

Hinweise zur Beantragung und zum Betrieb von NMR-Spektrometern

Empfehlungen des Ausschusses für wissenschaftliche Geräte und Informationstechnik der DFG

Mai 2022

1. Einleitung

Die Beschaffung von NMR-Spektrometern (Kernspinresonanz-Spektrometer) mit Kosten über 200.000 Euro erfolgt an deutschen Hochschulen in der Regel im Rahmen der Großgeräteprogramme „Forschungsgroßgeräte nach Art. 91b GG“ (FUGG) oder „Großgeräte der Länder“ (LAGG).

Die Beschaffung eines NMR-Spektrometers sollte grundsätzlich auf der Basis eines NMR-Gesamtkonzepts der Hochschule geplant werden. Dabei sollte erwogen werden, ob der Bedarf nicht durch bereits an der Hochschule vorhandene Geräte bzw. durch Kooperationen mit anderen wissenschaftlichen Einrichtungen abgedeckt werden kann, und es sind generell alle Fachbereiche zu berücksichtigen, da NMR in den Natur- und Lebenswissenschaften vielfältigen Einsatz findet und die jeweiligen NMR-Geräte auch vielfältig zum Einsatz kommen können. Die Leistungsklasse des geplanten NMR-Geräts sollte auch immer vor dem Hintergrund aller vorhandener Geräte gewählt sein.

2. NMR-Gesamtkonzept

Jede Hochschule, die mehr als ein NMR-Gerät betreibt, sollte über ein NMR-Gesamtkonzept verfügen, welches alle zentral und dezentral aufgestellten NMR-Geräte umfasst. Die vorteilhaften Effekte einer gemeinsamen Aufstellung aller NMR-Geräte (s.u.) können in einem guten NMR-Gesamtkonzept auch für eine Mischung aus zentralen und dezentralen Geräten in gewisser Weise erreicht werden. In jedem Fall ist es unerlässlich, die Investitionsplanung für Gerätemodernisierung, Neubeschaffung und Aufrüstung mit Zubehör (insbesondere Probenköpfe) im Rahmen des Gesamtkonzepts durchzuführen. Eine sinnvoll abgestimmte Ausstattung sowohl der zentralen als auch der dezentralen Geräte maximiert die Messmöglichkeiten und reduziert redundante Investitionen und damit verbundene Folgekosten. Ein systematischer Erfahrungsaustausch der gerätebetreibenden Personen und die Möglichkeit, Auslastung der Geräte auch über Institutsgrenzen hinweg zu optimieren, sind weitere Vorteile bzw. Inhalte eines NMR-Gesamtkonzepts.

In Großgeräteanträgen zur Beschaffung oder Modernisierung eines NMR-Geräts kann das von der Hochschule verfolgte NMR-Gesamtkonzept entweder im Antrag dargestellt werden (im Kapitel 2 *Betriebs- und Nutzungskonzept*) oder als eigenes Dokument mit eingereicht werden. Während die Balance zwischen zentralem und dezentralem Betrieb an jeder Hochschule je nach Gegebenheiten unterschiedlich gestaltet werden kann, ist das NMR-Gesamtkonzept, das alle NMR-Geräte einschließt, für einen Großgeräteantrag unerlässlich.

3. NMR-Expertise

Es ist unerlässlich, dass erfahrene NMR-Experten und Expertinnen den effizienten Betrieb von NMR-Spektrometern garantieren. In NMR-Großgeräteanträgen muss immer erkennbar sein, wer über die

notwendige methodenbezogene Expertise und Erfahrung verfügt. Dies können ein erfahrener NMR-Wissenschaftler oder eine erfahrene NMR-Wissenschaftlerin ebenso wie ein erfahrener NMR-Leiter oder eine erfahrene NMR-Leiterin sein, wobei letztere nach außen unter Umständen nicht so sichtbar auftreten, oft aber in der NMR-Community sehr wohl bekannt sind.

4. Zentrale und dezentrale Nutzung

Die Aufstellung von NMR-Spektrometern an einem gemeinsamen Ort befördert den Erfahrungsaustausch sowohl zwischen technischen als auch zwischen wissenschaftlichen Mitarbeitern und Mitarbeiterinnen, die die NMR-Geräte betreiben und/oder benutzen. Es wird nicht nur die Verbindung von Routinebetrieb und aktueller Forschung gestärkt, sondern die gemeinsame Aufstellung ermöglicht auch Synergieeffekte bei Wartung, Reparatur, Klimatisierung und Versorgung mit Kryogenen. Auch ohne zentral gesteuerte Messzeitvergabe wird die Auslastung der höherwertigen Ausstattung optimiert. Wenn dediziertes Personal die Messungen durchführt, werden die NMR-Spektrometer effizient genutzt und Geräteschäden durch Fehlbedienung vermieden.

Es erscheint unproblematisch, bei solchen gemeinsam aufgestellten Geräten die Nutzung auf bestimmte Gruppen aufzuteilen, die sich in Betriebs- und Nutzungsprofilen unterscheiden, z.B. bestimmte NMR-Geräte der Anorganischen Chemie bzw. der Organischen Chemie zuzuordnen.

Dedizierte Geräte für spezielle Anwendungen profitieren ebenfalls von der zentralisierten Aufstellung.

5. Auslastung und Nutzungsanteile

In DFG-Großgeräten wird die geplante Nutzung für Forschung sowohl hinsichtlich der vorgesehenen Nutzungszeit (in Stunden pro Jahr) also auch der Nutzungsanteile für die im Antrag von den jeweiligen Arbeitsgruppen präsentierten Forschungsvorhaben abgeschätzt. Natürlich können sich nach Beschaffung des Geräts etwas andere Nutzungsanteile und Nutzungszeiten ergeben als im Antrag vermutet.

Wenn allerdings im verpflichtenden Bericht nach drei Jahren Nutzung die Gesamtauslastung weit unter der im Antrag prognostizierten Auslastung liegt, muss dieser Umstand begründet werden. Gleichmaßen ist begründungspflichtig, wenn der Nutzungsbericht für Arbeitsgruppen, die wesentlich zur Begründung der Anschaffung beigetragen haben, keine Nutzung dokumentiert.

Großgeräteanträge sollte daher die Auslastung und Verteilung der Nutzungsanteile realistisch darstellen und absehbare Veränderungen (Ausscheiden von Personen oder anstehende Neuberufungen) miteinbeziehen. Im laufenden Betrieb sollte die softwaregestützte Erfassung von Nutzungszeit je Arbeitsgruppe der Standard sein. In DFG-Großgeräteanträgen muss die Auslastung aller NMR-Geräte angegeben werden (unter 2.1 *Ausstattung am Standort*). Diese Zahlen müssen eine (nachweisbare) Datengrundlage haben, bloße Schätzung ist unzureichend.

Weitere Auskünfte erteilt:

Dr. Christian Renner / Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Kennedyallee 40 / 53175 Bonn

Tel. +49 (228) 885-2324

Christian.renner@dfg.de

www.dfg.de