

Nutzungsordnung der Chemical and Environmental Analytics Core Facility an der Technischen Hochschule Köln

Version 1.0 vom 26.11.2024

Präambel

Die **Chemical and Environmental Analytics Core Facility** (ChEAF) ist eine Einrichtung an der Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften der TH Köln. Das Ziel der ChEAF ist es, eine interdisziplinäre und fakultätsübergreifende Forschung mit dem Schwerpunkt im Bereich der Wasser- und Umweltanalytik, der Wirkstoffforschung sowie Bioökonomie an der Hochschule zu unterstützen.

1. Die ChEAF bietet als Analytikgerätezentrum einen Service zur qualitativen und quantitativen Analytik von nieder- und höhermolekularen organischen Substanzen. Neben der Kernresonanzspektroskopie (NMR) werden vor allem massenspektrometrische Methoden (GC-/LC-gekoppelt) angeboten. Weitere Geräte, Techniken und Methoden werden in Zukunft eingebunden ([siehe ChEAF Homepage](#)). Die aktuell nutzbare Geräteausstattung ist im Anhang II Geräteausstattung dieser Ordnung aufgelistet.
2. Die Organisation und Verwaltung der ChEAF wird in der Geschäftsordnung geregelt.
3. Die Nutzungsordnung folgt den Hinweisen zu Gerätenutzungskosten und zu Gerätezentren und den Leitlinien zu den Anforderungen an Forschungsinfrastrukturen der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

§ 1 Kontakt

Forschende oder externe Einrichtungen, die an der Nutzung der Serviceleistungen der ChEAF der TH Köln interessiert sind, stellen eine Anfrage per E-Mail an cheaf@th-koeln.de. Hierbei soll ein Termin mit der organisatorischen Leitung der Einrichtung vereinbart werden, um den wissenschaftlichen Hintergrund des jeweiligen Projekts, die geeignete Analysetechnik sowie Zeit- und Kostenaspekte zu besprechen. Projektspezifische Angaben werden dabei stets streng vertraulich behandelt. Eine Auflistung der Kontaktpersonen findet sich in Anhang I Kontaktpersonen.

§ 2 Nutzung des Gerätezentrums

1. Der Service der ChEAF steht allen Forschenden der TH Köln sowie externen Nutzerinnen und Nutzern zur Verfügung und ist grundsätzlich für die akademische Forschung vorgesehen. Die Nutzung erfolgt im Rahmen dieser Nutzungsordnung.
2. Die Gebühren sind in der Gebührenordnung in Anhang III Gebührenordnung geregelt. Die Richtlinien bezüglich Publikationen (siehe § 8 Publikationen) gelten unabhängig von den Nutzungsgebühren.

3. Eine externe Nutzung außerhalb der TH Köln zum Beispiel durch Auftraggeber*innen aus der Industrie oder Wissenschaftler*innen anderer Hochschulen und Forschungsinstitute ist möglich, sofern freie Kapazitäten vorhanden sind. Hierzu ist jeweils eine vertragliche Regelung zwischen der TH Köln und dem Auftraggebenden notwendig. Die Kosten werden unter Zugrundelegung einer Vollkostenrechnung geltend gemacht.
4. Die ChEAF der TH Köln behält sich das Recht vor Proben von externen Nutzerinnen und Nutzern abzulehnen.

§ 3 Priorisierung der Probenanalyse

1. Die Bearbeitung der Proben erfolgt nach Zeitpunkt des Probeneingangs, sofern keine volle Auslastung erreicht ist. Übersteigt die Nachfrage die Kapazität erfolgt die Bearbeitung der Proben je nach Zeitaufwand und Gruppenzugehörigkeit nach folgender Priorisierung (Auflistung mit abnehmender Priorität):
 - a.) Wissenschaftler*innen der Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften der TH Köln
 - b.) Wissenschaftler*innen anderer Fakultäten der TH Köln
 - c.) Externe Nutzer*innen
2. Dringende Proben, z.B. zur Einhaltung von Publikations- oder Revisionssterminen, werden vorrangig bearbeitet.
3. Im Falle von Konflikten bei der Nachfrage entscheidet die wissenschaftliche Leitung der ChEAF über die Priorisierung der Proben.

§ 4 Gerätebetrieb

1. Die Leistungen der ChEAF der TH Köln sind unterteilt in den *Anwendungs-* und *Servicebetrieb*.
 - a.) Im *Anwendungsbetrieb* übernehmen eingewiesene Nutzer*innen unterstützt durch das Personal der ChEAF weitgehend selbstständig die Probenvermessung. Die Gewinnung und Aufbereitung von Probenmaterial erfolgt dabei in der Regel eigenverantwortlich durch die Nutzenden und grundsätzlich in den Arbeitsräumen und Laboreinrichtungen der Nutzenden.
 - b.) Im *Servicebetrieb* wird die Probenmessung durch Mitarbeiter*innen der ChEAF der TH Köln übernommen. Dabei erfolgt im Vorfeld eine wissenschaftliche Beratung zur Versuchsplanung und Probenvorbereitung mit dem wissenschaftlichen Personal der ChEAF. Je nach zeitlicher und personeller Kapazität der ChEAF kann auf Wunsch auch die Probenaufarbeitung und -auswertung in den Service aufgenommen werden.
2. Wird selbstständiges Messen durch autorisiertes Personal an einem Gerät genehmigt, so ist der *Anwendungsbetrieb* nur nach einer spezifischen Einweisung für dieses Gerät gestattet. Es ist prinzipiell untersagt, grundlegende Einstellungen und Konfigurationen eines Gerätes ohne eine ausdrückliche Genehmigung durch das Personal der ChEAF vorzunehmen.
3. Die Nutzer*innen sind verpflichtet, die überlassenen Geräte sachgemäß und pfleglich zu behandeln. Das Gerät sollte dem nachfolgenden Nutzenden in seinem ursprünglichen Zustand überlassen werden. Die eigenen Probengefäße sind nach erfolgter Messung aus den Geräten zu entfernen.

4. Im Falle von technischen Defekten, Software-Problemen oder Ähnlichem, muss die nutzende Person ihre Arbeiten sofort unterbrechen und ist verpflichtet, das zuständige Personal der ChEAF umgehend in Kenntnis zu setzen. Es ist nicht erlaubt, eigenständig Reparaturversuche zu unternehmen.
5. Für Schäden an Geräten, die nachweislich durch unsachgemäße Bedienung entstanden sind, ist der Nutzende bzw. die zugehörige Arbeitsgruppe oder Einrichtung verantwortlich. Diese müssen die entstandenen Reparaturkosten übernehmen. Das Personal der ChEAF ist in begründeten Fällen berechtigt, den Nutzenden von einer weiteren Gerätebedienung auszuschließen.
6. Für die Einhaltung der geltenden gesetzlichen Bestimmungen (u. a. Gentechnikverordnung, Gefahrstoffverordnung, Strahlenschutzverordnung) sind die Nutzer*innen eigenständig verantwortlich.

§ 5 Terminvereinbarung

1. Messungen in der NMR-Abteilung erfolgen nach einem intelligenten Probenmanagement unter Berücksichtigung der Messdauer, um eine optimale Nutzung der Geräte und einen zeitnahen Service zu gewährleisten. Prinzipiell werden Proben in der Reihenfolge des Eingangs bearbeitet. Messungen mit langen Messzeiten werden auf die Nacht oder das Wochenende verschoben, um einen effizienten und zeitnahen Service zu garantieren. Für Spezial-Messungen, die nicht in der Automation erfolgen können (Hochtemperatur, Tieftemperatur, selektive Experimente, zeitkritische Experimente) ist eine vorherige Terminabsprache mit dem technischen Personal erforderlich.
2. Messungen in der Massenspektrometrie-Abteilung erfolgen nach einem intelligenten Probenmanagement. Prinzipiell werden Proben in der Reihenfolge des Eingangs bearbeitet. Für Messreihen mit größerem Probenumfang (≥ 10 Messungen am Stück), langen Messzeiten oder Spezialmessungen ist mit dem Personal der ChEAF eine vorherige Terminabsprache erforderlich.

§ 6 Probenabgabe im Servicebetrieb

1. Die Probenübergabe an die NMR-Abteilung erfolgt nach Absprache mit dem Personal der ChEAF. Die Probenvorbereitung obliegt soweit nicht anders vereinbart den Nutzerinnen und Nutzern. Die Proben werden in einem geeigneten Lösungsmittel gelöst, in ein passendes NMR-Röhrchen eingefüllt und mit einem Auftragszettel ([siehe ChEAF Homepage](#)) versehen. Hierbei werden die Probenbezeichnung und die Kontaktdaten der auftraggebenden Person (Name, Fakultät/Abteilung, Telefonnummer, E-Mail-Adresse, Name der Arbeitsgruppenleitung) vermerkt.
2. Die Probenübergabe an die Massenspektrometrie-Abteilung erfolgt nach Absprache mit dem Personal der ChEAF. Die Probengefäße müssen eindeutig und leserlich mit einem Permanentmarker beschriftet werden. Die auftraggebende Person muss zudem einen Auftragszettel unter Angabe der Probenbezeichnung, der entsprechenden Probenmatrix und eigenen Kontaktdaten (Name, Fakultät/Abteilung, Telefonnummer, E-Mail-Adresse und Name der Arbeitsgruppenleitung) bereitstellen. Die Probenbezeichnungen auf dem Auftragszettel müssen mit der Beschriftung der Probengefäße übereinstimmen.

3. Die Probenbezeichnung sollte eindeutig sein ohne Verwendung von Umlauten, Sonderzeichen und Leerzeichen.
4. Die auftraggebende Person hat auf von den Proben ausgehenden Gefahren im Vorfeld hinzuweisen.

§ 7 Datenspeicherung und –sicherung

1. Die Messdaten werden direkt auf den Messrechnern gespeichert, durch die Administratoren verwaltet und über einen Datenaustauschserver für die Nutzenden verfügbar gemacht. Der Datenspeicherpfad und der Umgang mit den erhobenen Forschungsdaten erfolgt hierbei gemäß dem aktuellen Datenmanagementplan der Fakultät. Zur Datensicherung werden regelmäßig Backups der Daten durchgeführt, um einen Datenverlust weitestgehend auszuschließen. Alle Daten werden für zehn Jahre nach der Messung gespeichert.
2. Im Rahmen von Messungen im *Servicebetrieb*, die durch das Personal der ChEAF durchgeführt werden, können die Daten den Nutzer*innen auf Wunsch per Email zur Verfügung gestellt werden.

§ 8 Publikationen

Um auch in Zukunft hoch moderne Analysetechniken durch die ChEAF als Serviceeinrichtung an der TH Köln anbieten zu können, ist eine Förderung durch die DFG ist essentiell. Da die DFG Core Facilities nach der Anzahl der Ko-Autorenschaften, Danksagungen und Zitationen bewertet und fördert, führt die ChEAF der TH Köln Analysen immer auf der Grundlage einer wissenschaftlichen Zusammenarbeit durch.

1. Werden Daten oder Bildmaterial in Publikationen einer Arbeitsgruppe verwendet, die an Geräten der ChEAF erzeugt oder als Service erstellt wurden, muss die „Chemical and Environmental Analytics Core Facility“ der TH Köln namentlich in der Danksagung erwähnt werden. Dies schließt Publikationen, Präsentationen und wissenschaftliche Abschlussarbeiten ein. Textvorschläge für eine Danksagung sind in Anhang IV Danksagungen zusammengestellt.
2. Leisten Mitarbeiter*innen der ChEAF einen erheblichen wissenschaftlichen Input (z.B. ausführliche Beratung, Versuchsplanung, Methodenentwicklung, zeitintensive Auswertungen) zu Projekten, die über eine Routinemessung hinausgehen, wird dies in Form einer Ko-Autorenschaft ungeachtet der Gebührenpflichtigkeit der Serviceleistungen in resultierenden Publikationen honoriert. Hierbei finden die Kriterien der „*Ordnung über die Grundsätze zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis an der Technische Hochschule Köln*“ Anwendung ([siehe Ordnung](#)).
3. Alle unter Absatz 1 und Absatz 2 genannten Publikationen müssen dem Vorstand der ChEAF mitgeteilt werden.

§ 9 Änderungen der Ordnungen

Eine Änderung der Nutzungsordnung des Gerätezentrums wird durch den Vorstand des Gerätezentrums beschlossen.

§ 10 Anerkennung dieser Nutzungsordnung

Messungen an Geräten der ChEAF der TH Köln sind nur möglich, wenn die Forschenden, die Arbeitsgruppenleitung oder eine andere zeichnungsberechtigte Person die Nutzungsordnung akzeptiert hat. Hierzu muss die zugehörige Einverständniserklärung (siehe Einverständniserklärung zur Nutzungsordnung) unterschrieben und der organisatorischen Leitung übermittelt werden. Im Falle eines Verstoßes gegen die Nutzungsordnung kann die betreffende Arbeitsgruppe oder die auftraggebende Einrichtung von einer weiteren Nutzung der Serviceeinrichtung ausgeschlossen werden.

Die Nutzungsordnung in der Version 1.0 wurde am 26.11.2024 durch den Vorstand des Gerätezentrums genehmigt.

Einverständniserklärung zur Nutzungsordnung

Hiermit bestätige ich, dass ich die aktuelle Nutzungsordnung der Chemical and Environmental Analytics Core Facility der TH Köln gelesen habe und diese anerkenne.

Ort, Datum

Titel und Name in Druckbuchstaben

Unterschrift

Anhang I Kontaktpersonen

Viktoriiia Wagner, Prof. Dr.

wissenschaftliche Leitung ChEAF
Raum 2105
Tel.: +49 214-32831-4737
Email: viktoriiia.wagner@th-koeln.de

Lea Hartmann, Dr. rer. nat.

organisatorische Leitung ChEAF
Raum 1105
Tel.: +49 214-32831-4653
Email: lea.hartmann@th-koeln.de

Eva Rausch, M. Sc.

wissenschaftliche Mitarbeiterin
Raum 1108
Tel.: +49 214-32831-4637
Email: Eva.rausch@th-koeln.de

Marcus Schief, Diplom

wissenschaftlicher Mitarbeiter
Raum 1113
Tel.: 49 214-32831-4622
Email: marcus.schief@th-koeln.de

Anhang II Geräteausstattung

Kernresonanzspektroskopie

<i>400 MHz-NMR</i>	Avance III HD – 400 MHz NMR-Spektrometer ausgerüstet mit einem Breitband-Probenkopf zur Bestimmung von ^1H , ^{13}C , ^{19}F und ^{31}P -Kernen und Autosampler (Bruker)
--------------------	--

Flüssigchromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie

<i>LC-MS</i>	Nexera UHPLC gekoppelt mit einem PDA-Detektor und einem LCMS-2020 Single-Quadrupol-Massenspektrometer (Shimadzu)
<i>LC-Orbitrap-HRMS</i>	Vanquish Flex UHPLC gekoppelt mit einem PDA-Detektor und einem hochauflösenden Exploris 240 Orbitrap-Massenspektrometer (Thermo Scientific)

Gaschromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie

<i>GC-MS</i>	GC-2012 Plus Gaschromatograph gekoppelt mit einem FID-Detektor und GCMS-QP2020 Massenspektrometer (Shimadzu)
<i>TD-GC-TOF</i>	7890 GC System Gaschromatograph (Agilent Technologies) gekoppelt mit einem BenchTOF-Evolve Flugzeit-Massenspektrometer mit UNITY-xr Thermodesorptionseinheit (beides Markes International)

Anhang III Gebührenordnung

§ 1 Grundsätze

1. Diese Gebührenordnung gilt für Forschende der Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften, für fakultätsfremde Forschende der TH Köln sowie externe Wissenschaftler*innen anderer Hochschulen und Forschungsinstitute oder externe Auftraggeber*innen aus der Industrie.
2. Bei externen Aufträgen wird zwischen akademischer Forschung, die durch öffentliche Mittel finanziert wird, und industrieller Forschung unterschieden. Hierbei werden Aufträge aus der Industrie als Dienstleistung abgerechnet.
3. Für fakultätsfremde Forschende der TH Köln sowie externe Wissenschaftler*innen anderer Hochschulen und Forschungsinstitute oder externe Auftraggeber*innen aus der Industrie ist die Nutzung des Gerätezentrums nur im *Servicebetrieb* möglich.
4. Für interne Forschende der Fakultät für Angewandte Naturwissenschaften, für fakultätsfremde Forschende der TH Köln sowie externe Wissenschaftler*innen anderer Hochschulen und Forschungsinstitute oder externe Auftraggeber*innen aus der Industrie fallen unterschiedliche Gebühren an (siehe § 2 Gebühren).
5. Die Betriebskosten (Verbrauchsmaterialien, Wartungskosten, etc.) werden anteilig auf alle Nutzer*innen umgelegt, um den Betrieb der Serviceeinrichtung voll einsatzfähig zu erhalten.

§ 2 Gebühren

1. Jedem/r Nutzer*in werden die angefallenen Gebühren entsprechend der Messzeit pro Halbjahr in Rechnung gestellt. Die Abrechnung erfolgt dabei im Halbjahr nach den durchgeführten Messungen. Auf Anfrage wird eine Zwischenrechnung erstellt.
2. Die in der folgenden Tabelle gelisteten Preise beziehen sich jeweils auf eine Stunde Messzeit. Bei den Preisen handelt es sich um Nettopreise.

Gerät	<i>Anwendungsbetrieb</i>	<i>Servicebetrieb</i>	
	Fakultät 11	Akademische Forschung (öffentliche Mittel)	Industrielle Forschung (Dienstleistung)
NMR	10 €	140 €	380 €
LC-MS	40 €	170 €	400 €
LC-HRMS	60 €	190 €	keine Nutzung möglich
GC-MS	40 €	160 €	390 €
TD-GC-TOF	40 €	160 €	410 €

3. Im Fall der NMR-Spektroskopie sind in den gelisteten Gebühren im *Servicebetrieb* folgende Positionen enthalten:
 - a.) Probenbearbeitung (einschließlich NMR-Röhrchen und NMR-Lösungsmittel)
 - b.) Spektrenbearbeitung (Phasen- und Basislinienkorrektur, Integration u.ä.) ohne Strukturaufklärung
 - c.) Übersichtsspektren werden über einen Datenaustauschserver zur Verfügung gestellt

- d.) Auf Wunsch können die Ergebnisse dem Nutzenden per Email (elektronische Files) oder per Briefpost (Papierausdrucke) zugesendet werden
 - e.) Speicherung der elektronischen Messergebnisse
4. Im Fall der Massenspektrometrie sind in den gelisteten Gebühren folgende Positionen enthalten:
- a.) Probenbearbeitung (ohne Probenaufarbeitung) und Probenmessung mit Standardmethoden ohne Methodenentwicklung
 - b.) Bei bekannten Verbindungen werden Chromatogramme und/oder Massenspektren über einen Datenaustauschserver zur Verfügung gestellt
 - c.) Auf Wunsch können die Ergebnisse dem Nutzenden per Email (elektronische Files) oder per Briefpost (Papierausdrucke) zugesendet werden
 - d.) Speicherung der elektronischen Messergebnisse
5. Bei speziellen massenspektrometrischen Fragestellungen, die z.B. eine aufwendige Probenaufarbeitung oder besondere analytische Bedingungen erfordern, werden die hierzu benötigte Verbrauchsmaterialien nach vorheriger Absprache mit dem Personal der ChEAF (analytische Säulen, Referenzstandards, Festphasenextraktion-Säulen, etc.) durch den Servicenutzenden beschafft. Die Kosten obliegen dabei dem Nutzenden.
6. Erfordern spezielle massenspektrometrische Fragestellungen eine aufwendige Methodenentwicklung oder eine aufwendige Probenauswertung (z.B. Non-Targeted Analysen, Quantifizierungen, Strukturvorschläge etc.) fallen zusätzliche Kosten an.

Anhang IV Danksagungen

Im Folgenden finden Sie Vorlagen für eine Danksagung in Deutsch und in Englisch.

1. Deutsch

- a.) Ich danke/ Wir danken der Chemical and Environmental Analytics Core Facility (ChEAF) der TH Köln für ihre Unterstützung.
- b.) Ich danke/Wir danken der ChEAF der TH Köln für die Aufnahme der massenspektrometrischen und NMR-spektroskopischen Daten.
- c.) Ich danke/Wir danken der ChEAF der TH Köln für die Aufnahme der massenspektrometrischen Daten.
- d.) Ich danke/Wir danken dem ChEAF der TH Köln für die Aufnahme der NMR-spektroskopischen Daten.

2. Englisch

- a.) I / We thank the Chemical and Environmental Analytics Core Facility (ChEAF) of TH Köln for their support.
- b.) Thanks to ChEAF of TH Köln for recording the mass spectrometric and the NMR spectroscopic data.
- c.) Thanks to ChEAF of TH Köln for recording the mass spectrometric data.
- d.) Thanks to ChEAF of TH Köln for recording the NMR spectroscopic data.

Im Falle der Nutzung von DFG-geförderten Geräte ist die Danksagung wie folgt zu ergänzen:

1. Deutsch

Zudem danke ich / danken wir der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Förderung des <Gerätebezeichnung> (<Grantnummer>).

2. Englisch

In addition, thanks to the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, German Research Foundation) for funding the <Gerätebezeichnung> (<Grantnummer>).

Die Gerätebezeichnung und Grantnummer kann folgender Tabelle entnommen werden.

Gerätebezeichnung		Geschäftszeichen
Deutsch	Englisch	
400 MHz-NMR	400 MHz NMR	INST 236/17-1
LC-Orbitrap-HRMS	LC-Orbitrap-HRMS	INST 236/31-1

Beispielhafte Formulierung der Danksagung in deutscher Sprache:

Ich danke der Chemical and Environmental Analytics Core Facility (ChEAF) der TH Köln für ihre Unterstützung. Zudem danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Förderung des 400 MHz-NMR (INST 236/17-1) und des LC-Orbitrap-HRMS (INST 236/31-1).

Beispielhafte Formulierung der Danksagung in englischer Sprache:

I thank the Chemical and Environmental Analytics Core Facility (ChEAF) of TH Köln for their support. In addition, thanks to the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, German Research Foundation) for funding the 400 MHz NMR (INST 236/17-1) and the LC-Orbitrap-HRMS (INST 236/31-1).