzgl. Umsatzsteuer.

* Berechnungsgrundlage ist jeweils die Netto-Messzeit laut Log-Datei des NMR-Spektrometers, bei externen Auftragsmessungen zzgl. anfallender Vor- und Nachbereitungszeit sowie Beratung.