



UNIVERSITÄT  
DES  
SAARLANDES

# Nutzungsordnung der Core Facility-11 Kernmagnetische Resonanzspektroskopie (NMR)

## 1. Geltungsbereich

- (1) Die Nutzung der Core Facility-1 NMR erfolgt nach der aktuellen Fassung der Rahmennutzungsordnung der Universität des Saarlandes für Core Facilities.
- (2) Diese Nutzungsordnung enthält die speziellen gültigen Regelungen, um den Betrieb der Core Facility NMR zu gewährleisten und ist ebenfalls für alle NutzerInnen verbindlich.

## 2. Ansprechpersonen und Aufgaben

### Wissenschaftliche und Technische Betreuung:

Dr. Josef Zapp  
Pharmazeutische Biologie  
Gebäude C2 3, Campus SB  
66123 Saarbrücken  
Tel.: +49 681 302 57309  
E-Mail: j.zapp(at)mx.uni-saarland.de

Dr. Michael Zimmer  
Allgemeine und Anorganische Chemie  
Gebäude 4 2, Campus SB  
66123 Saarbrücken  
Tel.: 49 681 302 4777  
E-Mail: m.zimmer(at)mx.uni-saarland.de

Die Core Facility NMR bedient hauptsächlich die ProfessorInnen und Arbeitsgruppen der Chemie und Pharmazie der Universität des Saarlandes. Die Leitung der CF NMR bietet den NutzerInnen den Zugang zu den in Anhang 1 näher spezifizierten Spektrometern und garantiert den ordnungsgemäßen Betrieb der Geräte. In regelmäßigen Abständen werden Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durchgeführt. Geräte- und Messparameter werden von den Geräteverantwortlichen in enger Rückkopplung mit den Arbeitsgruppen an die jeweiligen Messprobleme angepasst, um eine möglichst hohe Qualität der Spektren zu gewährleisten.

Als NutzerIn wird eine Arbeitsgruppe bestehend aus einem oder mehreren ForscherInnen bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten der CF erhalten. Die Arbeitsgruppe wird von einem/r Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte der durchzuführenden Messungen bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG verantwortlich ist. Die Nutzungsordnung ist für alle NutzerInnen verbindlich.

In jedem Arbeitskreis gibt es mindestens einen benannten „*NMR-Officer*“ (Verantwortlicher der Arbeitsgruppe und/oder NMR-Experte innerhalb der Arbeitsgruppe), der/die als direkter AnsprechpartnerIn für die einzelnen NutzerInnen und als Schnittstelle zu den Geräteverantwortlichen fungiert. Die Geräteverantwortlichen und die *NMR-Officers* besitzen Weisungsbefugnis für NMR-Angelegenheiten gegenüber Mitarbeitenden der jeweiligen Arbeitskreise.

### 3. Ausstattung und Leistungen

Gerätebezeichnung	DFG-Geräteschlüssel	DFG-Gerätefördernummer	Beschreibung	Inbetriebnahme
NMR Spektrometer 1: BRUKER Fourier 300	1740		Siehe Anhang 1	2009
NMR Spektrometer 2: BRUKER Avance 300	1740		Siehe Anhang 1	2011
NMR Spektrometer 3: BRUKER Avance II 400	1740		Siehe Anhang 1	2002
NMR Spektrometer 4: BRUKER Avance III 400	1740		Siehe Anhang 1	2006
NMR Spektrometer 5: BRUKER Avance 400WB	1740	INST 256/384-1	Siehe Anhang 1	2014
NMR Spektrometer 6: BRUKER Avance 500	1740	477298507	Siehe Anhang 1	2002
NMR -Spektrometer 7: BRUKER Neo 500	1740	INST 256/540-1 FUGG	Siehe Anhang 1	2021

### 4. Betriebszeiten

NMR Messungen in der CF NMR sind rund um die Uhr an 365 Tagen möglich. Dabei wird zwischen Tages-, Nacht- und Wochenendbetrieb unterschieden (siehe Punkt 5.4) Der Zugang zu den NMR Räumen wird durch ein automatisches Schließsystem geregelt.

### 5. Nutzungsmodalitäten

- (1) Die Nutzung der CF NMR ist gebührenpflichtig. Die Höhe des Nutzungsentgelts richtet sich nach Zugehörigkeit der NutzerInnen (intern/extern). Details finden sich in Anlage 2 (Festsetzung des Nutzungsentgelts).
- (2) Grundsätzlich messberechtigt sind alle Angehörige der Universität des Saarlandes nach einer Sicherheits- und Geräteeinweisung durch die Geräteverantwortlichen sowie einer Registrierung ihrer Uds Karte im automatischen Schließsystem. NutzerInnen im Rahmen von Kooperationen

bzw. Auftragsforschung können auch WissenschaftlerInnen an anderen Hochschulen im In- und Ausland sein, sowie Firmen, die innerhalb der Bundesrepublik Deutschland registriert sind.

- (3) Die hohe Anzahl an NutzerInnen mit unterschiedlichen Bedürfnissen und Arbeitsweisen bedingt uneingeschränkt das disziplinierte Einhalten der bestehenden Regeln, sowie einen weit reichenden kollegialen Umgang zwischen den NutzerInnen und den Verantwortlichen. Im Falle von gravierendem andauerndem Fehlverhalten können die Rechte einzelner NutzerInnen oder ganzer Arbeitskreise eingeschränkt oder entzogen werden, sowie der Betriebsmodus durch die Leitung der Core Facility angepasst werden

- (4) Zwei verschiedene Arten der Nutzung sind in der CF NMR möglich:

**Automation:** Dies betrifft vor allem die Routinemessungen an den Spektrometern 1-4 und 6: Im Regelfall wird eine Messung mittels Probengeber von den NutzerInnen selbst gestartet. Der Messauftrag kommt hierbei durch die Eintragung der Probe in die Messliste der Automationssoftware ICONNMR zustande. Die Aufträge werden i.d.R. nach dem First-Order-First-Serve-Prinzip abgearbeitet, wobei längere Messungen automatisch aus dem Tagesmessbetrieb (08:00 -18:00) in den Nacht- oder Wochenendbetrieb verlagert werden.

**Manuelle Messungen:** Dies betrifft vor allem Festkörpermessungen am Spektrometer 5 sowie kompliziertere Messungen am Forschungsspektrometer 7: Diese Messungen werden nur von speziell geschultem Personal durchgeführt, entweder sehr erfahrenen NutzerInnen der zugelassenen Arbeitskreise oder, nach Antrag, durch das Servicepersonal der Core Facility. Die Vergabe der Messzeit erfolgt direkt durch die Geräteverantwortlichen.

- (5) Bei Überbuchungen erhalten die internen NutzerInnen sowie deren KooperationspartnerInnen Vorrang vor externen NutzerInnen. Grundsätzlich wird die Reihenfolge der Vergabe unter Berücksichtigung des Eingangs der Buchung festgelegt (siehe auch Absatz (2)). In begründeten Ausnahmefällen (z. B. dringende Terminangelegenheiten, Instabilität der Proben) kann von der Reihenfolge abgewichen werden.
- (6) Kurzfristige Änderungen oder Stornierungen für die Messzeiten an Spektrometer 5 und 7 sind den CF-Ansprechpersonen unverzüglich mitzuteilen.

## 6. Verantwortlichkeiten der NutzerInnen

NutzerInnen, die die Geräte der CF NMR in Automation nutzen wollen, benötigen eine Sicherheitseinweisung und eine Geräteeinweisung an dem zu bedienenden Geräten (Spektrometer 1-4 und 6). Jede Nutzerin/Jeder Nutzer unterschreibt, dass eine Einweisung incl. sicherheitstechnischer Unterweisung zum Betrieb von NMR Spektrometern erfolgt ist und sie/er die Allgemeinen Nutzungsregeln zur Kenntnis genommen hat. Für manuelle Messungen (betrifft vor allem die Spektrometer 5 und 7) bedarf es einer vertieften Einweisung durch unsere

Geräteverantwortlichen, die auch die Bedienkompetenz überprüfen.

## 7. Datenbereitstellung, -verarbeitung, -weitergabe und Archivierung

Nach Abschluss der Messung werden die Primärdaten umgehend und automatisch an einen zentralen File-Server weitergeleitet und an die NutzerInnen übergeben. Die NutzerInnen werden darauf hingewiesen, dass im Falle einer Veröffentlichung gemäß der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis die Primärdaten mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden müssen. Die Verantwortung für die Aufbewahrung der Primärdaten obliegt den NutzerInnen.

## 8. Regelung zu Verwertungsrechten, Intellectual Property (IP)

Die Eigentumsrechte an Proben und generierten Daten liegen bei den NutzerInnen. Die CF NMR darf die Daten nicht eigenständig weiterverwenden oder veröffentlichen, außer mit Zustimmung (und Nennung) der NutzerInnen. Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren.

## 9. Nennung der CF NMR sowie von Geräteförderungen in Publikationen

Die CF NMR, die Geräte-Förderer sowie die verantwortlichen Personen sind im Acknowledgement einer Publikation anzugeben. Zum Beispiel: *Instrumentation and technical assistance for this work were provided by the CF NMR at UdS, with financial support from Saarland University and German Research Foundation DFG.* Bei neu angeschafften Geräten müssen diese Spektrometer zusätzlich mindestens 3 Jahre nach der Beschaffung mit dem Förderkennzeichen der DFG aufgeführt werden (z.B. DFG-Gerätefördernummer). Dies ist wichtig, um dem 3 Jahresbericht der DFG Genüge zu tun.

## 10. Anlagen

### Anlage 1: Übersicht der verfügbaren Spektrometer

Spektrometer	Ausstattung	Verwendung	Standort, Betreuung, Inbetriebnahme
<b>Spektrometer 1</b> BRUKER 300 MHz Konsole: Fourier 300 Magnet: 7 Tesla US Topspin 3.2	5mm Dual Probe; ATM und Z-Gradienteneinheit; SampleXpress Lite für 16 Proben	Schnelle $^1\text{H}$ - und einfache 2D-Spektren. Messungen ausschließlich bei Raumtemperatur und in Automation	Geb.: C2 3, Raum 004, Dr. Josef Zapp, Konsole, Magnet und Probenkopf aus 2009
<b>Spektrometer 2:</b> BRUKER 300 MHz Konsole: Avance III Magnet: 7 Tesla US Topspin 3.2	5mm BBO Probe mit Z-Gradientenspule und ATM-Einheit; SampleXpress Lite für 16 Proben	$^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ und Heterokernmessungen in Automation. Nach Absprache auch Hoch- und Tieftemp. Messungen möglich	Geb.: C4 1, Raum -2.05, Dr. Michael Zimmer, Konsole, Magnet und Probenkopf aus 2011
<b>Spektrometer 3:</b> BRUKER 400 MHz Konsole: Avance II Magnet: 9.4 Tesla US Topspin 3.2	5mm BBFO- Probe mit Z-Gradient und ATM; BACS Probenwechsler für 60 Proben	Für die gehobenen Automationsroutine der OC, PC und Pharmazie mit Schwerpunkt auf $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ und Heterokernen wie z.B. $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{77}\text{Se}$ und $^{119}\text{Sn}$ . Langzeitmessungen im Nacht- und Wochenendbetrieb.	Geb.: C4 2, Raum U 1.05, Dr. Josef Zapp, Konsole, Magnet und Probenkopf aus 2006
<b>Spektrometer 4:</b> BRUKER 400 MHz Konsole: Avance III Magnet: 9.4 Tesla US Topspin 3.2	5mm BBO Prodigy Cryo-Probe; SampleXpress für 60 Proben; BCU II Tempeinheit	1D und 2D NMR von $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ und Heterokernen. Besonders die Messzeiten für unempfindliche Isotope wie z.B. $^{13}\text{C}$ , $^{29}\text{Si}$ , und $^{207}\text{Pb}$ sind durch die Cryotechnologie der Meßsonde drastisch verkürzt.	Geb.: C4 1, Raum -2.05, Dr. Michael Zimmer, Magnet aus 2002; Neue Konsole 2016; Prodigyeinheit aus 2018

<p><b>Spektrometer 5:</b> BRUKER 400 MHz Konsole: Avance III Magnet: Wide Bore 9.4 Tesla US Topspin 3.5</p>	<p>MAS Breitbandsonde von 40 bis 160 MHz;</p>	<p>Wird ausschließlich manuell von erfahrenem Operator betrieben. Vorwiegend direkt- polarisierte und CP/MAS Messungen der Hetero- kerne <math>{}^{6/7}\text{Li}</math>, <math>{}^{13}\text{C}</math>, <math>{}^{29}\text{Si}</math>, <math>{}^{27}\text{Al}</math>, <math>{}^{31}\text{P}</math>, und <math>{}^{119}\text{Sn}</math>.</p>	<p>Geb.: C4 1, Raum -2.05, Dr. Michael Zimmer, Magnet, Konsole und Probenkopf aus 2014</p>
<p><b>Spektrometer 6:</b> BRUKER 500 MHz Konsole: Avance I Magnet: 11.7 Tesla US Topspin 2.1.8</p>	<p>5mm TCI Probe mit Z- Gradient und ATM; BACS Probenwechsler für 60 Proben; BCU05 Tempeinheit</p>	<p>Schwerpunkt der Arbeiten liegen hier auf <math>{}^1\text{H}</math> NMR und invers detektierten 2D Messungen niedrig konzentrierter Proben aus OC, PC und Pharmazie, Messungen ausschließlich in Automation. Langzeit- messungen im Nacht- und Wochenendbetrieb.</p>	<p>Geb.: C4 2, Raum U 1.05, Dr. Josef Zapp, Konsole, Magnet und Probenkopf aus 2002</p>
<p><b>Spektrometer 7:</b> BRUKER 500 MHz Konsole: Neo Magnet: 11.7 Tesla US Topspin 4.3</p>	<p>5mm TCI Prodigy Cryo-Probe mit ATM; SampleCase Proben- wechsler (24 Proben); BCU II Tempeinheit</p>	<p>Unser Forschungsgerät. Manueller und auto- matischer Betrieb. Hier laufen vorwiegend Spezialmessungen aus Pharmazie, OC und PC. Der Prodigy Kryoproben- kopf erlaubt auch die Aufnahmen gering konzentrierter Proben. Dieses Spektrometer kann auch tageweise gebucht werden</p>	<p>Geb.: C4 1, Raum -2.05, Dr. Josef Zapp, Konsole, Magnet und Prodigyeinheit aus 2021</p>

## Anlage 2: Festsetzung des Nutzungsentgelts für die NMR-Messungen

Die pauschalierten Kosten orientieren sich an „Hinweise zu Gerätenutzungskosten und zu Gerätezentren“ aus DFG-Vordruck 55.04 – 07/24, Seite 12.

Die Kostenabrechnungen und –verbuchungen erfolgen durch die Leiter der Core Facility anhand der verbrauchten Messzeiten (jeweils dokumentiert im Accounting von ICON-NMR ) auf ein dafür eingerichtetes Konto der CF NMR bei der UdS.

**Interne NutzerInnen:** Für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten werden für Angehörige der UdS folgende Kostenpauschalen **pro Stunde Messzeit im Automationsbetrieb** erhoben (Stand 01.07.2025):

Spektrometer 1-4:	5,00 €
Spektrometer 5-7:	10,00 €
Spektrometer 4 und 7:	2,00 € Zuschlag für Prodigy Wartung

Bei **manuellen Auftragsmessungen** fallen zusätzliche Kosten in Höhe von 10,00 € pro angefangener Stunde für Ansetzen und Auswerten der Messungen an.

**Externe NutzerInnen:** Messungen für NutzerInnen, die weder Angehörige der UdS sind, noch eine Kooperation mit Angehörigen der UdS unterhalten, werden die nach Trennungsrechnung ermittelten Vollkosten plus ein angemessener Gewinnzuschlag in Rechnung gestellt.

Die Einnahmen werden ausschließlich zur Deckung der anfallenden Kosten im NMR-Betrieb verwendet. Für interne NutzerInnen findet ein Rabattmodell Anwendung.

## 11. Inkrafttreten

Der Fakultätsrat der Fakultät NT hat in seiner Sitzung vom 04.02.2026 vorliegende Nutzungsordnung erlassen.

Die Nutzungsordnung tritt mit Wirkung vom 01.04.2026 in Kraft. Für die Einhaltung der Nutzungsordnung sorgen die Geräteverantwortlichen sowie die Leitung der Core Facility NMR.

**Saarbrücken, den 09.03.2026**

**gez. Prof. Dr. David Scheschkewitz (Leiter der CF NMR)**