

Benutzerordnung Zentrale Analytik Chemie (ZAC)

1. Gegenstand

Die *Zentrale Analytik Chemie* (ZAC) führt im Auftrag der *Nutzer/innen* analytische Messungen durch.

Interne Nutzer/innen sind Universitätsangehörige, die analytische Dienstleistungen des Departments Chemie (DC) in Anspruch nehmen. *Externe Nutzer/innen* sind alle sonstigen Personen, die analytische Dienstleistungen des DC in Anspruch nehmen.

Diese Benutzerordnung ist für alle Nutzer/innen verbindlich.

2. Verantwortliche Ansprechpersonen

Die ZAC wird vertreten durch den Geschäftsführenden Leiter des DC und durch die wissenschaftlichen Leiter.

Geschäftsführender Leiter DC:

Prof. Dr. Jürgen Gauß

Wissenschaftliche Leiter:

Bereich	Abkürzung	Leiter
Massenspektrometrie	MS	Dr. Christopher Kampf Dr. Mihail Mondeshki
Flüssig-NMR-Spektroskopie	NMR	Dr. Johannes Liermann Dr. Mihail Mondeshki
Elementaranalyse	CHN	Dr. Johannes Liermann
Festkörper-NMR-Spektroskopie	MAS	Dr. Mihail Mondeshki
Einkristallstrukturanalyse	X-Ray	Dr. Dieter Schollmeyer

Die wissenschaftlichen Leiter sind auch technische Ansprechpartner. Die Kontaktdaten der Abteilungen sind im Intranet unter <https://www.chemie.uni-mainz.de/zac> und im Internet unter <https://www.analytik.chemie.uni-mainz.de/> zu finden.

3. Voraussetzungen für die Messung

Sofern Geräte für die direkte Benutzung durch die Nutzer/innen selbst vorgesehen sind (Open Access), setzt jede Messung voraus, dass der jeweilige Nutzer/die jeweilige Nutzerin eine Einweisung in die Durchführung der Messung sowie relevante Sicherheitsaspekte erhalten hat.

Weitere Voraussetzung für die Messung einer Probe ist, dass sie sachgemäß nach den aktuell gültigen Vorgaben auf der Intranetseite der ZAC präpariert wurde. Jede Probe ist eindeutig zu

beschriften (bei NMR-Proben unter Verwendung der standardisierten Begleitzettel), so dass jederzeit die eindeutige Identifikation der Probe möglich ist. Wo Vorlagen zur Verfügung gestellt werden, sind ausschließlich diese zu nutzen.

Darüber hinaus ist Proben für Servicemessungen ein vollständiger Auftrag in Papier- oder elektronischer Form beizufügen, aus dem die notwendigen Probeneigenschaften, die gewünschten Methoden sowie das Abrechnungsziel eindeutig hervorgehen. Auch hierfür sind ausschließlich die zur Verfügung gestellten Vorlagen zu verwenden. Bei Open-Access-Diensten kann es vereinfachte Regelungen geben, die entsprechend kommuniziert werden.

Für alle Proben, die nicht in Open-Access-Diensten gemessen werden, steht in Raum 2224.00.116 eine zentrale Probenabgabestelle zur Verfügung. Die Probenabgabe für X-Ray erfolgt nach telefonischer Vereinbarung direkt an die Mitglieder der Abteilung, die eine erste visuelle Begutachtung vornehmen. Ist dabei schon erkennbar, dass eine Messung nicht möglich ist, kann die Annahme der Probe abgelehnt werden.

Durch die Abgabe von Aufträgen bestätigen die Nutzer/innen, dass eine Einwilligung des/der jeweiligen Kostenstellenbeauftragten vorliegt.

Bei Fragen und Unklarheiten sollte vor Auftragserteilung Kontakt zum technischen Personal der ZAC aufgenommen werden.

4. Durchführung der Messungen

Die für den Messbetrieb zur Verfügung stehenden analytischen Großgeräte sind in Anhang 1 aufgeführt.

Grundsätzlich werden die Proben in der Reihenfolge des Eingangs vermessen. Folgende Messaufträge werden bevorzugt bearbeitet:

- Eilige Messaufträge, wenn vor der Probenabgabe eine privilegierte Bearbeitung der Probe mit der ZAC vereinbart wurde
- Messaufträge mit geringem Zeitaufwand

Wenn für einen Messauftrag eine sehr lange Messzeit erforderlich ist, kann die Probe zurückgestellt werden (z. B. Bearbeitung am nächsten Wochenende), wenn mit dem Nutzer/der Nutzerin nichts anderes vereinbart wurde. Im Rahmen von Open-Access-Diensten sind manche Methoden darüber hinaus bestimmten Tag- und Nachtzeiten fest zugeordnet.

Das technische Personal der ZAC kann darüber hinaus nach eigenem Ermessen von der Reihenfolge des Eingangs abweichen, wenn es für einen optimalen Messbetrieb angezeigt erscheint.

Das technische Personal der ZAC kann Messaufträge abweisen, wenn einer der folgenden Gründe vorliegt:

- Der Messauftrag erfüllt nicht die Voraussetzungen aus Abschnitt 3.
- Die Probe erweist sich als nicht zur Messung geeignet.
- Die Durchführung des Auftrags ist mit Sicherheitsrisiken verbunden.
- Die Durchführung des Auftrags ist technisch oder organisatorisch nicht möglich.
- Es steht aufgrund hoher Auslastung nicht genügend Messzeit zur Verfügung.
- Der mit dem Auftrag verbundene Aufwand ist unverhältnismäßig.

Die wissenschaftlichen Leiter der ZAC behalten sich darüber hinaus das Recht vor, Messaufträge nach eigenem Ermessen begründet abzulehnen.

5. Probenrückgabe und Datenspeicherung

Nach Erfüllung des Auftrags wird die jeweilige Probe im Probenrückgaberaum 2224.00.116 zur Abholung bereitgestellt. Die Rückgabe von X-Ray Proben erfolgt in Raum 2225.00.130. Die ZAC übernimmt keine Verantwortung für Beschädigung oder Verlust von Proben nach Abschluss des Messauftrags.

Die gemessenen Daten werden auf zentralen Datenservern gespeichert und ggf. zum Download bereitgestellt. Rohdaten der X-Ray Analysen werden grundsätzlich in ZAC gespeichert und gemäß dem DFG-Kodex¹ für 10 Jahre aufbewahrt. Bei den sonstigen Methoden stellt die ZAC die regelmäßige Datensicherung der IT-Infrastruktur sicher, die Aufbewahrung der Daten im Sinne des DFG-Kodex liegt aber ausschließlich in der Verantwortung der Nutzer/innen

6. Abrechnung

Die Abrechnung der Dienstleistungen erfolgt pauschaliert gemäß den Sätzen in Anhang 2.

7. Haftung / Publikationen

Die ZAC stellt die technischen Rahmenbedingungen für den Messbetrieb sicher. Sie übernimmt jedoch keine Verantwortung für die Qualität der Primärdaten. Die Verantwortung für die wissenschaftlich adäquate Auswertung der Daten und damit verbundene Schlussfolgerungen liegt ausschließlich bei den Nutzer/innen, wenn die Auswertung nicht durch Mitglieder der Abteilung erfolgt.

Die Nutzer/innen der ZAC profitieren häufig vom Fachwissen und der Anwendungsexpertise des wissenschaftlichen und technischen Personals der ZAC. Die Beiträge der Abteilung zum wissenschaftlichen Fortschritt eines Projekts sollen daher anerkannt werden.

Diese Anerkennung kann je nach Beitrag und Projekt variieren. Da der Nachweis von Beiträgen von zentralen Forschungseinrichtungen in Publikationen ein wichtiges Kriterium für die Antragstellung und Berichterstattung gegenüber Drittmittelgebern ist, sollten diese immer genannt werden. Dies kann zum Beispiel in Form eines Acknowledgements erfolgen:

„Die Autoren danken ... [Personen] der Zentralen Analytik Chemie (ZAC-MS/NMR/X-Ray/CHN/...) des Departments Chemie der Johannes Gutenberg-Universität Mainz für ihren Beitrag.“

The authors would like to thank ... [persons] of the Central Analytical Chemistry (ZAC-MS/NMR/X-Ray/CHN/...) of the Department of Chemistry at the Johannes Gutenberg University Mainz for their contribution.

Die Bezahlung der angebotenen Services schließt eine Co-Autorenschaft nicht aus. Zentrale wissenschaftliche Einrichtungen stellen Leistungen in Rechnung, um laufende Kosten zu decken und die Wartung der Geräte zu gewährleisten. Falls Mitglieder von ZAC einen substantiellen intellektuellen oder experimentellen Beitrag zu einer Publikation (z.B. Datenauswertung, Methodenetablierung) geleistet haben, sollte/n die entsprechende/n Person/en wie alle anderen Co-Autor/innen behandelt werden.

¹ Deutsche Forschungsgemeinschaft, „Leitlinien zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis, Kodex“, September 2019, DOI [10.5281/zenodo.3923602](https://doi.org/10.5281/zenodo.3923602)

Die ZAC übernimmt keine Haftung für Schäden an Personen oder Dingen, die durch unsachgemäßen Gebrauch der Einrichtungen in den Räumen der ZAC entstehen. Bei gravierenden oder wiederholten Verstößen gegen die Nutzerordnung behält sich die ZAC vor, Nutzer/innen vom Messbetrieb auszuschließen.

8. Gültigkeit

Diese Ordnung tritt mit der Unterschrift der verantwortlichen Ansprechpartner aus Abschnitt 2 in Kraft und gilt bis auf Widerruf.

Mainz, den 02.05.2022

Geschäftsführender Leiter DC

Prof. Dr. Jürgen Gauß

Jürgen Gauß

Wissenschaftliche Leiter ZAC

Dr. Christopher Kampf

Dr. Johannes Liermann

Dr. Mihail Mondeshki

Dr. Dieter Schollmeyer

Anhang 1 – Gerätespezifikationen

Bereich	Gerät	Beschreibung	Betrieb	Inbetriebnahme
AAS	Perkin Elmer 3100 ZL	Diverse Hohlkathoden-Lampen	Service	1993
CHN	Elementar vario EL Cube	CHN-Analysator	Service	2009
MAS	Bruker DSX400 FK	Festkörper NMR mit 3 Köpfen 2.5 mm 1H(19F)/X (X=13C-31P) 4.0 mm 1H/X (X=59Co-31P) 7.0 mm 1H/X (X=109Ag-29Si)	Service	1999
MS	Bruker Autoflex maX MALDI-TOF/TOF	Diverse Matrices und Probenvorbereitungsmethoden verfügbar	Service/ Open Access	2019
	Advion expresslon CMS	mit ASAP und PlateExpress-Interface	Open Access	2019
	Agilent 6545 Q-TOF HRMS	ESI/APCI/APPI Ionenquellen, Massengenauigkeit < 5ppm; Routine: Schleifeninjektion; Agilent Ininity II HPLC: verfügbare Säulen: C18, C8, HILIC, Phenyl	Service	2017
	Thermo Fisher DFS + LIFDI	FD/LIFDI/FI/CI/EI Quellen Thermo Trace 1310 GC	Service	2014
NMR	Bruker Avance III HD 300	300 MHz, 5 mm BBFO-Probenkopf mit z-Gradient, BACS-60 Probenwechsler	Open Access	2013
	Bruker Avance II 400	400 MHz, 5 mm BBFO-Probenkopf mit z-Gradient, SampleXPress 60facher Probenwechsler, BCU I Tieftemperatureinheit	Open Access	2012
	Bruker Avance III HD 400	400 MHz, 5 mm BBFO-Smart-Probe-Probenkopf mit z-Gradient, SampleXPress 60facher Probenwechsler, BCU II Tieftemperatureinheit	Service	2012
	Bruker Avance III 600	600 MHz, 5 mm TCI-Cryoprobenkopf mit z-Gradient, SampleXPress Lite 16facher Probenwechsler, BCU I Tieftemperatureinheit	Service	2011
	Bruker DRX400 LS	400 MHz, 5mm BBO-Probenkopf mit z-Gradient, 5 mm BBI-Probenkopf mit z-Gradient	Service / Open Access	1996
	X-Ray	Stoe IPD52T	Cu/Mo-Strahlung 120K-RT	Service
	Stoe StadiVari	Mo-Strahlung 100-RT	Service	2019

Anhang 2 – Kostenpauschalen**Kostenpauschalen für interne Nutzer/innen**

Bereich	Methode	Preis / Experiment	Preis / h
NMR	NMR 300/400 MHz	0,70 EUR	1,00 EUR
	NMR 600 MHz	0,70 EUR	8,00 EUR
NMR DRX 400	¹ H NMR	0,80 EUR	-
	¹³ C NMR	2,70 EUR	-
	X kurz	1,00 EUR	-
	X lange	1,80 EUR	-
	COSY, DOSY	1,00 EUR	-
	HSQC, HMBC, HMQC, TOCSY	1,50 EUR	-
	NOESY, ROESY	3,20 EUR	-
MS	ESI/APCI/APPI	5,00 EUR	
	MALDI-TOF	5,00 EUR	
	TLC-MS	5,00 EUR	
	HPLC-MS	5,00 EUR	5,00 EUR
	FI/LIFDI/FD	35,00 EUR	

Kostenpauschalen für externe Nutzer/innen

Bereich	Methode	Preis / Einheit
NMR	¹ H-NMR 300/400 MHz	25,00 EUR
	¹³ C/X/2D-NMR 300/400 MHz	50,00 EUR
	¹ H-NMR 600 MHz	40,00 EUR
	¹³ C/X/2D-NMR 600 MHz	110,00 EUR
	NMR-Röhrchen	3,00 EUR
	Probenvorbereitung (pro Probe)	30,00 EUR
	Spektrenprozessierung (pro Spektrum)	10,00 EUR
MS	ESI/APCI/APPI	38,50 EUR
	MALDI-TOF	38,50 EUR
	TLC-MS	38,50 EUR
	HPLC-MS (pro Stunde)	38,50 EUR
	FI/LIFDI/FD	
	Wissenschaftliche Datenauswertung (pro Stunde)	120,00 EUR

Alle Preise für externe Nutzer verstehen sich zzgl. Steuern und beziehen sich auf die reine Messzeit bzw. pro Messung.