

**Nutzungskonzept für das
NMR-Gerätezentrum
Fachbereich Chemie und Pharmazie
an der Universität Münster**

Vorbemerkung:

Dieses Nutzungskonzept und die Organisation in Form eines NMR-Gerätezentrums hat sich über Jahre an der Universität Münster entwickelt. Die Zusammenfassung des Konzepts erfolgte nach intensiver Beratung. Beteiligt waren ausgewählte Hochschullehrer:innen aus allen Instituten des Fachbereichs, sowie die wissenschaftlichen Leiter:innen der verschiedenen Standorte der NMR-Spektroskopie der Universität Münster.

(Version vom 04.10.2023)

Inhaltsverzeichnis

Teil A: Organisation	3
A1: Allgemeine Beschreibung und Ansprechpersonen	3
A2: Nutzungsordnung	4
Teil B: Hochauflösende NMR-Spektroskopie	7
B1: Standort im Institut für Anorganische und Analytische Chemie	8
B2: Standort im Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie	9
B3: Standort im Organisch-Chemischen Institut	10
Teil C: Festkörper- und Diffusions-NMR-Spektroskopie	11
C1: Festkörper-NMR: AG Hansen, Institut für Physikalische Chemie	12
C2: Festkörper-, PFG-, Imaging und Hochauflösungs-NMR: MEET	12
C3: Gepulste Feldgradienten-NMR: AG Schönhoff, Institut für Physikalische Chemie	13
Anhang:	
NMR-Geräteliste	15
Preisliste	16
Unterschriftenliste	17

Beteiligte NMR-Abteilungsleiter:innen bzw. Leiter:innen der NMR-Arbeitsgruppen

Dr. K. Bergander (Organisch-Chemisches Institut)
Prof. Dr. M. R. Hansen (Institut für Physikalische Chemie)
Dr. A. Hepp (Institut für Anorganische und Analytische Chemie)
Dr. J. Köhler (Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie)
Prof. Dr. M. Schönhoff (Institut für Physikalische Chemie)

Zusätzlich beteiligte Hochschullehrer:innen:

PD Dr. Brunklaus (MEET, Helmholtz Institut Münster)
Prof. Dr. F. Glorius (Organisch-Chemisches Institut)
Prof. Dr. H.-U. Humpf (Institut für Lebensmittelchemie)
Prof. Dr. J. Müller (Institut für Anorganische und Analytische Chemie)
Prof. Dr. B. Wünsch (Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie)

Teil A Organisation

A1 Allgemeine Beschreibung

Der Fachbereich Chemie und Pharmazie der Universität Münster gehört mit derzeit 53 Arbeitsgruppen, davon 40 Professuren und 13 Nachwuchsgruppen, zu den größten Fachbereichen seiner Art in Deutschland. Innerhalb des Fachbereichs wurde eine schlagkräftige NMR-Analytik in Form eines NMR-Gerätezentrums ("*Core facility*") aufgebaut. Aufgrund der Größe des Fachbereichs und der teilweise stark differierenden Fragestellungen fiel die Entscheidung für einen dezentralen Betrieb an mehreren Standorten. Hochauflösende NMR-Spektroskopie von gelösten Proben wird an den Standorten im Institut für Anorganische und Analytische Chemie, im Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie, im MEET sowie im Institut für Organische Chemie durchgeführt. Festkörper- und Diffusions-NMR-Spektroskopie werden darüber hinaus in spezialisierten NMR-Arbeitsgruppen im Institut für Physikalische Chemie und im MEET betrieben. Alle Informationen zur Ausstattung und zu den angebotenen Messmethoden werden über das Internet bereitgestellt (**Tabelle 1**).

Tabelle 1: Links zu den Standorten mit den Informationen zur Ausstattung und Messmethoden, Ansprechpersonen

Schwerpunkte	NMR-Standort - Link	wissenschaftliche und technische Ansprechpersonen
Hochauflösende NMR	B1: Institut für Anorganische und Analytische Chemie	Dr. Hepp Tel. 0251 – 83 33147
	B2: Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie	Dr. Köhler Tel. 0251 – 83 32274
	B3: Organisch-Chemisches Institut	Dr. Bergander Tel. 0251 – 83 39976
Festkörper- und Diffusions-NMR	C1: Festkörper-NMR, Institut für Physikalische Chemie	Prof. Dr. Hansen Tel. 0251 – 83 29161
	C2: Festkörper-/Diffusions-NMR und Imaging, MEET	Dr. Wiemers-Meyer Tel. 0251 – 83 36829
	C3: Gepulste Feldgradienten-NMR, Institut für Physikalische Chemie	Prof. Dr. Schönhoff Tel. 0251 – 83 23419

A2 Nutzungsordnung

Verbindlichkeit

Die vorliegende Nutzungsordnung gilt für alle Personen, die NMR-Spektrometer des NMR-Gerätezentrums im Fachbereich 12 bzw. des MEET Batterieforschungszentrums der Universität Münster nutzen möchten. Beim MEET handelt es sich um eine zentrale wissenschaftliche Einrichtung der Universität Münster (vgl. Statut vom 23.05.2013, Amtliche Bekanntmachungen Universität Münster), die wissenschaftlich eng mit dem FB12 kooperiert.

Ansprechpersonen

Eine Aufstellung der Ansprechpersonen der dezentralen NMR-Standorte ist in **Tabelle 1** wiedergegeben. Sie sind innerhalb und außerhalb des Fachbereiches sehr gut vernetzt und treffen sich regelmäßig zum wissenschaftlichen und technischen Erfahrungsaustausch. Weiterhin bieten Sie Schulungskurse zum Betrieb von NMR-Spektrometern und Lehrveranstaltungen an.

Sie sind für folgende Punkte verantwortlich:

- Betrieb der in ihrem Verantwortungsbereich vorhandenen NMR-Geräte
- Organisation des Messbetriebes
- Vergabe und Dokumentation der Messzeit. Bei einer Überbuchung entscheiden sie in ihrer Abteilung über die Vergabe der Messzeit nach Dringlichkeit, wobei interne Messungen aus dem FB12 in der Regel eine höhere Priorität eingeräumt bekommen.
- Speicherung und Archivierung der Rohdaten
- Reparaturen und Ersatzbeschaffungen
- Einarbeitung des NMR-Personals und der Forschenden aus den Arbeitsgruppen an den NMR-Spektrometern

Ausstattung und Messangebot

Auf den Internetseiten der einzelnen Standorte des NMR-Gerätezentrums sind sowohl deren Ausstattung als auch deren mögliche NMR-Messungen zusammengestellt. Die entsprechenden Verknüpfungen zu den Internetseiten sind in **Tabelle 1** zu finden. In **Teil B (Hochauflösende NMR)** und **Teil C (Festkörper- und Diffusions-NMR)** dieser Nutzerordnung werden die einzelnen Standorte mit ihren Messmöglichkeiten und Ausstattungen vorgestellt. Im **Anhang 1** findet sich darüber hinaus eine tabellarische Aufstellung der verfügbaren NMR-Spektrometer und ihrer Ausstattung.

Buchung/Messzeitvergabe

Die Beauftragung von NMR-Messungen erfolgt im Bereich der hochauflösenden NMR-Spektroskopie über Auftragszettel. Im Falle von Routinemessungen können die Nutzer:innen eigenständig eine Experimentauswahl treffen. Bei Messungen an den Hochfeldgeräten erfolgt zunächst eine Beratung durch die wissenschaftlichen Leiter:innen der NMR-Standorte. In aller Regel werden die Messungen nach Auftragseingang ausgeführt, in Ausnahmen auch nach Dringlichkeit. Die letzte Entscheidung darüber trifft die Leitung des entsprechenden Standorts. Für luft-, temperatur- oder feuchtigkeitsempfindliche Proben können mit den Geräteverantwortlichen Termine vereinbart werden. Darüber hinaus erfolgt tagsüber an den Routinegeräten eine Priorisierung der Kurz- gegenüber den Langzeitmessungen.

Im Bereich der Festkörper- und Diffusions-NMR sowie Imaging-Anwendungen erfolgen die Messungen in der Regel im Rahmen wissenschaftlicher Kooperationen nach direkter Absprache mit dem/der verantwortlichen Hochschullehrer:in.

Nutzungskosten

Die laufenden Kosten für den Betrieb der NMR-Geräte an den jeweiligen Standorten (Personal, Gase, Kühlmittel, Verbrauchsmaterialien, etc.) sowie notwendige Reparatur- und Wartungskosten werden jeweils von den Instituten bzw. den verantwortlichen Arbeitsgruppen übernommen. Energiekosten werden zentral von der Universität Münster übernommen. Eine Weitergabe/Umlage der oben genannten Nutzungskosten erfolgt derzeit nicht.

Sofern bei größeren Messreihen zukünftig Nutzungskosten anfallen, erfolgt die Berechnung direkter Projektkosten entsprechend der aktuellen Hinweise zu Gerätenutzungskosten der DFG (Vordruck 55.04 – 12/20). Eine Preisliste findet sich im **Anhang 2** dieses Dokuments. Laut DFG-Regularien besteht somit für die Nutzer:innen prinzipiell auch die Möglichkeit, bei DFG-Anträgen NMR-Gerätenutzungskosten zu beantragen, die dann mit dem jeweiligen Standort als direkte Projektkosten verrechnet werden können.

Abgesehen von Messungen für Unternehmen erfolgt keine Unterscheidung interner und externer Nutzungskosten.

Wartung, Reparatur und Ersatzbeschaffung

Neben dem wissenschaftlichen Austausch der NMR-Abteilungsleiter:innen arbeiten diese auch intensiv bei der Wartung und Reparatur der NMR-Geräte zusammen, so dass kostenintensive Einsätze von Servicetechnikern reduziert und Kosten gespart werden können. Spezielle Auswertesoftware wird zentral in Form einer Campuslizenz beschafft. Die Bereitstellung, Pflege und Aktualisierung dieser Software wird vom NMR-Gerätezentrum organisiert und aus IT Mitteln der Universität (IVV 4) finanziert. Bestellungen von Verbrauchsmaterialien erfolgen zur Erzielung günstiger Konditionen teils gemeinsam und/oder in Absprache.

Ersatzbeschaffungen von NMR-Spektrometern erfolgen in der Regel durch einen Forschungsgroßgeräteantrag nach Art. 91b Grundgesetz über das Land NRW und die DFG. Eine Gerätebeschaffung ist auch im DFG-Normalverfahren bzw. auch durch andere Drittmittelgeber und Industriepartner möglich. Weiterhin stehen bei neuen Gebäuden auch Erstausstattungsmitel zur Verfügung. Geräte können auch über das Geräteinvestitionsprogramm (GIP, maximal 50 k€, 2/3 Eigenanteil) des Fachbereiches, über spezielle Programme zum Einsatz in der Lehre sowie auch über Institutsmittel beschafft bzw. in Teilen erneuert oder ergänzt werden.

Datenverarbeitung, -weitergabe und Archivierung

Die Rohdaten werden nach Abschluss der Messungen auf zentralen Servern der NMR-Standorte bereitgestellt. Innerhalb des Fachbereichs haben alle Nutzer einen direkten Zugang zu diesen Daten. Externen Forschenden des Universitätsklinikums und anderer Fachbereiche wird nach entsprechender Autorisierung ebenfalls der Zugriff auf die Server eingeräumt. Für den Download der Routine-Daten aus der Automation wurde ein spezielles Programm entwickelt, mit dem die Daten direkt nach Abschluss der Messung auf den eigenen lokalen Rechner kopiert werden. Die Festplatten-Server werden mit Hilfe eines RAID-Systems gespiegelt. Zusätzlich erfolgt täglich eine Archivierung über ein

zentrales Backup-System der Universität Münster. Die zentrale Archivierung entbindet die Nutzer:innen aber nicht von der Pflicht, die eigenen Daten zusätzlich entsprechend der DFG-Richtlinien zu sichern und zu archivieren. Die Bezeichnung der Daten erfolgt nach einem standardisierten Muster, wobei eine Rückverfolgung auf eine spezielle Struktur ausgeschlossen ist. Die Zuordnung des Dateinamens zum Experiment und die entsprechende Dokumentation unterliegt ausschließlich der Verantwortung des Nutzers oder der Nutzerin.

Gültigkeit

Diese Nutzungsordnung wurde vom Fachbereichsrat des Fachbereichs 12 Chemie und Pharmazie der Universität Münster am 29.06.2022 verabschiedet. Die laufende Aktualisierung der Teile B und C sowie der im Anhang befindlichen Geräteliste bedarf keines Neubeschlusses. Sie erfolgt durch die in **Tabelle 1** genannten Personen.

Prof. Dr. Joachim Jose
(*Dekan des Fachbereichs 12*)

Teil B Hochauflösende NMR-Spektroskopie

Im Bereich der Strukturbestimmung organischer und metallorganischer Moleküle verfügt der Fachbereich über vier moderne Hochfeldgeräte (2 × 600 und 2 × 500 MHz, Beschaffung in 2010, 2012, 2002 und 2018), sowie über mehrere Spektrometer mit Feldstärken zwischen 300 bis 400 MHz. Daneben wird behelfsmäßig noch ein im Jahr 1993 beschafftes 600 MHz-NMR-Gerät betrieben.¹ Hochfeldgeräte sind an allen drei Standorten des NMR-Gerätezentrums im Betrieb. Sie werden hauptsächlich von den dortigen Arbeitsgruppen, aber auch von Arbeitskreisen aus dem Institut für Biochemie, dem Institut für Lebensmittelchemie, dem Institut für Physikalische Chemie, dem Batterieforschungszentrum MEET, der Biologie, der Physik und der Medizin genutzt.

Ein früher am Institut für Lebensmittelchemie betriebenes über 15 Jahre altes 400 MHz-NMR-Spektrometer wurde aus Kosten- und Rentabilitätsgründen im Jahr 2018 mit dem Ziel stillgelegt, die NMR-Geräte an den anderen Standorten zu konzentrieren. Alle NMR-Messungen des Instituts für Lebensmittelchemie werden seither von den anderen drei NMR-Standorten übernommen.

Jeder der drei Standorte deckt die generelle Grundversorgung ab, hat sich aber darüber hinaus weiter spezialisiert. Diese Struktur hat sich in der Vergangenheit bewährt. Sie ist über viele Jahre gewachsen und immer weiter optimiert worden und zeichnet sich durch eine extrem hohe Effizienz aus. Seit jeher achtet der Fachbereich bei der Beantragung neuer Geräte darauf, universitätsweit ein breites Spektrum abdecken zu können. Als Beispiel sei das vom Sonderforschungsbereich 858 „*Synergetische Effekte in der Chemie – Von der Additivität zur Kooperativität*“ beschaffte 600 MHz-NMR-Spektrometer angeführt. An der Beantragung des Geräts waren 20 Arbeitsgruppen aus der gesamten Universität mit Projekten beteiligt. Es versteht sich von selbst, dass diese Projekte nicht ausschließlich an einem Gerät bearbeitet werden, sondern dass dafür die gesamte Infrastruktur des NMR-Gerätezentrums genutzt wird. Auch das im Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie aufgestellte 600 MHz-NMR-Gerät stellt ein solches Beispiel dar. Als einziges Spektrometer des NMR-Gerätezentrums mit Kryotechnologie steht es fachbereichsweit für alle Probleme zur Verfügung, die eine extrem hohe Empfindlichkeit und Auflösung voraussetzen. Die Aufstellung in der Pharmazie bietet sich dabei mit ihren Fragestellungen aus der Naturstoffchemie an. Tripelresonanzexperimente werden zentral am Standort im Organisch-Chemischen Institut abgedeckt. Der Standort im Institut für Anorganische und Analytische Chemie verfügt ergänzend dazu über große wissenschaftliche Erfahrung bei der Messung von Heterokernen wie ⁷Li, ¹¹B, ¹⁹F, ²⁹Si, ³¹P, ¹¹⁹Sn und ¹⁹⁵Pt.

An allen Standorten des NMR-Gerätezentrums werden auf Anfrage auch Messungen für andere Institute vorgenommen. Messungen an den Forschungsgeräten erfolgen nach wissenschaftlicher Beratung durch die NMR-Abteilungsleiter:innen. Interessierte mit entsprechenden Vorkenntnissen messen nach intensiver Einarbeitung auch persönlich an den Forschungsgeräten. Allerdings behalten sich die Abteilungsleiter:innen das Recht vor, zu entscheiden, ob eine Einarbeitung auch effizient ist. Handelt es sich z.B. nur um eine singuläre Fragestellung, so ist die Durchführung der Messung durch das NMR-Personal naturgemäß viel sinnvoller als die Einarbeitung eines Promovierenden für eine Einzelprobe. Bei allen Messungen innerhalb der Universität wird ganz

¹ Der Magnet dieses Spektrometers weist einen starken Drift in den z1- und z1x-Kryoshimpulen auf. Dies erfordert im Intervall von 2 bis 3 Jahren ein kostenaufwändiges Nachladen der Kryoshim- sowie der Hauptfeldspule. Aufgrund des hohen Risikos eines unkontrollierten Entladens („Quench“) beim Nachladen eines so alten Magnets muss mittelfristig mit der Außerbetriebnahme des Geräts gerechnet werden.

bewusst auf das Modell einer gegenseitigen Abrechnung verzichtet. Es ist die Philosophie des Fachbereichs, dass alle Spektrometer allen Gruppen in vergleichbarem Maße zur Verfügung stehen. Auf diese Weise wird z.B. auch den Nachwuchsgruppen im Fachbereich eine intensive Nutzung aller Geräte ermöglicht.

Neben dem wissenschaftlichen Austausch der NMR-Abteilungsleiter arbeitet das Personal der Abteilungen auch intensiv bei der Wartung und Reparatur der NMR-Geräte zusammen. Auf diese Weise können kostenintensive Serviceeinsätze der Herstellerfirmen auf ein Minimum reduziert werden.

Die hervorragenden Erfahrungen der vergangenen Jahre haben gezeigt, dass dieses Konzept zum Betrieb der hochauflösenden NMR-Geräte optimal für die im Fachbereich bearbeiteten Forschungsgebiete geeignet ist. Für die Angehörigen der Arbeitsgruppen ergeben sich kurze Wege. Die an den jeweiligen Forschungsvorhaben orientierte Ausstattung sowie die ortsnahe Aufstellung der NMR-Geräte ermöglicht eine effiziente Nutzung der NMR-Spektrometer. Daneben gibt es aber für jede Arbeitsgruppe in der Universität die Möglichkeit, Spezial- und Routinemessungen an den jeweiligen Standorten der NMR-Spektroskopie durchführen zu lassen. Das in der heutigen Form betriebene NMR-Gerätezentrum ist also über viele Jahre hinweg zu einer auf die spezifischen Bedürfnisse des Fachbereichs zugeschnittenen, sehr erfolgreichen Verbundstruktur entwickelt worden, die auch jetzt noch kontinuierlich weiterentwickelt wird. Diese Verbundstruktur mit lokaler Schwerpunktbildung hat sich für den Fachbereich als äußerst effizient herausgestellt und unterstützt in idealer Weise die anerkanntermaßen sehr gute Forschung und Lehre in Münster. Im Folgenden sind die Schwerpunkte der einzelnen Standorte etwas detaillierter beschrieben.

B1 Standort im Institut für Anorganische und Analytische Chemie

Der Standort der NMR-Spektroskopie im Institut für Anorganische und Analytische Chemie verfügt über ein modern ausgestattetes 500 MHz-NMR-Spektrometer sowie über zwei 400 MHz-NMR-Geräte (von 2004 und 2007).² Die Spektrometer werden von Dr. A. Hepp betreut. Er zeichnet sich durch langjährige Erfahrung im Bereich der X-Kern-Messungen aus. So verfügt der Standort über spezielle 5 mm Breitbandprobenköpfe, die den Bereich von (¹⁹F bis ¹⁰⁹Ag) abdecken, und spezielle BBO-Probenköpfe zur Messung von Kernen mit kleinen γ -Werten (5 mm bis ¹⁰³Rh & 10 mm bis ⁴¹K), wodurch nahezu der gesamte NMR-Bereich abgedeckt wird. Für die Messung von ²⁷Al-NMR-Spektren steht zusätzlich ein spezieller selektiver ²⁷Al{¹H}-Probenkopf ohne Probenkopfhintergrundsignal zur Verfügung. Dr. A. Hepp greift auf einen großen Erfahrungsschatz im Bereich der Moleküldynamikmessungen zurück und liefert so regelmäßig essenzielle Beiträge zum Verständnis von Moleküleigenschaften in Lösung. Unterstützt wird Dr. A. Hepp durch zwei technische Mitarbeiterinnen (M. Lauterbach, V. Schlayen).

Die NMR-Geräte werden tagsüber hauptsächlich zur schnellen Produktkontrolle bei chemischen Reaktionen herangezogen sowie für Routinemessungen an X-Kernen (hauptsächlich ⁷Li, ¹¹B, ¹⁹F, ²⁷Al, ²⁹Si-DEPT, ³¹P, ³⁵Cl). Je nach Probenaufkommen und Auslastung der NMR-Geräte können für nachts geplante NMR-Messungen wie z.B. X-Kern-Messungen unempfindlicher Kerne tagsüber durchgeführt

² Austausch der Konsolen der beiden 400 MHz-NMR-Spektrometer durch AV NEO 400-Konsolen in den Jahren 2021 bzw. 2024.

werden. Nachts oder über das Wochenende werden die NMR-Geräte in der Regel für lange X-Kern-Messungen (^{13}C , ^{15}N , ^{29}Si , ^{31}P , ^{63}Cu , ^{71}Ga , ^{75}As , ^{77}Se , ^{89}Y , ^{109}Ag , ^{119}Sn , ^{125}Te , ^{195}Pt , ^{207}Pb), Spezialmessungen (DOSY, HOESY, EXSY, T1-Bestimmungen) und/oder die Strukturaufklärung mittels moderner ein- und zweidimensionaler NMR-Spektroskopie genutzt. Dabei werden neben den klassischen HH- und HC-Korrelationen auch Korrelationen mit weiteren X-Kernen gemessen (z.B. X = ^{11}B , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{195}Pt ...).

Am 500 MHz-NMR-Spektrometer werden tagsüber bei Bedarf temperaturabhängige NMR-Spektren aufgenommen (370 K bis 230 K in 10 K-Schritten, in Ausnahmefällen auch bis 190 K oder 420 K). NMR-Messungen instabiler Proben bei tiefer Temperatur werden generell tagsüber gestartet, indem die gekühlte NMR-Probe in ein bereits abgekühltes System eingebracht wird. Quantitative NMR-Messungen (^1H , ^{19}F und ^{31}P) werden auf Grund der höheren Empfindlichkeit in der Regel ebenfalls am AV NEO 500 MHz-Spektrometer durchgeführt.

Die Auswahl der NMR-Spektrometer erfolgt in Abhängigkeit von der jeweiligen wissenschaftlichen Fragestellung. Da für die NMR-Spektroskopie von anorganischen und metallorganischen Verbindungen meist ein etwas größerer Frequenzbereich zur Anregung (z.B. ^{195}Pt ; 15000 ppm) bzw. zum Entkoppeln (100 ppm bei ^{19}F und/oder ^{31}P bei einer spektralen Breite von bis zu 600 ppm) benötigt wird, bedarf es oft auch eines manuellen bzw. halbautomatischen Messbetriebs, da die Mitte des Frequenzbereichs für die Anregung und/oder Entkopplung bzw. die spektrale Breite bei 2D-NMR-Messungen erst bestimmt und dann angepasst werden muss.

Auch werden NMR-Proben in NMR-Röhrchen vermessen, welche nicht für die Automation geeignet sind. Details können der Webseite entnommen werden.

Aufgrund der auf diesen Standort zugeschnittenen Ausrüstung sowie des qualifizierten und flexiblen Personals werden die synthesebegleitenden NMR-Messungen innerhalb kürzester Zeit durchgeführt und freie Kapazitäten tagsüber erfolgreich genutzt, um zeitnah eine Vielzahl an speziellen NMR-Messungen durchzuführen.

B2 Standort im Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie

Der Standort der NMR-Spektroskopie am Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie ist mit einem 600 MHz- und einem 400 MHz-NMR-Spektrometer ausgestattet. Die Geräte werden von Herrn Dr. J. Köhler sowie von Frau C. Thier (Chemielaborantin) und Herrn T. Meiners (Chemielaborant) betreut. Das 600 MHz-NMR-Spektrometer wurde 2013 als zentrales Gerät zur Strukturaufklärung für den Exzellenzcluster "Cells in Motion" (EXC 1003 – CiM) beschafft und steht seitdem den drei Instituten des neu errichteten PharmaCampus sowie dem gesamten Fachbereich Chemie und Pharmazie der Universität Münster zur Verfügung. Es dient der Bearbeitung verschiedenster Forschungsprojekte aus dem Bereich der Wirkstoff-, Metaboliten- und Imagingforschung, wobei sich insbesondere die Ausstattung mit einem Kryo-Probenkopf als unverzichtbarer Bestandteil bei der Untersuchung kleinster Substanzmengen erwiesen hat. Dies gilt insbesondere auch für die Strukturaufklärung von Naturstoffen, die im Institut für Pharmazeutische Biologie und im Institut für Lebensmittelchemie häufig nur in sehr geringen Konzentrationen isoliert werden können. Die Kryoprobentechnologie stellt somit eine ideale Ergänzung zur Ausstattung der anderen NMR-Standorte des NMR-Gerätezentrums dar. Das bereits seit dem Jahr 2000 vorhandene 400 MHz-NMR-Spektrometer wurde 2013 in seiner

Peripherie erneuert und mit einem automatischen Probenwechsler ausgestattet. Neben Hoch- und Tieftemperaturexperimenten dient es in erster Linie der Messung von Routineproben des Instituts für Pharmazeutische und Medizinische Chemie aber auch aller anderen Institute wie z.B. dem benachbarten CeNTech. Bei eventuellen kurzfristigen Ausfällen stehen die Routinegeräte am Standort des Organisch-Chemischen Instituts als Teil des NMR-Gerätezentrums zur Verfügung.

B3 Standort im Organisch-Chemischen Institut

Der Standort im Organisch-Chemischen Institut übernimmt durch seine umfangreiche Ausstattung eine zentrale Rolle in der NMR-spektroskopischen Analytik der Universität Münster. Hier werden Messungen des Fachbereichs Chemie und Pharmazie sowie der Fachbereiche Physik, Biologie und Medizin durchgeführt. Keiner der zuletzt aufgeführten Fachbereiche verfügt über eigene NMR-Spektrometer. Der Standort verfügt über drei permanent angestellte Vollzeitkräfte, den wissenschaftlichen Leiter Dr. K. Bergander, Herrn T. Reckmann (Chemielaborant) und Herrn I. Gutowski (Elektroingenieur). Herr Dr. G. Kehr steht mit seiner langjährigen NMR-spektroskopischen Erfahrung als Vertreter des Abteilungsleiters zur Verfügung. Verstärkt wird das Personal durch eine Doktorandin mit einer halben wissenschaftlichen Stelle. Die Geräte der NMR-Spektroskopie am Standort im Organisch-Chemischen Institut lassen sich grob in drei Kategorien einordnen.

Forschungsgeräte bei hohem Feld

Die 500 und 600 MHz-Geräte verfügen über eine umfangreiche und flexible Ausstattung. Nachfolgend erfolgt ein kurzer Abriss der NMR-spektroskopischen Schwerpunkte.

- a) Strukturaufklärung an vornehmlich organischen, metallorganischen und fluororganischen Proben mit Hilfe moderner ein- und zweidimensionaler Pulssequenzen. Viele Fragestellungen werden dabei beispielsweise mit Hilfe von selektiven (1D-NOESY, 1D-ROESY, 1D-TOCSY, ...) und bandselektiven Methoden (bs-gHMBC) beantwortet.
- b) Das 600 MHz-Spektrometer ist mit vier Kanälen und diversen Tripelresonanzköpfen ausgestattet. Insbesondere bei der Strukturaufklärung fluor- und phosphorhaltiger Substanzen ist der Einsatz des dritten Fluor- und des vierten Phosphorkanals und der zugehörigen Tripelresonanzköpfe unabdingbar. Alle Probenköpfe sind im ^1H -Kanal zusätzlich auf ^{19}F abstimmbare. Diese Spezialausstattung ermöglicht es, die für den Fachbereich essentiellen $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ -HOESY Experimente und $^{19}\text{F}\{\text{X}, ^1\text{H}\}$ -CRISIS2-Korrelationen durchzuführen.
- c) Für dynamische NMR-Spektroskopie bei variablen Temperaturen greifen viele Gruppen auf die Ressourcen und die langjährige Erfahrung von Dr. K. Bergander zurück. Auch DOSY-Messungen werden bei unterschiedlichen Temperaturen durchgeführt.

NMR-Geräte in der Automation

Es stehen zwei Zwei- und ein Dreikanal 400 MHz-NMR-Spektrometer, die jeweils mit einem Probenwechsler für 60 Proben ausgestattet sind, zur Verfügung. Während die Zweikanal-NMR-Geräte ausschließlich für 1D NMR-Messungen genutzt werden (^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{11}B , ^{19}F , DEPT), wird das Dreikanal-NMR-Spektrometer auch für anspruchsvollere Proben genutzt, die aber noch nicht unbedingt den Einsatz eines Hochfeldgerätes voraussetzen. Der dritte Kanal wird für die routinemäßige Messung von

$^1\text{H}\{^{19}\text{F}\}$ -, $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ - und $^{13}\text{C}\{^1\text{H},^{19}\text{F}\}$ -Tripelresonanzexperimenten genutzt. Die Automationssoftware wurde dabei so adaptiert, dass auch 2D-Spektren mit optimierten Verschiebungsbereichen und optimierten Parametern in der Automation aufgesetzt werden können. Die in 2020 in Betrieb gegangenen NMR-Spektrometer zeichnen sich durch eine extrem hohe Zuverlässigkeit aus, wodurch ein hoher Probendurchsatz bei gleichzeitig hoher Spektrenqualität garantiert ist. Zwei der Geräte werden von T. Reckmann und I. Gutowski betrieben und stehen für Anfragen aus der gesamten Universität zur Verfügung. So werden beispielsweise für die Arbeitsgruppe von Prof. Dr. med. M. Schäfers vom „*European Institute for Molecular Imaging*“ (EIMI) der Universität Münster alle NMR-Messungen durchgeführt, da die Gruppe selber über kein eigenes NMR-Spektrometer verfügt. Somit profitiert auch deren Forschung in hohem Maße von der wissenschaftlichen Dienstleistung des NMR-Gerätezentrums des Fachbereichs Chemie und Pharmazie.

NMR-Geräte, die bestimmten Arbeitskreisen zugeordnet sind

Den Arbeitsgruppen des Organisch-Chemischen Instituts steht eines der drei 400 MHz-NMR-Spektrometer im *open-access*-Betrieb zur Verfügung. Außerdem verfügt die Arbeitsgruppe von Prof. Dr. A. Studer über ein 300 MHz-NMR-Gerät (2006 gebraucht erworben). Beide Geräte dienen in ihrer einfachen Ausstattung und den zugehörigen Probenwechslern der schnellen Produktkontrolle und werden nach Einarbeitung durch das Personal der NMR-Abteilung ausschließlich von Mitgliedern aus den Arbeitsgruppen bedient. Reparatur und Wartung erfolgt durch das Personal der NMR-Abteilung. Da die NMR-Geräte jeweils mit einem Probenwechsler ausgestattet sind, kann zu Zeiten hoher Nachfrage in der Automation oder bei einem Ausfall eines anderen Gerätes auf diese Ressource zurückgegriffen werden.

Teil C Festkörper- und Diffusions-NMR-Spektroskopie

Am Institut für Physikalische Chemie befinden sich zwei spezialisierte NMR-Arbeitsgruppen, in denen spezifische NMR-Methoden den Schwerpunkt der experimentellen Arbeiten bilden. In der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. M. R. Hansen sind dies Methoden der Festkörper-NMR-Spektroskopie, vor allem an funktionellen organischen und anorganischen Materialien; in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. M. Schönhoff sind dies Feldgradienten-NMR-Methoden zur Analyse von Transportprozessen und molekularer Selbstorganisation.

In beiden Arbeitsgruppen werden die NMR-Spektrometer ausschließlich von Doktoranden und Postdoktoranden bedient, für deren Forschungsprojekte sie die Hauptuntersuchungsmethode darstellen. Ein Servicebetrieb erfolgt hier aufgrund der hohen Komplexität der Experimente nicht. Es bestehen allerdings vielfältige Kooperationen mit anderen Arbeitsgruppen des Fachbereichs, so dass der gesamte Fachbereich Zugang zu den genannten Methoden hat. Im Folgenden sind die Methoden und die Ausstattung dargestellt.

Die beiden Arbeitsgruppen nutzen gemeinsame Laboratorien im Gebäude des Instituts für Physikalische Chemie. Die kompetente technische Betreuung der Geräte erfolgt durch einen Elektronik-Ingenieur, so dass sowohl kleinere Reparaturen als auch komplexere, spezifische Probenkopfanfertigungen intern durchgeführt werden können. Die gemeinsame Infrastruktur dieses Standortes, organisiert durch einen akademischen Rat, Dr. W. Chassé, umfasst weiterhin die

Abstimmung von Messzeiten sowie einen zentral organisierten N₂-Befüllservice, in den alle Nutzer (Doktoranden, Postdoktoranden) involviert sind.

Das MEET nutzt im Forschungsbereich Analytik und Umwelt (Dr. Sascha Nowak) sowie in Kooperation mit dem Helmholtz-Institut Münster (PD Dr. Gunther Brunklaus) spezialisierte NMR- und MRI-basierte Methoden speziell zur (operando) Aufklärung elektrochemischer Prozesse in Batterien sowie Analytik von Aktivmaterialien. Die NMR-Spektrometer werden meist von Doktoranden und Postdoktoranden bedient, für deren Forschungsprojekte sie eine wesentliche Untersuchungsmethode darstellen. Die Abstimmung der Messzeit unter den Nutzern findet einmal wöchentlich statt, ebenso wie die N₂-Befüllung. Der Messbetrieb wird durch Techniker:innen unterstützt.

C1 Festkörper-NMR-Spektroskopie: AG Hansen, Institut für Physikalische Chemie

Die Arbeitsgruppe Hansen entwickelt und nutzt fortgeschrittene Festkörper-NMR Methoden zur umfassenden Charakterisierung funktioneller organischer und anorganischer Materialien, vor allem hinsichtlich struktureller und dynamischer Eigenschaften. Im Rahmen der einzelnen Projekte wird dabei ein sehr breites Spektrum an unterschiedlichen Substanzen untersucht. Dies wird anhand von spezialisierter Ausrüstung wie Doppel- und Tripelresonanz- sowie Hochtemperatur MAS Probenköpfen ermöglicht (u.a. 4 mm & 2.5 mm ¹H/X/Y DVT CP/MAS; 4 mm ¹H/X WVT CP/MAS sowie 4 mm ¹H/X VTN CP/MAS; low-gamma 7 mm ¹H/X VTN CP/MAS; 2.5 mm ¹H/X VTN CP/MAS). Die AG Hansen verfügt dabei über zwei Dreikanal-Spektrometer (jeweils ¹H/¹⁹F, X, Y): ein Avance-DSX WB 400 MHz (Baujahr 2001, beschafft mit Mitteln des ehemaligen SFB 458) und Bruker Avance-III WB 300 MHz-Gerät (Konsole beschafft in 2008, neuer Magnet in 2019). In Dezember 2018 wurde ein hochmodernes Bruker Avance-NEO WB 500 MHz-Spektrometer mit einer Vierkanal-Konsole für ¹⁹F, ¹H, X und Y Einfach- und Mehrfachresonanz-Methoden installiert, z.B. durch 1.3 mm und 4 mm HFXV DVT CP/MAS Probenköpfe und Diplexer für ¹H und ¹⁹F. Zudem stehen zwei ältere Spektrometer, ein Bruker Avance-DSX WB 200 MHz (Baujahr 1995, Zweikanal) und ein Bruker Avance-DSX WB 500 MHz (Baujahr 1994, Dreikanal, gebraucht 1995 an die Universität Münster umgezogen) bereit. Eine Ersatzbeschaffung für das Bruker Avance DSX WB 200 MHz-Spektrometer ist für 2024 vorgesehen. Alle Spektrometer sind für den Festkörper-NMR Betrieb ausgerüstet, d.h., sie verfügen über geeignete Radiofrequenzsender mit Leistungen von 500-1000 Watt. Eine Auswahl der möglichen 1D und 2D Festkörper-NMR-Experimente für die Struktur- und Dynamikaufklärung in organischen und anorganischen Materialien sind auf der Internet-Seite der AG zusammengestellt (**Tabelle 1**).

C2 Festkörper-, Imaging-, Hochauflösungs- und PFG-NMR: MEET

Das MEET charakterisiert mittels NMR-Spektroskopie primär Aktivmaterialien und elektrochemische Prozesse von Energiespeichersystemen, auch um maßgeblich eigenschaftsprägende Reaktionen und Mechanismen in Batterien besser zu verstehen und weiterführende Handlungsoptionen zur Materialoptimierung und Anpassung der Zellchemie zu erhalten. Dazu stehen zwei NMR Spektrometer, ein Festkörper-/Imaging-Gerät (Bruker Avance III 200 WB) und ein Flüssig-NMR-Gerät (Bruker Avance III HD 400 SB) zur Verfügung. Das 400 MHz NMR Spektrometer, welches mit einem Breitband Dreikanal Flüssigprobenkopf PA BBO 400S1 Ag-F/1H/2H sowie Vierkanal Durchflussprobenkopf PH LCTXI400SB F-1H/2H/P/C ausgestattet ist, wird meist zur Synthesekontrolle bzw. Strukturaufklärung von Flüssig-

und Polymerelektrolyten sowie zur Aufklärung batteriespezifischer Alterungs- und Degradationsmechanismen verwendet. Die integrierte Automation (Bruker Sample Xpress) stellt einen hohen Probandendurchsatz sicher, der einen facettenreichen Zugang zur Elektrolytforschung ermöglicht. Dies ist auch im Hinblick auf das Hochdurchsatz-System (HTS-I und HTS-II) zur Elektrolytentwicklung am MEET vorteilhaft.

Komplementär dazu stehen am Festkörper-NMR-Spektrometer MAS-Probenköpfe zur Verfügung, um beispielsweise elektrochemische Prozesse zyklisierter Elektrodenmaterialien mittels grundlegender und fortgeschrittener Festkörper-NMR-Techniken zu charakterisieren. Auch ermöglichen Gradienten-gestützte Experimente dynamische Untersuchungen von Batteriematerialien sowie 1D-3D Bildgebung von (Modell-)Batterien, womit beispielsweise Mechanismen kapazitätslimitierender Vorgänge und irreversible Prozesse in elektrochemischen Zellen einschließlich der Elektrolytformulierungen evaluiert werden können.

Eine Auswahl der möglichen NMR-Experimente am Standort des MEET sind auf der Internet-Seite des MEET zusammengestellt (**Tabelle 1**).

C3 Gepulste Feldgradienten-NMR: AG Schönhoff, Institut für Physikalische Chemie

Die Arbeitsgruppe Schönhoff (Professur „Polymere und Nanostrukturen“) beschäftigt sich mit der Untersuchung von Transportprozessen in weicher Materie. Die verwendeten Methoden basieren vorwiegend auf gepulster Feldgradienten-NMR. Dies beinhaltet insbesondere Diffusionsmessungen sowie elektrophoretische NMR, die teilweise durch Spinrelaxation und Festkörper-NMR (statisch sowie MAS) ergänzt werden.

In zwei Themengebieten werden hier an Strukturen mit Anwendungsrelevanz dynamische Untersuchungen von Transport und molekularer Dynamik durchgeführt. Das erste Gebiet betrifft molekulare Selbstorganisationsprozesse in Lösung und molekularen Transport in porösen Materialien. So wird an kolloidalen Trägersystemen Einbau, Lokalisation und Dynamik von Gastmolekülen untersucht. Beispiele sind Modellwirkstoffe in thermoreversiblen Mikrogelen und die Permeation von Wasser und kleinen Molekülen durch Vesikelmembranen unterschiedlicher Struktur. PFG-NMR Diffusionsmessungen und ergänzende Methoden zur Analyse von molekularem Transport und Assembly werden in entsprechenden Kollaborationen auch an Systemen verschiedener Partner eingesetzt.

Im zweiten Forschungsschwerpunkt wird multinukleare NMR-Spektroskopie zur Analyse von Transportprozessen in polymeren Elektrolyten und Ionischen Flüssigkeiten genutzt. Die Methodik beruht hier auf der Kombination von PFG-NMR mit Spinrelaxation an ^1H , ^7Li und ^{19}F , um aus Diffusionskoeffizienten und Korrelationszeiten ein Gesamtbild der molekularen Dynamik sowohl auf lokaler als auch auf langreichweitiger Skala zu erhalten. Ergänzend wurde in den letzten Jahren Hardware für elektrophoretische NMR (eNMR) in der AG entwickelt, mit der molekulare Driftbewegungen im elektrischen Feld untersucht werden können. Diese Ausstattung bildet die Basis zur detaillierten Charakterisierung von spezies-selektiven elektrophoretischen Mobilitäten und korreliertem Ionentransport in Ionischen Flüssigkeiten (IL). Untersuchungen per eNMR erfolgen weiterhin in verschiedensten für Li-Batterien relevanten Elektrolytsystemen wie Polymerelektrolyte, Solvent-in-Salt-Elektrolyte, Gelelektrolyte und neuartige Locally Highly Concentrated (LHCE)-

Elektrolyte. Des Weiteren bestehen nationale und internationale Kollaborationen, in denen Ionen-transportprozesse in extern synthetisierten neuartigen Elektrolytsystemen untersucht werden.

Aufgrund der für die obigen Aktivitäten erforderlichen Messzeiten werden die der Arbeitsgruppe zur Verfügung stehenden Spektrometer fast ausschließlich für PFG-NMR und eNMR genutzt. Es handelt sich um ein Bruker AVANCE III- Spektrometer (400 MHz, WB, Baujahr 2014, Inbetriebnahme 2015) sowie ein Bruker AVANCE NEO-Spektrometer (400 MHz) auf Basis eines älteren Magneten (WB, Baujahr 1998) mit einem Konsolenersatz aus 2020. Beide Spektrometer sind mit Diffusionszubehör (Gradientenkontrolle, Gradientenverstärker, Kühlung) ausgestattet, ersteres weiterhin mit Hochleistungsverstärkern (^1H , X) und CP-MAS-Einheit. Ein weiteres Spektrometer (300 MHz), ebenfalls mit Gradientenausstattung für multinukleare Mobilitätsmessungen, soll in 2024 beschafft werden. Hauptsächlich wird mit Zweifachresonanz-Diffusions-Breitband-Probenköpfen (BBO-DIFF, 285 mT/m/A) gearbeitet, mit denen mehrere Kerne in direkter Folge gemessen werden können, und die maximale Gradientenstärken von ca. 17 T/m erreichen. Weitere Festfrequenz-Diffusionsprobenköpfe (DIFF 30 bzw. DIFF 50, Bruker) liefern mit den entsprechenden Verstärkern Gradientenstärken von maximal 12 T/m bzw. 28 T/m und können mit verschiedenen Festfrequenz-Inserts versehen werden (^1H , ^2H , ^{23}Na , ^7Li , ^{19}F , ^{31}P , ^{81}Br), darunter auch Spezialanfertigungen für Hochtemperatur-Diffusionsmessungen an Elektrolyten. Weitere Probenköpfe sind: BBO Breitband; HPBB: Festkörper HT X= ^{31}P - ^{109}Ag ; HPFF: Festkörper statisch ^1H ; CP/MAS WVT 4 mm 15 kHz; CP/MAS WVT 7 mm 7 kHz, sowie ein DIFF-MAS Probenkopf für Diffusionsmessungen unter MAS an schwach dipolar gekoppelten Systemen, der unter einem Imaging-Gradientensystem (MICRO 2.5) betrieben wird. Die eNMR wird mit einem Eigenbau-E-Pulsgenerator am AVANCE NEO betrieben, ein kommerzieller Pulsgenerator für eNMR, der am Avance III eingesetzt wird, stammt von der Firma P&L Scientific, Lidingö, Schweden. In beiden Fällen werden Eigenbau-Probenhalterungen verwendet, die Elektroden mit isolierten Zuleitungen enthalten und in 5 mm-NMR-Röhrchen eingeschoben werden.

(Die Teile B und C wurden zuletzt am 04.10.2023 aktualisiert)

Anhang 1: NMR-Geräteliste des NMR-Gerätezentrums der Universität Münster (Stand Oktober 2023)

Standort (Ansprechpartner)	Her- steller	Modell	Ausstattung	Jahr der Förderung
B1 (AC/PC, Hepp)	Bruker	AV Neo 500	3 Kanäle, VT, BBFO-iProbe, TBO(F)- Probe, 24er-Probenwechsler	2018 DFG GEPRIS 414153038
B1 (AC/PC, Hepp)	Bruker	AV Neo 400	3 Kanäle, VT, TBO(P)-iProbe, Sex(Al)-, BBOLR 10mm-Probe, 24er-Probenwechsler	2004 (Magnet), 2020 (Konsole) DFG GEPRIS 452669904
B1 (AC/PC, Hepp)	Bruker	AV Neo 400	3 Kanäle, VT, TBO(F)-iProbe BBER (H&F)-iProbe 24er-Probenwechsler	2007 (Magnet), 2023 (Konsole) DFG GEPRIS 524348822 (2023) DFG GEPRIS 52404564 (2007)
B2 (Pharm., Köhler)	Agilent	DD2 600	Kryo-Probenkopf, 96er-Probenwechsler	2012 DFG GEPRIS 214886232
B2 (Pharm., Köhler)	Agilent	DD2 400	BB-Probenkopf, 96er-Probenwechsler	2013
B3 (OC, Bergander)	Agilent	DD2 600	4 Kanäle, VT, CHF-, HCX-Tripelres.	2010 DFG GEPRIS 182231295
B3 (OC, Bergander)	Agilent	DD2 600	2 Kanäle, VT, HX-Probenkopf	1993 HBFG
B3 (OC, Bergander)	Agilent	DD2 500	3 Kanäle, VT, CHF-, XH-Probenkopf	2002 HBFG -112/454
B3 (OC, Bergander)	Bruker	AV Neo 400	3 Kanäle, TBO, BBFO-iProbe 60er-Probenwechsler	2019 (Magnet), 2019 (Konsole) DFG GEPRIS 431353207
B3 (OC, Bergander)	Bruker	AV Neo 400	2 Kanäle, BBFO-iProbe 60er-Probenwechsler	2006 (Magnet), HBFG 112/514-1 2019 (Konsole) DFG GEPRIS 431353070
B3 (OC, Bergander)	Bruker	AV Neo 400	2 Kanäle, HFC-iProbe 60er-Probenwechsler	2020 OC-Institutsetat
B3 (OC, Bergander)	Bruker	AV II 300	2 Kanäle, BBFO-Probenkopf 60er-Probenwechsler	2006 HBFG 112/513-1
C1 (AC/PC, Hansen)	Bruker	DMX WB 200	2 Kanal Festkörper NMR	1995, Ersatzbeschaffung in 2024 DFG GEPRIS 530325402
C1 (AC/PC, Hansen)	Bruker	DSX WB 500	div. Probenköpfe, 3 Kanal Festkörper NMR	1996
C1 (AC/PC, Hansen)	Bruker	DSX WB 400	div. Probenköpfe, 3 Kanal Festkörper NMR	2001
C1 (AC/PC, Hansen)	Bruker	AVANCE Neo WB 500	div Probenköpfe, 4 Kanal, Festkörper NMR	2017 DFG GEPRIS 393674885
C1 (AC/PC, Hansen)	Bruker	AVANCE-III WB 300	div. Probenköpfe, 3 Kanal Festkörper NMR	2019 (Magnet), 2008 (Konsole) DFG GEPRIS 83596751
C2 (MEET, Wiemers-Meyer)	Bruker	AVANCE-III WB 200	Festkörper-NMR, div. MAS-, MRI-, PFG-Probenköpfe	2011 BMBF Helion (Intern: 29120211)
C2 (MEET, Wiemers-Meyer)	Bruker	AVANCE-III HD 400	BB-Kopf, 1H, 19F, 13C, 31P- Durchflussprobenkopf	2014 BMBF Elektrolytlabor (Intern: 3120034900)
C3 (AC/PC, Schönhoff)	Bruker	AVANCE-III HD WB 400	PFG NMR in Lösung und Festkörper	2014 DFG GEPRIS 247464593
C3 (AC/PC, Schönhoff)	Bruker	AVANCE Neo WB 400	PFG NMR in Lösung	1999 (Magnet), 2020 (Konsole) DFG GEPRIS 452849940
C3 (AC/PC, Schönhoff)	-	300 MHz	PFG NMR in Lösung	Beschaffung in 2024 geplant DFG GEPRIS 525518783

Anhang 2: Preisliste Nutzungskosten des NMR-Gerätezentrums

Tabelle 1: Nutzungspauschalen des NMR-Gerätezentrums am Fachbereich Chemie und Pharmazie an der Universität Münster, Stand Juni 2022

Art der Nutzung	Nutzungspauschale
Messungen bis 400 MHz in der Automation	5 EUR/h
Messungen ab 500 MHz in der Automation	10 EUR/h
zusätzliche Pauschale bei manueller Messung	10 EUR/h
Pauschale bei komplexen Messungen mit entsprechender Vorbereitungs- bzw. Rüstzeit und/oder wissenschaftlicher Unterstützung durch Personal des NMR-Gerätezentrums	40 EUR/h

Hinweise:

- Die Pauschalen beziehen sich auf reine akkumulierte NMR-Gerätemesszeiten.
- Die hier angegebenen Preise sind Nutzungspauschalen, die sich an den Hinweisen des DFG-Vordrucks 55.04 - 11/21 orientieren und Obergrenzen definieren. Sollten höhere Nutzungsentgelte erhoben werden, sind die Nutzungskosten aufzuschlüsseln.
- Durch die Nutzungspauschalen dürfen nur **projektspezifische Mehrkosten** abgedeckt werden, z.B. anteilige Finanzierung von Personalkosten für projektspezifische Messungen und deren Vorbereitung, Mehraufwand durch die Bereitstellung der Geräte, Kosten für die Beschaffung von spezifischen Zubehör (Probenkopf) für ein bestimmtes Projekt, Verbrauchsmaterialien, etc..
- Bevor Nutzungspauschalen erhoben werden, gilt entsprechend der DFG-Hinweise 55.04-11/21:
„Core Facilities und Gerätetreibende sind verpflichtet, Kalkulationen der tatsächlich entstehenden Kosten durchzuführen und deren Umlage auf die Nutzer bei Nachfrage nachvollziehbar darstellen zu können.“
 Bei einer Prüfung durch die DFG ist diese Kalkulation vorzulegen.
- Alle Aufwendungen, die für die generelle Aufrechterhaltung des Betriebszustandes eines Großgerätes erforderlich sind (**indirekte Projektkosten**), z.B. Kosten für Helium, und Reparatur- und Wartungskosten, Reinvestitionen, laufende Aufwendungen für Gebäude und Instandhaltung sind **nicht förderfähig**. Die indirekten Projektkosten können ggf. über Programmpauschalen kompensiert werden.

Anhang 3: Unterschriftenliste, Stand Sommersemester 2022

NMR-Abteilungsleiter:innen bzw. Leiter:innen der NMR-Arbeitsgruppen:

Dr. Klaus Bergander (Organisch-Chemisches Institut)

Prof. Dr. Michael Ryan Hansen (Institut für Physikalische Chemie)

Dr. Alexander Hepp (Institut für Anorganische und Analytische Chemie)

Dr. Jens Köhler (Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie)

Dr. Simon Wiemers-Meyer (MEET)

Prof. Dr. Monika Schönhoff (Institut für Physikalische Chemie)

Geschäftsführende Direktoren/Direktorinnen der Institute:

Prof. Dr. Melanie Esselen (Institut für Lebensmittelchemie)

Prof. Dr. Frank Glorius (Organisch-Chemisches Institut)

Prof. Dr. Jens Müller (Institut für Anorganische und Analytische Chemie)

Prof. Dr. Monika Schönhoff (Institut für Physikalische Chemie)

Prof. Dr. Martin Winter (MEET)

Prof. Dr. Bernhard Wünsch (Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie)