

Nutzerordnung¹ für die „Mass Spectrometry-based Proteomics Unit Biology of Plants“ (MSPUB) am Institut für Biologie und Biotechnologie der Pflanzen

Beschlossen am: 15.08.2015; In Kraft getreten: 01.04.2016; Aktualisiert: 12.11.2020

Die MSPUB ist eine wissenschaftliche Einheit, unter gemeinsamer Leitung von Prof. Dr. Iris Finkemeier und Prof. Dr. Michael Hippler, welche spezialisierte Methoden der Protein- und Proteomanalytik anwendet, sowie neue Methoden der Protein- und Proteomanalytik etabliert und entwickelt und diese Methoden Arbeitsgruppen des IBBP, des Fachbereichs Biologie, sowie anderer interessierter Arbeitskreise der Universität zugänglich macht.

Neben den spezialisierten Forschungsschwerpunkten beider Arbeitsgruppen, welche die Hauptnutzung der Massenspektrometer ausmachen, bietet die MSPUB anderen Arbeitsgruppen am IBBP bzw. im Fachbereich Biologie, sowie in der Universität massenspektrometrische Analysen in spezifischen Kooperationsprojekten oder in Serviceleistungen, hier begrenzt im Rahmen der Kapazität, an. Kooperationen in Form von Drittmittel-finanzierten Projekten wird die höchste Priorität eingeräumt. Als Kooperationsprojekte bieten wir die Massenspektrometrie-basierte Proteomanalysen an, welche die jeweiligen Spezialgebiete der AG Finkemeier und AG Hippler betreffen, und zur Beantwortung biologischer Fragen dienen. Serviceanalysen sind definiert als Proteinidentifizierungen und Quantifizierungen von hauptsächlich gereinigten Proteinproben (Kostenschema, siehe unten).

§1 Ordnung

§1.1 Die Nutzerordnung regelt:

- (1) die Organisation der Arbeitsabläufe zur Nutzung der Proteomanalytik am MSPUB
- (2) die Beziehungen zu Anwendern und Kollaborationspartnern.

§1.2 Die Nutzerordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

§2 Organisation der MSPUB

§2.1 Verantwortliche Personen und Mitarbeiter der MSPUB sind:

- (1) Leiter MSPUB: Prof. Dr. Iris Finkemeier, Prof. Dr. Michael Hippler
- (2) Wissenschaftliche Mitarbeiter: Dr. Jürgen Eirich (AG Finkemeier), Dr. Martin Scholz (AG Hippler)
- (3) Technische Assistentinnen: Paulina Pieloch (AG Finkemeier), Dipl. Ing. Susan Hawat (AG Hippler)

§2.2 Die Massenspektrometer der MSPUB werden ausschließlich von verantwortlichen Personen der AG Finkemeier und AG Hippler betrieben und können unter Aufsicht und Anweisung von anderen Mitgliedern der AGs des IBBP benutzt werden.

§2.3 Geräteverantwortlich für das QExactive Plus Massenspektrometer in Schlossplatz 8 sind Prof. Michael Hippler, Dr. Martin Scholz assistiert von Dipl. Ing. Susan Hawat. Geräteverantwortlich für das QExactive HF Massenspektrometer in Schlossplatz 7 sind Prof. Dr. Iris Finkemeier, Dr. Jürgen Eirich assistiert von Paulina Pieloch. Die Geräteverantwortlichen von Schlossplatz 7 und 8 sind bei Krankheit oder Urlaub in Vertretung verantwortlich für beide Geräte.

§2.4 Die MSPUB steht folgenden Gruppen (in abgestufter Priorität und zu unterschiedlichen Gebühren) für die massenspektrometrische Analyse von Peptiden und Proteinen zur Verfügung:

- (1) Arbeitsgruppen des IBBP und Partnern aus Forschungsverbänden (z.B. SFBs, FOR)
- (2) Arbeitsgruppen des Fachbereichs Biologie
- (3) Nutzer aus anderen akademischen (non-profit) Organisationen
- (4) Nutzer aus kommerziellen Unternehmen

§3 Regeln und Aufgaben der Mitarbeiter der MSPUB

§3.1 Zu den Aufgaben der Leiter der MSPUB zählen:

- (1) Die Einteilung und Anleitung der an der MSPUB beschäftigten Mitarbeiter.
- (2) Die zweckdienliche Verwendung der MSPUB zugewiesenen Ressourcen.
- (3) Die Organisation interner Arbeitsabläufe im Hinblick auf Effizienz und gleichbleibend hohe Qualität der Ergebnisse, sowie reibungslose Interaktion mit Nutzern.
- (4) Die Wartung, Instandhaltung und Optimierung der vorhandenen Geräte.
- (5) Die Betreuung und Anleitung von Anwendern und Kollaborationspartnern, die zeitlich befristet ein Projekt in der MSPUB bearbeiten.
- (6) Die Weiterbildung und Organisation der Teilnahme von Mitarbeitern an Fortbildungsmaßnahmen mit dem Ziel, die methodisch-technischen Möglichkeiten der MSPUB an die allgemeinen Entwicklungen anzupassen.
- (7) Die Pflege der MSPUB Homepage sowie der bioinformatischen Plattformen (MaxQuant und Datenserver).
- (8) die Einladung der Mitarbeiter der MSPUB zu turnusmäßigen wissenschaftlichen Treffen und Seminaren und Einladung wissenschaftlicher Gäste aus dem Bereich der Proteomik zu den Institutsseminaren.
- (9) die Priorisierung der Probenbearbeitung bei einem ungewöhnlich hohen Probenaufkommen bzw. in Fällen erhöhter Dringlichkeit.

§3.2 Die Leiter des MSPUB treffen sich einmal monatlich und je nach Bedarf und entscheiden nach Vorstellung des zu bearbeitenden wissenschaftlichen Projekts, welches der Massenspektrometer für das beabsichtigte Projekt voraussichtlich zu belegen ist, welcher zeitliche Aufwand in etwa zu erwarten ist und welche zusätzlichen Geräte noch benötigt werden.

§3.3 Die Computer der Massenspektrometer dürfen nicht für das Surfen im Internet benutzt werden, außer es handelt sich dabei um wartungsbezogene Recherchen. Automatische Windows-Updates sind deaktiviert und werden einmal wöchentlich bei Wartung der Geräte von den wissenschaftlichen Mitarbeitern bzw. technischen Assistentinnen installiert. Das Installieren von Programmen ohne Absprache mit den Leitern der MSPUB ist untersagt.

§3.4 Alle Proben müssen nach den aktuellen Protokollen der MSPUB zur Probenvorbereitung vorbereitet werden.

§3.5 Der Datentransfer der Rohdaten auf den Server der MSPUB erfolgt automatisch mit Hilfe der SyncToy-Software.

§3.6 Es müssen tägliche Qualitätsstandards (0.25 µg Arabidopsis bzw. Chlamydomonas Gesamtproteom und 10 fmol BSA) zwischen den Proben analysiert werden, um eine hohe Qualität und zuverlässige Analysen zu garantieren. Die Auswertung der Qualitätskontrollen erfolgt mittels MaxQuant und PTXQC.

§3.7 Die Massenspektrometer müssen einmal wöchentlich von den technischen Assistenten und wissenschaftlichen Mitarbeitern kalibriert, die Ion-Transfer Kapillare gereinigt, und die nano-LC auf Lecks überprüft und Laufmittel ausgetauscht werden. C18-Säulen werden je nach Bedarf in verschiedenen Längen und Säulenmaterial gepackt/erworben und bei Bedarf und Qualitätsverlust (> 5% Abweichung von Standardprobe) ausgetauscht.

§3.8 Eine Reinigung der S-Linse und des Quadrupols der Q Exactive Massenspektrometer erfolgt je nach Sensitivitätsverlust, aber mindestens alle sechs Monate. Ein Ölwechsel der Vorpumpen erfolgt einmal jährlich.

§3.9 Für die bioinformatische Datenanalyse zur Identifizierung und Proteomquantifizierung stehen folgende Softwarepakete auf den Servern der MSPUB zur Verfügung und werden je nach Fragestellung für die Auswertung benutzt:

- (1) MaxQuant (& Perseus)
- (2) Skyline

- (3) ProSight
- (4) Merox/pLink/XiSearch/Kojak
- (5) DeNovoGUI
- (6) Metamorpheus
- (7) Fragpipe

§3.10 Die Nutzungsdauer der Geräte durch die einzelnen Projekte wird von den technischen Assistenten erfasst. Die erfassten Daten werden bei Bedarf statistisch ausgewertet. Für kostenpflichtige Nutzer dienen die Daten als Berechnungsgrundlage für das Nutzungsentgelt. Die MSPUB behält sich vor, aus technischen oder organisatorischen Gründen einzelne vorgemerkte Termine nach Rücksprache mit dem gebuchten Benutzer zu verschieben oder abzusagen.

§4 Probenahme und Massenspektrometrische Analyse

§4.1 Bei Service- wie auch Kooperationsprojekten bieten die wissenschaftlichen Mitarbeiter und/oder Leiter der MSPUB ausführliche Beratung bezüglich der Versuchsplanung, wichtiger Kontrollen und zur Probenvorbereitung an, sowie die quantitative Auswertung und Interpretation der massenspektrometrischen Daten.

§4.2 Proben für die massenspektrometrische Analyse müssen von den Ko-Antragstellern und Kooperationspartnern nach genauer Anweisung vorbereitet und können nach Terminvereinbarung abgegeben werden. Die Proben erhalten dann eine eindeutige und fortlaufende Identifikationsnummer (ID). Messtermine können in Absprache mit den wissenschaftlichen Mitarbeitern über einen Online-Kalender gebucht werden. In kleineren Umfang und bei freien Kapazitäten bietet das MSPUB dem Fachbereich Biologie die Möglichkeit einfache Serviceanalysen zur Proteinidentifikation durchführen zu lassen.

§4.3 Proben können entweder per Post oder persönlich zwischen 10 und 14 Uhr in der MSPUB (Raum 158b, Schlossplatz 8, 48149 Münster) gebracht werden. Die MSPUB übernimmt keine Haftung für die Proben. Toxische, pathogene sowie radioaktive Proben können nicht bearbeitet werden.

§4.4 Benutzer/innen müssen vor Abgabe ihrer Proben einen Probenfragebogen (Datei: Sample submission form) ausfüllen (siehe Anhang), die allgemeine Personen- und Projekt-bezogene Daten erfragt. Diese Daten können per EDV weiterverarbeitet werden; die Vertraulichkeit der Daten ist gewährleistet. Weiterhin erklären der Versuchsdurchführende und der übergeordnete Projektleiter auf dem Fragebogen mit ihren Unterschriften, dass die Proben chemisch und biologisch unbedenklich sind und die Sicherheit und Gesundheit der Mitarbeiter der MSPUB nicht gefährden. Ohne das korrekte Ausfüllen des Fragebogens und ohne Unterschriften ist keine Messung an den Geräten der MSPUB möglich. Der Fragebogen kann online heruntergeladen werden.

§4.5 Als Service-Dienstleistungen in geringem Umfang und mit geringer Priorität bietet die MSPUB an:

- a) Trypsin-Verdau und LC-MS/MS Analyse von gereinigten Proteinproben mit Datenbanksuche zur Proteinidentifikation,
- b) Genaue Massenbestimmung von intakten, gereinigten Proteinen
- c) Reinheitskontrolle von synthetisierten Peptiden

§4.6 Auf Kollaborationsbasis werden folgende massenspektrometrischen Analysen und Datenanalysen durchgeführt:

- a) Affinitätsreinigungen, Auftrennung und Identifizierung von komplexen Peptidgemischen mittels LC-MS/MS
- b) De-novo Sequenzierung von Proteinen
- c) Analyse von post-translationalen Modifikationen

d) Quantitative Datenanalyse und grafische Darstellung der Daten

§4.7 Kooperationsprojekte werden je nach Spezialgebiet zwischen den AGs Finkemeier und AG Hippler aufgeteilt. Diese Aufteilung wird je nach Bedarf und zwischen den Leitern des MSPUB abgestimmt.

§5 Datensicherung

Alle Rohdaten und ausgewertete Daten der MSPUB Forschungs-und Kooperationsprojekte werden zentral auf einem speziellen Laufwerk des Servers des Fachbereichs Biologie der WWU gespeichert und täglich gesichert. Die Rohdaten werden für 10 Jahre gespeichert und können bei Bedarf von den Kooperationspartnern eingesehen und kopiert werden. Daten aus Serviceprojekten werden über die WWU Cloud den Nutzern zum Download zur Verfügung gestellt und der Nutzer des Service ist für die Dauerhaftigkeit und Fehlerfreiheit der Sicherung der Daten selbst verantwortlich.

§6 Kosten

Das MSPUB ist bestrebt, die Betriebskosten (Wartung, Reparaturen, Verbrauchsmittel) aus Drittmitteln sowie Einnahmen aus Serviceleistungen zu bestreiten. Die im Betrieb anfallenden Kosten werden auf die wissenschaftlichen Gruppen umgelegt. Im Fall von Drittmittel geförderten gemeinsamen Projekten, in denen pauschale Mittel für die Arbeiten der MSPUB vorgesehen sind, werden Einzelleistungen nicht in Rechnung gestellt.

Die aktuell gültigen Preise werden in der aktuellen Nutzungsordnung veröffentlicht. Der Gesamtpreis für die Analysen setzt sich aus den Kosten für die Probenvorbereitung und einer messzeitabhängigen Pauschale zusammen.

Die Kosten für die Probenvorbereitung hängen von der Anzahl und der Art der Proben ab. Auf Anfrage wird ein Kostenvoranschlag erstellt.

Bezüglich der messdauerabhängigen Pauschale existieren zwei Kostenmodelle (siehe Tabelle): Ist eine einfache Peptid-/Proteinidentifizierung ausreichend, gelten die mit (A) gekennzeichneten Preise. Für Messungen, die umfangreichere Auswertungen erfordern (statistische Analyse, Clusteranalyse, *pathway analysis* etc.), wird die erhöhte Pauschale (B) angesetzt. Für Kooperationsanalysen gilt stets die günstigere Pauschale.

Die benötigte Messdauer variiert je nach Komplexität der Proben:

Probenkomplexität	Fraktionierung	Messdauer pro Probe*	Preis
gering (z.B. aufgereinigte Proteine)	-	2 h	50€ (A) 100€ (B)
mittel (z.B. Pull-Downs)	-	4 h	100€ (A) 200€ (B)
hoch (z.B. Gesamtproteom) normaler Abdeckungsgrad	-	6 h	150€ (A) 300€ (B)
hoch (z.B. Gesamtproteom) hoher Abdeckungsgrad	6x SCX oder vergleichbar	18 h	450€ (A) 900€ (B)

*Die Messdauer setzt sich wie folgt zusammen: Laden der Probe, chromatographische Auftrennung der Peptide mit zeitgleicher MS/MS-Messung, Reäquilibration der HPLC-Säule zur Vorbereitung der nächsten Messung. Die Preise ergeben sich aus den DFG-Richtlinien (25€ pro Gerätestunde für Standardanalysen/50€ pro Gerätestunde für Analysen mit zusätzlich erforderlicher wissenschaftlicher Unterstützung).

§7 Veröffentlichung von Daten

Die Publikation von Messdaten, die im Rahmen einer Kollaboration oder eines Gemeinschaftsprojekts erhalten wurden, ist mit der Leitung des MSPUBs abzusprechen und der wissenschaftliche Beitrag des MSPUBs angemessen anzuerkennen. Generell behält sich die MSPUB auf alle in der MSPUB generierten Daten das Urheberrecht vor. Bei Serviceanalysen geht das Urheberrecht mit der Bezahlung der Leistung auf den Auftraggeber über. Die Beteiligung der MSPUB an der Entstehung von Daten muss in jedem Fall entsprechend den

Regeln der guten wissenschaftlichen Praxis (siehe DFG-Richtlinie) bei deren Veröffentlichung berücksichtigt werden. Rechtfertigt der Umfang der Beteiligung eine Co-Autorenschaft von Mitarbeitern der MSPUB (z.B. Beteiligung an Versuchsplanungen, und/oder aufwendige Auswertungen und Interpretationen von Ergebnissen, Entwicklung von Methoden, ua.) so sind diese bei der Erstellung des Manuskriptes zu berücksichtigen. Jede andere Form der Beteiligung (Service) ist im Acknowledgement zu erwähnen, z.B. "We would like to acknowledge the assistance of the MSPUB of the WWU Münster supported in part by the DFG".