

Nutzungsordnung

für das Gerätezentrum

Zentrum für Massenspektrometrie (CMS)

der Fakultät Chemie und Chemische Biologie der TU Dortmund

1 Allgemeines

Diese Nutzungsordnung ist für alle Nutzenden des CMS verbindlich und regelt die Nutzung der Geräte des massenspektrometrischen Zentrums (Anlage 1). Vorrangig ist die Nutzung durch Mitarbeitende der CCB vorgesehen (interne Nutzende), sollte die Auslastung der Geräte und des Personals es zulassen, können auch andere Arbeitsgruppen der TU Dortmund, sowie von anderen Universitäten und akademischen Forschungseinrichtungen (externe Nutzende) berücksichtigt werden. Die Nutzung durch nicht-akademische Einrichtungen/Industrie ist immer mit der Leitung des Gerätezentrums vorab zu klären. Aufgabe des CMS ist es, WissenschaftlerInnen in die massenspektrometrischen Techniken einzuweisen (Theorie und Praxis), Fragestellungen zur Massenspektrometrie zu beantworten sowie in ihren Experimenten mit massenspektrometrischen Techniken zu unterstützen. Alle Nutzenden sind verpflichtet diese Nutzungsordnung sowie die Grundsätze zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis der TU Dortmund und DFG (in der jeweils aktuellen Fassung) anzuerkennen.

2 Aufgaben des CMS

Die Aufgabe des CMS ist es Gerätezeiten zur Verfügung zu stellen, Service-Messungen für interne und externe Nutzende durchzuführen, massenspektrometrische Methoden mit den Nutzenden zu entwickeln sowie sich an Forschungsprojekten mit Dienstleistungen zu beteiligen.

3 Geräte des CMS

Die Ausstattung des CMS ist in Anlage 1 aufgeführt.

4 Personal

Das CMS wird von Dr. Sebastian Zühlke geleitet, die MitarbeiterInnen sind in Anlage 2 genannt. Die MitarbeiterInnen sind für den Betrieb und die Wartung der Geräte verantwortlich und stehen den Nutzenden grundsätzlich für Beratung in Theorie und Praxis zur Verfügung. Die MitarbeiterInnen übernehmen den Servicebetrieb und unterstützen den Anwendungsbetrieb der Geräte.

5 Kosten der Nutzung

Die Leistungen des CMS sind grundsätzlich kostenpflichtig. Die Nutzungskosten orientieren sich an den Hinweisen zur Gerätenutzungskosten der DFG (Vordruck 55.04 in der aktuellen Version) und können in Drittmittelanträgen beantragt werden.

Das Zentrum unterstützt die Arbeitsgruppen der Fakultät bei der Beantragung der Nutzungskosten. Die Kosten unterscheiden sich zwischen dem Anwendungs- und Servicebetrieb und sind in Anlage 3 aufgeführt. Es erfolgt eine Rechnungsstellung anhand der gebuchten Stunden, die Abrechnung erfolgt halbjährlich anhand des Buchungsplans in der Geräteplattform *Clustermarket*. In Ausnahmefällen, z.B. zur Vorbereitung von Forschungsanträgen oder als Mit Antragsteller bei der Großgerätebeschaffung, können Gerätezeiten in begrenztem Rahmen vergünstigt zur Verfügung gestellt werden. Die Entscheidung über diese gesonderten Betriebszeiten trifft die Leitung des Gerätezentrums in Absprache mit den jeweiligen Projektleitungen. Für reine Servicemessungen ohne wissenschaftliche Kooperation sowie für Messungen für nicht-akademische Einrichtungen erfolgt die Kalkulation nach dem Vollkostenmodell der TU Dortmund und wird auf Anfrage mitgeteilt.

6 Registrierung als Nutzende

Jeder Nutzende muss vor der ersten Nutzung eines Gerätes der Core Facility ein Registrierungsformular ausfüllen, das allgemeine Personen- und Projektbezogene Daten erfragt. Zudem muss die verantwortliche Projektleitung, dessen Kostenstelle durch die anfallenden Nutzungsgebühren belastet wird, dieses Registrierungsformular ausfüllen und unterzeichnen. Die Vertraulichkeit dieser Daten wird hierbei gewährleistet. Das Registrierungsformular wird nach Anfrage versendet.

7 Messungen im Servicebetrieb

Es erfolgt eine Probenpräparation durch die Nutzenden unter Anleitung und Vorgaben der Mitarbeitenden des CMS. Messungen an den Geräten werden grundsätzlich von den Mitarbeitenden des CMS durchgeführt.

8 Messungen im Anwendungsbetrieb

Die Leitung des CMS kann darüber entscheiden, welche Anlagen in welchem Umfang für den Anwendungsbetrieb zur Verfügung stehen und welche Nutzenden dafür ausreichend eingewiesen/geeignet sind. In diesem Fall ist vorab eine ausführliche Einweisung durch das dafür zuständige Personal des CMS durchzuführen. Die erfolgreiche Einweisung ist durch die Leitung des CMS schriftlich zu dokumentieren. Eine Nutzung durch unautorisierte Personen ist ausgeschlossen.

Für jede Nutzenden-Organisationseinheit sollte nur eine fachkundige Person die Einweisung in die Gerätenutzung und Auswertung der Daten erhalten, eine Teilnahme an der Sicherheitsbelehrung des CMS ist dann verpflichtend.

9 Haftung

Sollten durch falsche Bedienung Schäden entstehen, sind die Nutzenden bzw. ihre jeweilige Organisationseinheit verantwortlich. Die anfallenden Reparaturkosten sind durch diese Organisationseinheit zu übernehmen. Die Leitung des CMS ist berechtigt Nutzenden in besonders zu begründenden Fällen den Anwendungsbetrieb und bei unrichtigen Angaben über die Probenzusammensetzungen den Servicebetrieb zu untersagen.

10 Organisation der Nutzungszeiten

Die zeitliche Reihenfolge der Nutzung erfolgt generell nach dem Zeitpunkt der Nutzungsanfrage, z.B. elektronische Übermittlung des Auftragsscheins, Buchung im elektronischen Gerätemanagementsystem *Clustermarket*. Sollte es wegen Überlastung/Geräteausfall etc. zu Konflikten kommen, entscheidet die Leitung des CMS über eine Priorisierung. Die Aufträge sollen hierbei vorrangig nach Dringlichkeit der Analysen oder Erfordernissen im Betriebsablauf erfolgen.

Nutzende und die Leitung von deren/dessen Organisationseinheit stimmen dieser Nutzungsordnung im Falle einer Inanspruchnahme des Service- und/oder Anwendungsbetriebes zu (siehe 6 Registrierung). Diese Nutzungsordnung kann über das intranet/internet eingesehen werden. Vor der erstmaligen Nutzung stimmen sich die Nutzenden und die Leitung des CMS über den Umfang der Leistung sowie gegenseitige Rechte und Pflichten (insbesondere bei möglichen Gefahren durch die Proben und korrekte Nutzung des Buchungs-/Abrechnungssystems) ab.

Einzelne Geräte können in begrenztem Umfang in das Gerätezentrum integriert werden, wenn ein Teil der Gerätenutzungszeit zur Erfüllung der Projektaufgaben in der beschaffenden Arbeitsgruppe verbleibt. Für diese teilintegrierten Geräte können besondere Buchungsregeln gelten, welche mit der beschaffenden Arbeitsgruppe abgesprochen werden. Das Gerätezentrum beteiligt sich in diesem Fall nur mit dem prozentualen Anteil der abgerechneten Buchungsstunden an den Kosten für Reparatur, Wartung und sonstigen Betriebsmitteln. Die beschaffende Arbeitsgruppe kann und sollte auch für die eigenen Geräte Drittmittel beantragen und mit dem Gerätezentrum abrechnen. Die Anerkennung der Nutzungsordnung bleibt erforderlich.

11 Datensicherung und -publikation

Die durch das CMS erzeugten Rohdaten werden auf den jeweiligen Messrechnern lokal gespeichert und verbleiben in Abhängigkeit der Speicherkapazität dort. Eine zusätzliche Speicherung erfolgt auf einem NAS (Standort TU Dortmund) und werden dort für 10 Jahre verfügbar sein (längerer Zeitraum muss von den Nutzenden entsprechend den Projektanforderungen mitgeteilt werden). Die Nutzenden sind verpflichtet die Rohdaten und aufgearbeiteten Spektren/Chromatogramme separat in ihren Organisationseinheiten zu sichern.

Autorin oder Autor eine Publikation ist, wer einen genuinen, nachvollziehbaren Beitrag zum Inhalt einer wissenschaftlichen Text-, Daten- oder Softwarepublikation geleistet hat. Alle AutorInnen stimmen der finalen Fassung des Werks, das publiziert werden soll, zu. Reicht ein Beitrag nicht aus, um eine Autorschaft zu rechtfertigen, ist diese Unterstützung im *Acknowledgement* angemessen zu erwähnen (Personen, Einrichtung). Die Grundsätze der guten wissenschaftlichen Praxis sind einzuhalten ([kodex-gwp-data.pdf \(dfg.de\)](#)).

12 Ausschluss von Gewährleistungsansprüchen

Das CMS übernimmt keine Gewähr dafür, dass die Anforderungen der Nutzenden immer erfüllt werden können. Ebenso wird keine Gewähr dafür übernommen, dass die Geräte/Ressourcen/Datenverarbeitungssysteme jederzeit fehlerfrei und ohne Unterbrechung nutzbar sind und die Daten jederzeit und dauerhaft gesichert sind. Alle Leistungen werden sachgerecht und nach aktuellem Stand der Technik/Wissenschaft ausgeführt, eine Garantie für den Forschungserfolg oder eine Verwertbarkeit der

Ergebnisse besteht nicht. Die Ergebnisse und damit im Zusammenhang stehende Zusatzinformationen werden vollständig und richtig vom CMS an die Nutzenden übermittelt.

13 Datenschutz

Das CMS und die Nutzenden sind verpflichtet, die datenschutzrechtlichen Vorschriften, insbesondere die Datenschutz-Grundverordnung, einzuhalten. Im Zuge der Nutzung von Leistungen des CMS kann es zur Verarbeitung, Übermittlung und Speicherung personenbezogener Daten kommen, dies erfolgt streng auf Grundlage der gesetzlichen Datenschutzregeln. Sollten Nutzende mit der Verarbeitung/Speicherung personenbezogener Daten nicht einverstanden sein, ist dies dem Gerätezentrum ausdrücklich mitteilen.

Diese Nutzungsordnung tritt am 1.1.2025 in Kraft und ist durch die Leitung des CMS und der/n Vorsitzenden des „steering committee CMS“ der Fakultät für Chemie und Chemische Biologie zu unterzeichnen.

Dr. Zühlke, Leiter CMS

Leiter des steering committee CMS

Anlage 1 – Geräteliste

Stand 30.08.2024

OrbitrapXL Massenspektrometer mit ESI und APCI-Ionenquelle (Thermo Scientific), gekoppelt mit einer 1260 HPLC-Anlage (Agilent)

SMALDI-qExactive (Orbitrap) HR-MSI-System (TranMIT, Thermo Scientific)

compact TOF-Massenspektrometer (Bruker) mit Infinity II HPLC (Agilent), ESI- und APCI-Ionenquelle

Trace GCMS-System (Thermo Scientific)

GC-MSD 8890/5977 (Agilent); nur teilweise Integration ins CMS

timsTOF Pro Massenspektrometer (Bruker) mit Infinity II HPLC (Agilent), ESI- und Cryo-Ionenquelle; nur teilweise Integration ins CMS

ESI-triplequadrupole MS (Shimadzu 8030), gekoppelt mit HPLC-PDA-Fluoreszenz (Shimadzu)

HPLC-PDA-Anlage (Shimadzu) zur chiralen chromatographischen Trennung

Anlage 2 - Personalliste

Stand 30.08.2024

Wissenschaftliche Leitung

Dr. Sebastian Zühlke (Diplom-Lebensmittelchemiker, Akad. Oberrat)

Wissenschaftliches Personal

Daniel Skoczowsky (MSc. Chemie, Doktorand)

Technische Assistenz

Eva Sandbothe (Chemielaborantin)

Laura Schneider (Chemielaborantin)

Lena Hafner (Chemielaborantin)

Jens Warmers (Chemielaborant)

Die aktuelle Personalliste ist auf der homepage des CMS zu finden unter:

<https://ccb.tu-dortmund.de/en/departement/cf/cms/team/>

Anlage 3 - Kosten

Stand 30.08.2024

Geräteklasse III:

HPLC-HRMS (Orbitrap, TOF oder timsTOF) und MALDI-MSI (q-Exactive)

Anwendungsbetrieb: intern/extern: bis zu 40€/h

Servicebetrieb: intern/extern: bis zu 70-100€/h

Geräteklasse II:

GC-MS (trace GC-MS, GC-MSD) und HPLC-triplequad-MS (Shimadzu 8030)

Anwendungsbetrieb: intern/extern: bis zu 20€/h

Servicebetrieb: intern/extern: bis zu 40-60€/h

Geräteklasse I:

chirale Trennung (NP/PR-HPLC-PDA)

Anwendungsbetrieb: intern/extern: bis zu 10€/h

Servicebetrieb: intern/extern: bis zu 20-30€/h

Für nicht-akademische Einrichtungen/Industrie erfolgt die Kalkulation nach dem Vollkostenmodell der TU Dortmund und wird auf Anfrage mitgeteilt.

Anlage 4 – steering committee

Stand 18.09.2024

Mitglieder:

Geschäftsführer CCB oder Dekan CCB, mindestens drei Hochschullehrer mit Bezug zum Gerätezentrum

stimmberechtigte Mitglieder:

Prof. Dr. Stefan Kast (Dekan, Vorsitzender steering committee)

Prof. Dr. Hannes Mutschler

Prof. Dr. Guido Clever

Prof. Dr. Boris Pfander

beratende Mitglieder:

Dr. Sebastian Zühlke (Leiter des Gerätezentrums CMS)

Dr. Markus Schürmann (Geschäftsführer CCB)