

Ihr Zeichen | Ihre Nachricht vom

Unser Zeichen | Unsere Nachricht vom

Datum

02. Januar 2014

## Nutzerordnung für das Geowissenschaftliche Festkörper NMR Spektrometer ASX400

Diese Nutzerordnung ist den Empfehlungen der DFG vom 25.11.2011 angelehnt ([http://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/programme/wgi/nmr\\_empfehlungen\\_2010.pdf](http://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/programme/wgi/nmr_empfehlungen_2010.pdf)) und **verbindlich für alle Nutzer** des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers.

### §1 Aufgabe

Die Aufgabe des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers des Institutes für Geologie, Mineralogie und Geophysik an der Ruhr-Universität Bochum besteht darin, Messungen am Spektrometer für die einzelnen Arbeitsgruppen des Institutes sowie benachbarte Fakultäten als auch für auswärtige geowissenschaftlich arbeitende Forschergruppen zu ermöglichen.

### §2 Ausstattung des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers

Das Gemeinschaftsprojekt "Geowissenschaftliches NMR" wurde 1993 von den Mineralogischen Instituten der Universitäten Bochum, Hannover, Kiel, Mainz und Münster bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) beantragt und von der DFG genehmigt. Das Bruker ASX 400 Festkörper NMR Spektrometer ist mit verschiedenen Probenköpfen ausgestattet. Die genaue Ausstattung ist in Anhang 1 bzw. unter <http://www.ruhr-uni-bochum.de/geowiss-nmr/equipment/> aufgeführt.

### §3 Nutzerkreis

Die Nutzung des Geowissenschaftlichen NMR-Spektrometers richtet sich vorwiegend an geowis-

senschaftlich orientierte Forscher. Diese sollen die Möglichkeit mit Hilfe der Kernspinresonanz Fragestellungen zu klären, die vorwiegend den atomaren Aufbau und hier vor allem die Lokalstruktur betreffen. Aber auch andere naturwissenschaftliche Disziplinen sind herzlich willkommen.

Im Wesentlichen wird hier nach internen, also Arbeitsgruppen des Institutes sowie fakultätsübergreifenden Gruppen innerhalb der Ruhr-Universität und externen Nutzergruppen aus dem Grundlagenforschungsbereich anderer Universitäten innerhalb der Bundesrepublik Deutschland unterschieden.

Innerhalb der Arbeitsgruppen wird wiederum unterschieden nach solchen, die ein langfristiges Projekt am Geowissenschaftlichen NMR Spektrometer planen und damit über mehrere Jahre regelmäßige Messungen durchführen und solchen, die kurzfristige, nicht regelmäßige Messzeiten benötigen und nur eine geringe Anzahl von Messungen durchführen müssen.

#### **§4 Leistungen des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers**

Das derzeitige Messangebot des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers geht aus der vorhandenen Ausstattung hervor (siehe §2). Eine Erweiterung ist durch Einwerben von entsprechenden Geräten und Meßtechniken (z.B. neue Probenköpfe) der jeweilig beteiligten Arbeitsgruppen möglich.

#### **§5 Experimentelle Durchführung und Betreuung**

Die Durchführung und Betreuung der Messungen hängt von der Art der Nutzung der jeweiligen Arbeitsgruppe ab. Langfristige Projekte von Arbeitsgruppen mit regelmäßigen Messungen werden durch Mitarbeiter dieser Arbeitsgruppe selbstständig durchgeführt. Die Interessenten werden vom betreuenden Personal in die Handhabung des Spektrometers und die benötigten Meßtechniken eingeführt, so dass Routinemessungen selbsttätig ohne Aufsicht durchgeführt werden können, je nach Eigenständigkeit auch am Wochenende. Beschädigungen, die durch Fehlbedienung oder Fahrlässigkeit der verantwortlichen Mitarbeiter entstehen, müssen durch den zuständigen Lehrstuhl ersetzt werden. Die Messzeitvergabe erfolgt wöchentlich nach Kalenderwochen (jeweils Montag – Sonntag).

Kurzfristige Messungen mit einer kleineren Anzahl von Proben, die nicht regelmäßig erfolgen, werden durch die das Spektrometer betreuenden Mitarbeiter durchgeführt.

## §6 Veröffentlichung der Daten

Bei Veröffentlichung der am Geowissenschaftlichen NMR Spektrometer aufgenommenen Daten in wissenschaftlichen Artikeln bittet der verantwortliche Laborleiter um Co-Autorenschaft. Für alle anderen Dokumente, bitten wir um Nennung in der Danksagung (Acknowledgements) wie folgt „Dr. Michael Fechtelkord vom Geowissenschaftlichen NMR Spektrometer am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum“.

## §7 Messzeitvergabe

Die Messzeitvergabe erfolgt bei einer entsprechenden Anzahl von beteiligten Langzeitprojekten halbjährlich und wird ansonsten kurzfristig vergeben. Sie kann bei den unter §9 angegebenen Mitarbeitern erfragt und beantragt werden. Langzeitprojekte mit einer pauschalen Buchung für das Kalenderjahr (01.01.-31.12.) genießen bei der Vergabe der Meßzeit Vorrang. Bei einer möglichen Überbuchung und Interessenskonflikten der beteiligten Nutzer entscheidet der verantwortliche Laborleiter. Die Messzeiten sind auf den Webseiten des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers demnächst einsehbar (<http://www.ruhr-uni-bochum.de/geowiss-nmr/schedule/>)

## §8 Nutzungsentgelte

Die Nutzung des Geowissenschaftlichen NMR-Spektrometers ist kostenpflichtig. Die Höhe der Nutzungsentgelte hängt dabei von der Art der Nutzung (eigenständige Messungen oder betreute Messungen) und vom Messzeitumfang ab (Staffelung in Stunden, Kalenderwochen und Kalenderjahre). Die Nutzungsentgelte können dem Anhang 2 entnommen werden.

## §9 Betreuendes Personal

Die Mitarbeiter des Geowissenschaftlichen NMR führen die Messungen für kleinere Messaufträge durch und arbeiten Mitarbeiter von Langzeitprojekten in das Gerät ein. Sie stehen auch für die Beratung der Nutzer zur Verfügung und sorgen zudem für die Wartung sowie Reparatur des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers. Die Kontaktinformationen der verantwortlichen Mitarbeiter befinden sich auf den Webseiten des Geowissenschaftlichen NMR Spektrometers. (<http://www.ruhr-uni-bochum.de/geowiss-nmr/kontakt.html.de>)

Dr. Michael Fechtelkord,  
Verantwortlicher Laborleiter  
Stand 01/2014

## Anhang 1

### Ausstattung des Festkörper-NMR Spektrometers ASX 400

#### *Ausstattung der Spektrometerkonsole*

Zur Ausstattung des Spektrometers (400 MHz,  $B_0 = 9.397$  Tesla) für  $^1\text{H}$  /  $^{19}\text{F}$  und X-Kerne gehört:

- **Supraleitendes Magnetsystem BC-94/89 mit Standard Dewar Konfiguration**  
8,9 cm Bohrung (Feldstärke bei 9,397 Tesla)
  - Helium Füllstandsmessgerät
  - Fixierter Magnetstand
  - RT Shim System für 13 Gradienten
  - Kryomagnet-Kontrolleinheit B-SN 18 mit Shimpower Versorgungssystem, Spinratenindikator und Helium Füllstandsmessgerät
- **Microprozessor gesteuertes Betriebssystem AMOS**  
incl. Auto-Spin und Shim System
- **Transmitter System für  $^1\text{H}$  /  $^{19}\text{F}$  Beobachtung**  
homo- / heteronukleare Einkopplung steuerbar in 0,01 Hz Schritten und digitalem Phasenschieber < 0,050, Festkörper-Leistungskontrolle über den gesamten Leistungsbereich, schnelle Leistungsschaltung mit power preselection 900W Pulsleistung, computergesteuert
- **X-Frequenz Breitband Transmittersystem für X-Frequenz Beobachtung**  
Puls und Entkopplung, Frequenz steuerbar in 0,01 Hz Schritten mit digitalem Phasenschieber in 0,050 Schritten. High power Pulsoperation mit schneller Leistungsschaltung, 1 kW Pulsleistung, computergesteuert
- **Y-Frequenz Breitband Transmittersystem**  
incl. 250 MHz Synthesizerfrequenzquelle, BLTX Leistungsverstärker (300W) Upgrade zum 3 Kanal Multichannel Interface
- **Computer gesteuerte Transmitter Abstimmereinheit**
- **Schneller 4 Phasenmodulator für  $^1\text{H}$  und X - Kern Kanal**  
mit unabhängiger Computersteuerung der Pulsamplitude und Phasenjustierung
- **Low noise high power  $^1\text{H}$  /  $^{19}\text{F}$  Vorverstärker**
- **Breitband X-Frequenz high power Vorverstärker**
- **Quadraturdetektion-Empfangssystem**  
mit ultra high Zwischenfrequenz, hohem dynamischen Bereich, großer Bandbreite und kurzer Totzeit
- **Routingsystem**  
für voll-computergesteuerte Einstellung fast aller Messeinstellungen
- **Multi-channel NMR Interface (MCI)**  
mit 16K Speicher pro Kanal für Phase, Amplitude und Frequency mit einer Zeiträte von 200 ns; ausgerüstet mit 2 Kanälen (Erweiterung auf drei Kanäle nur mit Y-Kanal Transmittersystem)
- **Datenakkumulationssystem incl. 3 MByte Acquisitionsspeicher**
- **Prozesscontroller**
- **RF routing für inverse und 01/02 Kohärenzexperimente**
- **RS232C gesteuertes Interface für Magnet-, Shim- und Spektrometersystem**
- **16 bit Digitizer, 250kHz Sampling Rate, max. Spektrenbreite mit QUAD 125kHz**
- **BC 132 12bit fast Digitizer (ADC)**  
bis zu einer dwell time von 4  $\mu\text{s}$  DMA transfer, unter 4  $\mu\text{s}$  2\*64 k buffer memory, dual time base

- **Intelligentes Interface für Acquisition- und Spektrometerkontrolle**  
incl.
  - Ethernet TCP/IP Interface zum Hostrechner
  - VME-bus Interface
- **Device Interface für Computersteuerung von externen Einheiten**  
z.B. Temperatursteuerung

### *Probenkopfausstattung*

- **7 mm CP/MAS double air bearing Probenkopf**  
für den Bereich  $^{15}\text{N}$  bis  $^{27}\text{Al}$ , mit  $^1\text{H}$  Entkopplerkanal
- **High Power X-Kern Breitlinienprobenkopf**  
5 mm Probendurchmesser, mit unabhängiger tuning, matching und Q Kontrolle, VT Bereich -150-  
+300°C
- **4 mm CP/MAS double air bearing Probenkopf**  
für den Bereich  $^{13}\text{C}$  -  $^{31}\text{P}$ , Entkoppler Kanal  $^1\text{H}$  und  $^{19}\text{F}$
- **Doppelrotation Probenkopf (DOR)**  
einzelner F1 Kanal
- **B-VT 2000S Temperaturkontrolleinheit**  
mit 25L dewar und flexibler, evakuierter Edelstahl-Transferlinie
- **$^{19}\text{F}$  4mm HP MAS Doppelresonanzprobenkopf**
- **DOTY Scientific Hochtemperatur MAS 7mm Standard Probenkopf**  
(T = (-90) - +650°C)

## Anhang 2

### Nutzungsentgelte für das Geowissenschaftliche NMR Spektrometer

#### a) INTERNE ARBEITSGRUPPEN

Die Mittel werden vor Aufnahme der Messungen per Rechnung zugunsten der für das Geowissenschaftliche NMR gültigen Finanzstelle abgewickelt.

##### a 1) *Kurzfristige nicht regelmäßige Messungen mit begrenzten Zeitaufwand*

Abrechnung auf Stundenbasis nach vorab kalkuliertem Meßzeitbedarf – Messungen werden von unserem Personal durchgeführt

Die Messungen werden personaltechnisch von unserer Seite durchgeführt. Der Interessent kann vor Auftragvergabe mit uns die Messungen und Fragestellungen durchgehen. Auf dieser Basis berechnen wir den Zeitbedarf für die Aufnahme der Spektren und die Spektrenausgabe (Plots). Die Messdaten können im Bruker WinNMR Format oder als ASCII File mitgenommen und selbst ausgewertet werden (z.B. mit DMFit2010 von D. Massiot).

Nutzungsentgelt pro angefangener Stunde: 5,00 €

Zusätzliche Kosten für Kühlgase oder Stickstoffgas bei Kühl/Heizmessungen bzw. Spektrenauswertung von unserer Seite werden separat fällig.

##### a 2) *Langfristige Projekte – Regelmäßige Messungen über längere Zeiträume*

Die Messungen (Routinemessungen) werden personaltechnisch von technischen Mitarbeitern / Doktoranden / Wissenschaftlern der einzelnen Arbeitsgruppen durchgeführt. Die Interessenten werden von uns vorab in die Bedienung des Spektrometers eingewiesen, so dass Routinemessungen selbsttätig ohne Aufsicht durchgeführt werden können, je nach Eigenständigkeit auch am Wochenende. Beschädigungen, die durch Fehlbedienung oder Fahrlässigkeit der verantwortlichen Mitarbeiter entstehen, müssen durch den zuständigen Lehrstuhl ersetzt werden. Die Messdaten können im Bruker WinNMR Format oder als ASCII File mitgenommen und selbst ausgewertet werden (z.B. mit DMFit2010 von D. Massiot).

Nutzungsentgelt pauschal pro Tag:	50,00 €
Nutzungsentgelt pauschal pro Kalenderwoche (Mo – So):	250,00 €
Nutzungsentgelt pauschal pro Kalenderjahr (01.01.-31.12.) (mindestens 12 Wochen; höchstens 15 Wochen):	2.500,00 €

Zusätzliche Kosten für Kühlgase oder Stickstoffgas bei Kühl/Heizmessungen bzw. Spektrenauswertung von unserer Seite werden separat fällig.

b) EXTERNE ARBEITSGRUPPEN

Die Mittel werden nach Aufnahme der Messungen per Rechnung zugunsten der für das Geowissenschaftliche NMR gültigen Finanzstelle abgewickelt.

Die Kosten richten sich nach der Nutzungsart wie unter Punkt a1) und a2) beschrieben.

Arbeitsgruppe: \_\_\_\_\_

Institut: \_\_\_\_\_

Universität: \_\_\_\_\_

Adresszusatz: \_\_\_\_\_

Straße: \_\_\_\_\_

Postleitzahl, Ort: \_\_\_\_\_

Telefon: \_\_\_\_\_

Fax: \_\_\_\_\_

e-mail: \_\_\_\_\_

### Anerkennung der Nutzerordnung

Der Inhalt der Nutzerordnung 2012 für das Geowissenschaftliche NMR Spektrometer des Institutes für Geologie, Mineralogie und Geophysik an der Ruhr-Universität Bochum in der Fassung 01 / 2014 ist uns bekannt. Wir erkennen alle Rechte und Pflichten, die sich aus der Nutzerordnung 2014 ergeben, an.

Ort und Datum: \_\_\_\_\_ Unterschrift: \_\_\_\_\_

Name des Unterschreibenden in Druckschrift: \_\_\_\_\_

(Institutsstempel)