



## ***Fachgruppentagung 2013 Frauenchiemsee***

Die 35. Fachgruppentagung in Frauenchiemsee steht kurz bevor. Wer sich noch nicht entschieden hat, sollte sich das vielfältige und umfangreiche Vortragsprogramm sowie die Titel der eingereichten Poster auf der Webseite anschauen und vielleicht doch noch kurzfristig eine Teilnahme erwägen.

Das Team vor Ort freut sich nach Monaten harter Arbeit schon darauf, viele nette und interessante Gäste, auch aus unseren Partnerländern Italien und Slowenien, begrüßen zu können.

*Liebe Kolleginnen und Kollegen,*

Im Zeitraum vom 09. bis 12. September 2013 wird die 35. Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanz auf der Fraueninsel im Chiemsee stattfinden. Die Tagung wird gemeinschaftlich zusammen mit den Fachgruppen aus Italien und Slowenien abgehalten, und alle Aspekte der Magnetischen Resonanz beleuchten. Die Insel bildet eine wunderbare Kulisse für eine Tagung, und kann bequem mit öffentlichen Verkehrsmitteln erreicht werden.

Mehr Informationen zur FGMR-2013 findet ihr im angehängten Flyer bzw. unter <http://www.fgmr2013.de>

Bitte beachten:

Im direkten Anschluss an die Fachgruppentagung (12.-14.09.2013) findet das Jahrestreffen des Schwerpunktprogrammes "New Frontiers in Sensitivity for EPR Spectroscopy" statt. Mehr Informationen dazu unter dem Punkt Events auf der Seite:

<http://www.spp1601.de>

Wir hoffen, dass die Lage und das Programm einen regen Austausch stimuliert, und freuen uns auf eure Teilnahme!

Mit besten Grüßen,  
Steffen Glaser, Bernd Reif, Michael Sattler

**PS: Deadline für Registrierung und Abstract Submission: 1. Juni 2013**

## ***Ernst Awards 2013***

As a good tradition, the Ernst Awards are given to eminent Ph.D. students from Germany and abroad.

Candidates should be Ph.D. students on the basis of their genuine published work. The papers must have been refereed and accepted by an international scientific journal. The deadline this year:

**June 1st, 2013.**

Please ensure that you send your contribution in time. All manuscripts will be evaluated by members of a scientific committee under the guidance of Dr. W. Jahnke and should be send in electronic form to

**Prof. C. M. Thiele**  
**[cthiele@thielelab.de](mailto:cthiele@thielelab.de)**

The Awards ceremony will be embedded as a special session during the Annual Meeting of the Discussion Group in Frauenchiemsee.

Please download the actual assignment criteria from the FGMR-Meeting webpage or from the Magnetic Resonance webpage at the GDCh (follow MR on the Periodic Table).

## ***G-NMR: DFG Network of German NMR Centers***

Das nächste G-NMR steht an im Anschluss an die Fachgruppentagung in Frauenchiemsee und zwar am Donnerstag, den 12.9.2013 von 12.30 – 15.30 Uhr.

Als wichtigster Tagesordnungspunkt sollte dieses Mal versucht werden, Einigung über eine Modell-Nutzerordnung zu erzielen, die im Anschluss dann auch an die DFG weitergeleitet werden kann.

Eine ganze Reihe von Punkten wurde auf den vorangegangenen Sitzungen bereits besprochen und inzwischen weitgehend berücksichtigt.

Zur Vorbereitung auf das Treffen sind im Anhang jeweils eine Modellordnung für ein NMR-Zentrum sowie für ein Service-Labor am Beispiel Frankfurt angehängt.

Es wäre hilfreich, wenn sich alle Interessierten im Vorfeld mit diesen Vorschlägen vertraut machen könnten, damit es dann zu einer zügigen Beschlussfassung kommen kann.

Ganz dringende Einwände sollten vorab an H. Schwalbe (schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de) übermittelt werden.

## ***Initiative for Science in Europe***

Dear Colleagues,

On behalf of the Initiative for Science in Europe (ISE), I would like to thank you for supporting the '[No-Cuts-On-Research.EU](http://www.no-cuts-on-research.eu)' petition. With over 153'000 signatories, this has been the largest petition on a science cause so far in Europe if not worldwide. The list of signatures was handed over to the three EU presidents and the French president.

The outcome is a success considering the difficult political environment and severe constraints put on the budgets in many countries: the budget for Horizon 2020 will now represent "a real growth compared to 2013 level". It is probably the best we could hope for, even though we believe it is not enough to meet the ambitious goals

the EU leaders have set themselves. Read more at

[http://www.no-cuts-on-research.eu/news/what\\_happened.pdf](http://www.no-cuts-on-research.eu/news/what_happened.pdf)

The legal text still needs to be finalised and technical questions resolved – we will keep you posted.

As promised, we will update you about ongoing developments in research policy in a short newsletter – up to four times a year.

In this edition we would like to inform you about the Euroscientist – a European science magazine "by the community, for the community." We also would like to make you aware of new initiatives that were launched recently: A video campaign to inform the public about the importance of research investment, an initiative to put an end to the misuse of the impact factor, and a consultation process regarding the integration of the socio-economic sciences and humanities in Horizon 2020. Finally, we also would like to invite you to post your opinion on the role of learned societies in an open access publishing world.

Feel free to forward the information and encourage your colleagues to sign up to this newsletter at

[http://www.no-cuts-on-research.eu/news/nl\\_sign\\_up.html](http://www.no-cuts-on-research.eu/news/nl_sign_up.html)

Enjoy reading!

Wolfgang Eppenschwandtner, Executive Coordinator, [Initiative for Science in Europe](http://www.ise-europe.org).

***Zu guter Letzt:***



"SIR NMR"

Selective Inversion Recovery "SIR NMR"...  
from: <http://www.labsolutely.org/tag/nmr/>

## Welcome note

Dear colleagues,

We are pleased to invite you to attend in the 35th FGMR Discussion Meeting and Joint Conference of the German, Italian and Slovenian Magnetic Resonance Societies.

The meeting will be held from September 9 to 12, 2013 in Frauenwörth on the island of Frauenchiemsee / Lake Chiemsee southeast of Munich, Germany. This location is a particularly beautiful place and can be conveniently reached by public transport for colleagues from Germany, Italy and Slovenia.

The conference will cover a wide range of topics in magnetic resonance, including solution and solid-state NMR spectroscopy of small molecules and materials, of proteins and nucleic acids, polymers and pharmaceutical compounds, EPR and hyperpolarization, computational methods and magnetic resonance imaging. We hope that an exciting scientific programme and the location of the meeting will facilitate stimulating discussions and exchange.

Given the recent developments in magnetic resonance research, we are looking forward to an exciting magnetic resonance conference.

We encourage you to submit your contributions and hope to welcome you in Frauenwörth in 2013!

Steffen Glaser, Bernd Reif, Michael Sattler

## General information

### Posters & Abstracts

There will be poster sessions during the meeting. Oral poster presentations will be selected from contributed abstracts. Abstract submission is available online at [www.fgmr2013.de](http://www.fgmr2013.de).

### Registration

Online registration is available at [www.fgmr2013.de](http://www.fgmr2013.de). For full details on fees, conditions of payment, cancellation, etc., please refer to this website. The deadline for early registration is June 1, 2013.

### Important Deadlines

Abstract submission

> to be considered for an oral talk: June 1, 2013

> posters: June 15, 2013

Early registration: June 1, 2013

Applications for Ernst Awards: June 1, 2013

Hotel reservation: July 15, 2013

### Organization & Scientific Program

Steffen Glaser, Bernd Reif, Michael Sattler

Technische Universität München

Lichtenbergstrasse 4

D-85747 Garching

[www.bnmrz.org](http://www.bnmrz.org) [www.ch.tum.de](http://www.ch.tum.de)

Helmholtz Zentrum München

Ingolstädter Landstrasse 1

D-85764 Neuherberg

[www.helmholtz-muenchen.de](http://www.helmholtz-muenchen.de)

Contact: [fgmr2013@nmr.de](mailto:fgmr2013@nmr.de)

### Venue

The meeting will take place in the monastery Frauenwörth on the island of Frauenchiemsee. Further travel information can be found on the website [www.frauenwoerth.de](http://www.frauenwoerth.de).

## 35<sup>th</sup> FGMR Discussion Meeting and Joint Conference of the German, Italian and Slovenian Magnetic Resonance Societies

## Advanced Magnetic Resonance – Methods and Applications



©tourismus.prien.de, Christina Senega

Frauenchiemsee, Germany  
September 9 to 12, 2013

## Topics

- Biological solid state NMR
- Computational methods
- Dynamics
- EPR/hyperpolarization
- Imaging
- Materials
- Nucleic acids
- Pharma and food
- Polymers
- Small molecules
- Structural biology

## Tutorials

There will be pre-conference tutorials on Monday, September 9, 2013 (afternoon) on

- Optimum control and pulse sequence optimization
- Data analysis, structure calculations, CCPN, WeNMR
- Solid-state NMR
- From Spin Hamiltonian to NMR spectra

## Sponsors



## Confirmed Speakers

- |                                   |                                  |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| › Silvio Aime, Torino             | › Michael Ryan Hansen, Mainz     |
| › Stephan Appelt, Aachen          | › Wolfgang Jahnke, Basel         |
| › Alessandro Bagno, Padova        | › Raffaele Lamanna, CR Trisaia   |
| › Jochen Balbach, Halle           | › Adam Lange, Göttingen          |
| › Lucia Banci, Florence           | › Burkhard Luy, Karlsruhe        |
| › Marina Bennati, Göttingen       | › Gregor Mali, Ljubljana         |
| › Robert Bitt, Berlin             | › Carla Marchioro, Verona        |
| › Bernhard Blümich, Aachen        | › Andrea Mele, Milano            |
| › Enrica Bordignon, Zürich        | › Giovanna Musco, Milano         |
| › Mauro Botta, Torino             | › Philipp Neudecker, Düsseldorf  |
| › Kevin Brindle, Cambridge        | › Michael Nilges, Paris          |
| › Lucia Calucci, Pisa             | › Hartmut Oschkinat, Berlin      |
| › Teresa Carlomagno, Heidelberg   | › Mario Piccioli, Florence       |
| › Mirko Cevec, Ljubljana          | › Janez Plavec, Ljubljana        |
| › Mario Chiesa, Torino            | › Paul Rösch, Bayreuth           |
| › Daniel Cicero, Roma             | › Kay Saalwächter, Halle         |
| › Volker Dötsch, Frankfurt        | › Alexander Schnegg, Berlin      |
| › Hellmut Eckert, Münster         | › Leif Schröder, Berlin          |
| › Gennerio Esposito, Udine        | › Anne Ulrich, Karlsruhe         |
| › Roberto Fattorusso, Naples      | › Gerhard Wagner, Boston         |
| › Marco Geppi, Pisa               | › Silke Wiesner, Tübingen        |
| › Christian Griesinger, Göttingen | › Jens Wöhnert, Frankfurt        |
| › Stephan Grzesiek, Basel         | › Jörg Wrachtrup, Stuttgart      |
| › Ruth Gschwind, Regensburg       | › Markus Zweckstetter, Göttingen |

## Ernst Awards

Three Ernst Award prizes endowed with 500 € each, honoring an outstanding research publication, will be awarded to young researchers. The Awards will be handed over by Nobel laureate Richard R. Ernst. The Awards will be presented to the awardees in a plenary session during the meeting. Candidates should be doctoral students. Details on the application can be found under [www.fgmr2013.de](http://www.fgmr2013.de). The deadline for applications is June 1, 2013.

## Committees

### Scientific Committee Germany

- › Jochen Balbach, Halle
- › Marina Bennati, Göttingen
- › Eike Brunner, Dresden
- › Steffen Glaser, München
- › Wolfgang Jahnke, Basel
- › Kay Saalwächter, Halle
- › Christina Thiele, Darmstadt

### Scientific Committee Italy

- › Fabio Arnesano, Bari
- › Stefano Mammi, Padova
- › Luisa Mannina, Roma
- › Henriette Molinari, Verona
- › Enzo Terreno, Torino

### Scientific Committee Slovenia

- › Janez Dolinšek, Ljubljana
- › Janez Plavec, Ljubljana

### Local Organizing Committee

- › Sonja Dames
- › Steffen Glaser
- › Axel Haase
- › Konstantin Karaghiosoff
- › Horst Kessler
- › Oliver Lange
- › Tobias Madl
- › Marion Menzel
- › Bernd Reif
- › Michael Sattler
- › Jörn Schmedt auf der Günne

Prof. Dr. Harald Schwalbe

Telefon +49 (0)69 798 29737  
Telefax +49 (0)69 798 29515  
E-Mail [schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de](mailto:schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de)

[www.nmr.uni-frankfurt.de](http://www.nmr.uni-frankfurt.de)  
<http://schwalbe.org.chemie.uni-frankfurt.de/>

Datum: 21.05.2013

## **Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)-Spektrometer am Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main**

### *I. Definitionen*

Die *zentrale Service-Einrichtung* der Organischen Chemie und Chemischen Biologie vergibt durch benannten Verantwortlichen *Zugang* zu den Kernspinresonanzgeräten.

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie umfasst *Kernspinresonanzgeräten mit ausgewiesener Spezifikation gemäß Anlage 1.*

Als *Nutzer* wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einem Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte des durchzuführenden Forschungsprojekts bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG<sup>1</sup> verantwortlich ist.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

<sup>1</sup>[http://www.dfg.de/download/pdf/dfg\\_im\\_profil/reden\\_stellungnahmen/download/empfehlung\\_wiss\\_praxis\\_0198.pdf](http://www.dfg.de/download/pdf/dfg_im_profil/reden_stellungnahmen/download/empfehlung_wiss_praxis_0198.pdf)

## II. *Verpflichtungen der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie*

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie bietet Nutzern Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten an.. Die Serviceabteilung führt in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durch und optimiert entsprechende Geräteparameter, die die technischen Voraussetzungen für NMR-Messungen in möglichst guter Qualität gewährleisten sollen. Für die Durchführung von NMR-Messungen fallen Kosten an, die vom Nutzer bezahlt werden müssen. Diese Kosten sind in entsprechenden Kategorien pauschaliert und werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung detailliert aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftlich- wie auch technisch-verantwortliche Personen benannt:

Prof. Harald Schwalbe	Gesamtverantwortlicher Büro: N160/314 Telefon: 069/798-29737 E-Mail: <a href="mailto:schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de">schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de</a>
Dr. Christian Richter	Wissenschaftliche Ansprechperson Büro: N160/315 Telefon: 069/798-29137 E-Mail: <a href="mailto:ric@nmr.uni-frankfurt.de">ric@nmr.uni-frankfurt.de</a>
Dr. Julia WirmerBartoschek	Wissenschaftliche Ansprechperson Büro: N160/315 Telefon: 069/798-29137 E-Mail: <a href="mailto:wirmer@nmr.uni-frankfurt.de">wirmer@nmr.uni-frankfurt.de</a>
Dipl.-Ing. Reinhard Olbrich	Technische Ansprechperson Büro: N160/13-16 Telefon: 069/798-29122 E-Mail: <a href="mailto:Olbrich@chemie.uni-frankfurt.de">Olbrich@chemie.uni-frankfurt.de</a>
Stefan Bihler	Technische Ansprechperson Büro: N260/003 Telefon: 069/798- 29353 E-Mail: <a href="mailto:Bihler@pharmchem.uni-frankfurt.de">Bihler@pharmchem.uni-frankfurt.de</a>

### *III. Voraussetzungen für den Zugang, Auswahlverfahren eines Nutzers und Durchführung der Nutzung*

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die an einer deutschen wissenschaftlichen Forschungseinrichtung beschäftigt sind. Nutzer im Sinne von Auftragsforschung können auch Wissenschaftler an Firmen sein, die innerhalb der Bundesrepublik Deutschland registriert sind. Hierbei ist die Zivilklausel der Grundordnung der Goethe-Universität<sup>2</sup> zu beachten.

Zwei verschiedene Arten der Nutzung sind in der zentralen Service-Einrichtung möglich:

1. Im Regelfall wird eine Messung über die Automation mit automatischem Probenwechsler vom Nutzer gestartet. Der Messauftrag kommt hierbei durch die Eintragung in die Messliste zustande und setzt eine Erlaubnis durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers voraus.
2. Bei komplizierten Messungen ist es möglich, dass Messungen vom Servicepersonal durchgeführt werden. Hierzu müssen die Nutzer einen Antrag an die benannten Ansprechpersonen stellen. Ein Antrag hierfür ist in Anlage 3 gezeigt. Auch hier ist die Bestätigung des Antrags durch den Kostenstellenverantwortlichen des Nutzers vorausgesetzt.

Die Ansprechperson entscheidet über die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit.

Im Falle einer positiven Evaluierung benennt die Ansprechperson das NMR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin für den Zugang zu dem benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit der Ansprechperson sowie des benannten Gerätes und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, dessen Antrag als Erstes eingereicht wurde. Entsprechend werden Messungen am Probenwechsler ebenfalls in der Reihenfolge der Eintragung der Probe in die Messliste abgearbeitet.

---

<sup>2</sup> vgl. Präambel der Grundordnung der Goethe-Universität: <http://www.satzung.uni-frankfurt.de/2013/Grundordnung-der-Johann-Wolfgang-Goethe-Universitaet-Frankfurt-am-Main-Stiftung-des-oeffentlichen-Rechts.pdf>

Grundsätzlich werden die Messungen durch geschultes Personal des Instituts durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen und technischen Ansprechpersonen oder von ihnen benannte Mitglieder der Arbeitsgruppe Schwalbe. In Ausnahmefällen kann es sehr erfahrenen Nutzern gewährt werden, selbst Messungen außerhalb der Automation durchzuführen. Eine vorherige Schulung und eine Einweisung in ein Gerät durch die wissenschaftliche Ansprechperson ist dafür notwendig. Die Erlaubnis, eigenständige Messungen durchzuführen, kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden.

Für den Fall, dass Unstimmigkeiten zwischen Ansprechperson und Nutzern über Nutzungszeitvergabe bestehen oder dass es sich um Spezialmessungen handelt, entscheidet der Gesamtverantwortliche der Serviceabteilung über die Nutzung.

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie verpflichtet sich, Anträge auf Nutzung, deren Evaluierung und die sich anschließende Nutzungszeitvergabe zu dokumentieren. Gemäß den DFG-Empfehlungen zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis müssen diese Unterlagen mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden.

#### *IV. Datensicherung und Datenweitergabe*

Nach Abschluss der Nutzungszeit leitet die Serviceabteilung umgehend die Primärdaten weiter, die von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie verpflichtet sich, für einen Zeitraum von einem Jahr die Primärdaten für den Nutzer zu sichern und die Weitergabe zu ermöglichen.

Der Nutzer wird 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 dieser Primärdaten obliegt dem Nutzer.

#### *V. Datenanalyse, Urhebererschaft und Veröffentlichungen*

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht



verantwortlich. Die Service Einrichtung gewährt nur für die technischen Voraussetzungen (siehe II. - Verpflichtungen der zentralen Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie).

Die Verantwortung für die Datenanalyse der Primärdaten liegt beim Nutzer. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen geben auf Anfrage Hilfestellung zur Datenanalyse.

Die Urheberschaft für die Primärdaten und deren Analyse gehört alleinig dem Nutzer, außer wenn vorher eine wissenschaftliche Zusammenarbeit vereinbart wurde.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Haben die wissenschaftlichen Ansprechpersonen wesentliche Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der -interpretation gegeben, werden sie Teil der Autorenliste.

#### *VI. Pauschalierte Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten*

Die pauschalierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten der Organische Chemie und Chemische Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung geregelt.

#### *VII. Gültigkeit*

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des Institutsleiters in Kraft und wird vom Sprecher der Gerätemanager der Organischen Chemie und Chemischen Biologie bezeugt. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Frankfurt, den

21. Mai 2013

---

Prof. Harald Schwalbe

(Institutsleiter Organische Chemie und  
Chemische Biologie)

---

Dr. Christian Richter

(Sprecher der benannten Gerätemanager)

**Anlage 1 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des NMR-Service der Organischen Chemie und Chemischen Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main - Gerätespezifikationen**

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 21.05.2013):

---

**400 MHz (BrukerAvance mit BACS60 Probenwechsler) HH003200(N160-14)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2000 Konsole, 1990 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBI Z-GRD 5mm TXI <sup>1</sup> H, <sup>15</sup> N, <sup>13</sup> C Z-GRD 5mm TBI Z-GRDTief-temp.
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

---

**500 MHz (BrukerAvance III HD) (Raum N160-13)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2013 Konsole, 2013Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBO Prodigy cryoZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

---

**300 MHz (BrukerAvance II mit BACS60 Probenwechsler) HH003105 (Raum N160-13)**

Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2005
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBFO Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek

<b>250 MHz (BrukerDPX mit BACS60 Probenwechsler)</b>	<b>HH007195 THU (Raum N160-16)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	1995 Konsole, 1987(M)
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm QNP CFSi Z-Grad
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek
<b>250 MHz (BrukerDPX)</b>	<b>HH005999 (Raum N160-16)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2000 Konsole, 1976 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm BBIZ-GRD 5mm BBO Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Zweikanal für Tieftemperaturmessungen
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Julia Wirmer-Bartoschek
<b>600 MHz (BrukerAvance III HD)*</b>	<b>H03128OB/1168 (Raum N140-02)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2013 Konsole, 1990 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5mm TCI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Prodigy cryoZ-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZ-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{31}\text{P}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD MAS- TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter

\*eingeschränkter Zugang, nur nach Absprache mit dem gesamtverantwortlichen Leiter der NMR-Serviceabteilung

**Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des NMR-Service der Organischen Chemie und Chemischen Biologie der Goethe Universität Frankfurt am Main – Pauschalierte Kosten**

Die zentrale Service-Einrichtung der Organischen Chemie und Chemischen Biologie erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte akkumulierte **Kosten pro Stunde Gerätezeit** (Stand 21.05.2013).

Die Kostenangaben beziehen sich auf Messungen im automatischen Probenwechslerbetrieb bzw. in Klammern durch das Servicepersonal manuell durchgeführte Aufträge. Hierbei handelt es sich um Experimente zur Analytik synthetischer Fragestellungen.

<b>NMR GerätFeldstärke = 400 MHz</b>	<b>NMR GerätFeldstärke 500 – 600 MHz</b>
5,00 €(15,00 €)	10,00 €(20,00 €)

Des Weiteren fallen Kosten von pauschal 50 € für den Umbau bei z.B. Tieftemperaturmessungen oder CF-Korrelationen an.

Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für diejenigen Arbeitsgruppen von der oben dargestellten Einteilung abweichen, falls sie sich bei der Erstanschaffung eines NMR/EPR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.

## **Nutzerordnung für Kernspinresonanz-(NMR)- und Elektronenspinresonanz-(EPR)- Spektrometer am Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) der Goethe Universität Frankfurt am Main**

### *I. Definitionen*

Das Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz vergibt durch die benannten Verantwortlichen *Zugang* zu den NMR/EPR-Geräten. Mitglieder im BMRZ sind Arbeitskreise, die eigenverantwortlich NMR- oder EPR-Forschung betreiben (2013: Prof. Clemens Glaubitz, Festkörper-NMR und DNP, Prof. Volker Dötsch, Lösungsmittel-NMR, Prof. Peter Günter, Computergestützte NMR-Spektroskopie, Prof. Thomas Prisner, EPR und DNP, Prof. Harald Schwalbe, Lösungsmittel-NMR, Prof. Jens Wöhnert, Lösungsmittel-NMR).

Das BMRZ umfasst *NMR- und EPR-Geräte mit ausgewiesener Spezifikation gemäß Anlage 1.*

Als *Nutzer* wird eine Forschergruppe aus einem oder mehreren Forschern bezeichnet, die Zugang zu den NMR-Geräten des BMRZs innerhalb eines Forschungsprojekts erhalten. Die Forschergruppe wird von einem Verantwortlichen geführt, der auch die Inhalte des

durchzuführenden Forschungsprojekts bestimmt und für die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis gemäß den Leitlinien der DFG<sup>1</sup> verantwortlich ist.

Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

## *II. Verpflichtungen des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz*

Das BMRZ bietet Nutzern Zugang zu NMR-Geräten an, deren Leistung dem ausgewählten Gerätetyp und dem der technischen Zusatzausstattung entsprechen (spezifiziert in Anlage 1). Die Gerätemanager des BMRZ führen in regelmäßigen Abständen Leistungskontrollen der NMR-Geräte an Standardproben durch und optimieren entsprechende Geräteparameter, die die technischen Voraussetzungen für NMR-Messungen in möglichst guter Qualität gewährleisten sollen. Für die Durchführung von NMR-Messungen fallen Kosten an, die vom Nutzer bezahlt werden müssen. Diese Kosten sind in entsprechenden Kategorien pauschaliert und werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung detailliert aufgeführt.

Im Rahmen dieser Nutzerordnung werden folgende wissenschaftliche Ansprechpersonen benannt:

Prof. Clemens Glaubitz      Geschäftsführender Direktor des BMRZ  
Büro: N202/006  
Telefon: 069/798-29927  
E-Mail: [glaubitz@chemie.uni-frankfurt.de](mailto:glaubitz@chemie.uni-frankfurt.de)

Dr. Christian Richter      Wissenschaftliche Ansprechperson für  
Lösungsmittel-NMR  
Büro: N160/315  
Telefon: 069/798-29137  
E-Mail: [ric@nmr.uni-frankfurt.de](mailto:ric@nmr.uni-frankfurt.de)

Dr. Frank Löhrl      Wissenschaftliche Ansprechperson für  
Lösungsmittel-NMR  
Büro: N230/123  
Telefon: 069/798-29627  
E-Mail: [murph@bpc.uni-frankfurt.de](mailto:murph@bpc.uni-frankfurt.de)

Dr. Johanna Baldus      Wissenschaftliche Ansprechperson für Festkörper-  
NMR/DNP  
Büro: N202/003  
Telefon: 069/798-29930  
E-Mail: [j.baldus@em.uni-frankfurt.de](mailto:j.baldus@em.uni-frankfurt.de)

---

<sup>1</sup>[http://www.dfg.de/download/pdf/dfg\\_im\\_profil/reden\\_stellungnahmen/download/empfehlung\\_wiss\\_praxis\\_0198.pdf](http://www.dfg.de/download/pdf/dfg_im_profil/reden_stellungnahmen/download/empfehlung_wiss_praxis_0198.pdf)

Dr. N.N.

Wissenschaftliche Ansprechperson für EPR und  
Lösungsmittel-DNP  
Büro: N140  
Telefon: 069/798-  
E-Mail:

### *III. Voraussetzungen für den Zugang, Auswahlverfahren eines Nutzers und Durchführung der Nutzung*

Antragsberechtigt für einen Zugang sind Nutzer, die an einer deutschen wissenschaftlichen Forschungseinrichtung beschäftigt sind. Nutzer im Sinne von Auftragsforschung können auch Wissenschaftler an Firmen sein, die innerhalb der Bundesrepublik Deutschland registriert sind. Hierbei ist die Zivilklausel der Grundordnung der Goethe-Universität<sup>2</sup> zu beachten.

Nutzer müssen einen Antrag an die benannten wissenschaftlichen Ansprechpersonen stellen. Die Einreichung einer evaluationsfähigen Projektskizze in Schriftform ist in jedem Fall erforderlich, diese kann bevorzugt über elektronische Kommunikationsmedien erfolgen.

Der Regelfall für den Zugang zu den NMR-Geräten des BMRZ ist die wissenschaftliche Zusammenarbeit. Dies ist mit der Komplexität der experimentellen Durchführung wie auch den zeitintensiven Messungen begründet.

Als Ausnahme kann Nutzern ein eigenverantwortlicher Zugang zu dem NMR/EPR-Gerät gewährt werden, der Kenntnisstand kann z.B. durch eigene Publikationen nachgewiesen sein. Der eigenverantwortliche Zugang wird bei den pauschalierten Kosten (Anhang 2) gesondert berücksichtigt.

Die wissenschaftliche Ansprechperson beurteilt die technische bzw. wissenschaftliche Durchführbarkeit und legt den Antrag dem Beirat des BMRZ zur Entscheidung vor. Dieser Beirat besteht aus dem Vorstand des BMRZ und Repräsentanten von DFG geförderten und nicht DFG geförderten Verbundprojekten. Im Falle einer positiven Evaluierung benennt der Beirat des BMRZ das NMR/EPR-Gerät, an dem die Messungen durchgeführt werden wie auch die Dauer der Nutzung. Die Evaluation dauert maximal 10 Arbeitstage.

---

<sup>2</sup> vgl. Präambel der Grundordnung der Goethe-Universität: <http://www.satzung.uni-frankfurt.de/2013/Grundordnung-der-Johann-Wolfgang-Goethe-Universitaet-Frankfurt-am-Main-Stiftung-des-oeffentlichen-Rechts.pdf>

Die wissenschaftliche Ansprechperson einigt sich mit dem Nutzer auf einen Termin für den Zugang zu dem benannten Gerät. Der Termin richtet sich nach der Verfügbarkeit des benannten Gerätes, wobei BMRZ-interne Messungen Vorrang haben, und nach den Möglichkeiten des Nutzers, die Probe herzustellen und anzuliefern. Für den Fall, dass mehrere Nutzer sich um einen Zugang zu einem NMR/EPR-Gerät beworben haben, erhält dasjenige Projekt den Vorzug, welches die Projektskizze als erstes eingereicht hat.

Für den Fall, dass Unstimmigkeiten zwischen dem Beirat des BMRZ und Nutzern über Nutzungszeitvergabe bestehen, entscheidet der geschäftsführende Direktor des BMRZs über die Nutzung.

Grundsätzlich werden die Messungen durch das geschulte Personal des BMRZs durchgeführt, diese sind entweder die wissenschaftlichen Ansprechpersonen oder von ihnen benannte Mitglieder des BMRZ. In Ausnahmefällen kann es sehr erfahrenen Nutzern gewährt werden, selbst Messungen durchzuführen. Eine vorherige Schulung und eine Einweisung in ein Gerät durch die wissenschaftliche Ansprechperson ist dafür notwendig. Die Erlaubnis, eigenständige Messungen durchzuführen, kann jederzeit ohne Angabe von Gründen widerrufen werden.

Das BMRZ verpflichtet sich, Anträge auf Nutzung, deren Evaluierung und die sich anschließende Nutzungszeitvergabe zu dokumentieren. Gemäß den DFG-Empfehlungen zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis müssen diese Unterlagen mindestens 10 Jahre aufbewahrt werden.

#### *IV. Datensicherung und Datenweitergabe*

Nach Abschluss der Nutzungszeit leiten die Mitarbeiter des BMRZs die Primärdaten umgehend weiter, die von der Probe des Nutzers aufgenommen worden sind. Dies kann durch Versenden von elektronischen Datenträgern geschehen oder über gesicherte Datenfernübertragung. Das BMRZ verpflichtet sich, für einen Zeitraum von einem Jahr die Primärdaten für den Nutzer zu sichern und die Weitergabe zu ermöglichen.

Der Nutzer wird 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 dieser Primärdaten obliegt dem Nutzer.

#### *V. Datenanalyse, Urheberschaft und Veröffentlichungen*

Das BMRZ ist für die Qualität der Primärdaten, wie sie durch die Probenbeschaffenheit bedingt ist, nicht verantwortlich. Das BMRZ gewährleistet nur die technischen Voraussetzungen (siehe II. - Verpflichtungen des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz).

Auf der Grundlage einer wissenschaftlichen Zusammenarbeit, teilen sich Nutzer und wissenschaftliche Ansprechperson die Verantwortung für die Primärdaten bzw. deren Analyse. Die wissenschaftlichen Ansprechpersonen geben volle Unterstützung während der Datenanalyse. Je nach Erfahrungsgrad des Nutzers bezüglich Biomolekularer NMR/EPR-Spektroskopie kann die Datenanalyse im Rahmen der wissenschaftlichen Zusammenarbeit auch von den Mitarbeitern des BMRZs vollständig übernommen werden. Daher teilen sich Nutzer und Mitarbeiter die Urheberschaft über die Primärdaten und deren Analyse.

Die Autorenschaft soll sich im Falle einer Veröffentlichung an der DFG-Empfehlung zur Sicherung der guten wissenschaftlichen Praxis orientieren. Durch die wesentlichen Beiträge zur experimentellen Durchführung, zur Datenauswertung bzw. der ~Interpretation werden die Mitarbeiter Teil der Autorenliste. Die Ausnahme stellt hier der eigenverantwortliche Zugang durch sehr erfahrene Nutzer.

#### *VI. Pauschalierte Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten*

Die pauschalierten Kosten für den Zugang zu den NMR-Geräten des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz der Goethe Universität Frankfurt am Main werden im Anhang 2 an diese Nutzerordnung geregelt.

## *VII. Gültigkeit*

Die Nutzungsordnung tritt mit Unterschrift des geschäftsführenden Direktors des BMRZ in Kraft und wird vom Sprecher der Geräteanager des BMRZ bezeugt. Die Nutzerordnung bleibt bis zu ihrem Widerruf gültig.

Frankfurt, den

21. Mai 2013

---

Prof. Clemens Glaubitz

(Geschäftsführender Direktor des BMRZ)

---

Dr. Johanna Baldus

(Sprecherin der benannten Geräteanager)

**Anlage 1 zur Nutzerordnung für NMR/EPR-Geräte innerhalb des Biomolekularen  
Magnetresonanz Zentrums der Goethe Universität Frankfurt am Main -  
Gerätespezifikationen**

Das BMRZ umfasst NMR-Geräte mit folgender Spezifikation (Stand 21.05.2013):

<b>950 MHz Bruker (Avance III)</b>	<b>HH001506 (Raum N202-10)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2007
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TCI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal + $^2\text{H}$ Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Lühr
<b>900 MHz (Bruker Avance I)</b>	<b>HH007499 (Raum N202-10)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZGRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{31}\text{P}$ XYZGRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD MAS - TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal + $^2\text{H}$ Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Lühr
<b>WB-850 MHz (Bruker Avance III)</b>	<b>HH00005905 (Raum N202-11)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2008
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HCN 3.2mm MAS HCN 3.2mm MAS HX ( $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ )
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

<b>800 MHz (Bruker Avance I)</b>	<b>HH007599 (Raum N201-08)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2001 Konsole, 1995 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZGRD 5 mm QXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{15}\text{N}$ , 31P XYZ-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + $^2\text{H}$ Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
<b>800 MHz (Bruker DRX)</b>	<b>HH001499 (Raum N165/3108)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 1999
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ , $^{31}\text{P}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Sridhar Sreeramulu
<b>700 MHz (Bruker Avance I)</b>	<b>HH007201 (Raum N201-08)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + $^2\text{H}$ Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Löhr
<b>WB-600 MHz (Bruker Avance I)</b>	<b>HH008601 (Raum N202-11)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HXY 4mm MAS HXY efree 4mm MAS HX ( $^{15}\text{N}$ - $^{31}\text{P}$ ) 4mm MAS HFX static flat coil HX
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

<b>600 MHz (Bruker Avance III)</b>	<b>HH001806 (Raum N201-08)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2006 Konsole, 1995 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD 5 mm TCI cryo $^1\text{H}$ , $^{31}\text{P}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + $^2\text{H}$ Entkopplung Kopplung an Laserpulse möglich
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Lühr
<b>600 MHz (Bruker Avance II)</b>	<b>HH001293 (Raum N201-09)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2003 Konsole, 1986 Magnet
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TCI cryo $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + $^2\text{H}$ Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Frank Lühr
<b>600 MHz (Bruker DRX mit BACS60 Probenwechsler)</b>	<b>HH001499 (Raum N165/3108)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 1999
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ Z-GRD
Weitere Spezifikationen:	Vierkanal
Zuständigkeit:	Dr. Christian Richter, Dr. Sridhar Sreeramulu
<b>500 MHz (Bruker Avance II)</b>	<b>HH002293 (Raum N201-09)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	2003 Konsole, Magnet 1993
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Frank Lühr

<b>500 MHz (Bruker DRX)</b>	<b>HH003594 (Raum N201-09)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	1995 Konsole, 1985(M)
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	5 mm TXI $^1\text{H}$ , $^{15}\text{N}$ , $^{13}\text{C}$ XYZ-GRD
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal + $^2\text{H}$ Entkopplung
Zuständigkeit:	Dr. Frank Löhr
<b>WB-400 MHz (Bruker Avance II) – DNP fähig</b>	<b>HH006605 (Raum N202-11)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Lösungsmittel-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2006
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	Mehrere spezielle Probenköpfe zur Entwicklung von Lösungsmittel-NMR-DNP Methoden
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus
<b>WB-400 MHz (Bruker Avance II) – DNP fähig</b>	<b>HH008701 (Raum N202-11)</b>
Aggregatzustand der Probe:	Festkörper-NMR
Anschaffung / Inbetriebnahme:	Konsole & Magnet 2002
Durchschnittliche Betriebsdauer:	8600 Stunden pro Jahr
Verfügbare Probenköpfe:	4mm MAS HXY 3.2mm Cryo-MAS HCN with wave guide for DNP 7mm MAS HX ( $^{29}\text{Si}$ - $^{31}\text{P}$ ) static flat coil HXY
Weitere Spezifikationen:	Dreikanal
Zuständigkeit:	Dr. Johanna Baldus

---

**180 GHz G-Band Spektrometer  
(Eigenbau)**

Anschaffung / Inbetriebnahme:  
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr  
Spezifikationen:  
Weitere Spezifikationen:  
Zuständigkeit: Dr. N.N.

---

**Bruker Elexsys E580 X- und Q-Band  
Spektrometer**

Anschaffung / Inbetriebnahme:  
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr  
Spezifikationen:  
Weitere Spezifikationen:  
Zuständigkeit: Dr. N.N.

---

**Bruker cw ESP300 X-Band  
Spektrometer**

Anschaffung / Inbetriebnahme:  
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr  
Spezifikationen:  
Weitere Spezifikationen:  
Zuständigkeit: Dr. N.N.

---

**EPR S-Band Spektrometer  
(Eigenbau)**

Anschaffung / Inbetriebnahme:  
Durchschnittliche Betriebsdauer: 8600 Stunden pro Jahr  
Spezifikationen:  
Weitere Spezifikationen:  
Zuständigkeit: Dr. N.N.

**Anlage 2 zur Nutzerordnung für Kernspinresonanz (NMR) Geräte innerhalb des Zentrums für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) der Goethe Universität Frankfurt am Main – Pauschalierte Kosten**

Das Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ) erhebt für den Zugang zu den in Anlage 1 spezifizierten NMR-Geräten folgende pauschalierte Kosten (Stand 21.05.2013). Unabhängig von der unterhalb dargestellten Einteilung können Nutzer bei der DFG pauschalierte Kosten in Höhe von maximal 32.000 € pro Jahr beantragen. Die universitätsintern abgerechneten Kosten können für diejenigen Arbeitsgruppen von der dargestellten Tabelle abweichen, falls sie sich bei der Erstanschaffung eines NMR/EPR-Gerätes oder bei laufenden jährlichen Kosten beteiligt haben.

	<b>Feldstärke 500 – 600 MHz</b>	<b>Feldstärke 700 – 800 MHz</b>	<b>Feldstärke = 900 MHz (bzw. 850 MHz WB)</b>
<b>Nutzung als wissenschaftliche Zusammenarbeit</b>	Nutzungsdauer an NMR-Geräten bis zu 7 Tagen:		
	960 €/Tag (40 €/h)*	1.440 €/Tag (60 €/h)*	1.920 €/Tag (80 €/h)*
	Nutzungsdauer an NMR-Geräten zwischen 8 und 20 Tagen:		
	800 €/Tag (33,34 €/h)*	1.200 €/Tag (50 €/h)*	1.600 €/Tag (66,67 €/h)*
	Nutzungsdauer an NMR-Geräten von 21-31 Tagen (Festpreis)		
	16.000 € (21,51 €/h)**	24.000 € (32,86 €/h)**	32.000 € (43,02 €/h)**

\* zur Information, Kosten werden tageweise abgerechnet.

\*\* zur Information, bis 31 Tage Nutzungsdauer werden die Kosten tageweise abgerechnet, bei darüber hinaus erfolgender Nutzung können keine weiteren Kosten beantragt werden.