



Nutzungsordnung der Abteilung für NMR-Spektroskopie des Departments für Chemie und Biochemie der Universität zu Köln

04/2026

1. Auftrag und Zielsetzung

Die Abteilung für NMR-Spektroskopie ist eine zentrale Einrichtung des Departments für Chemie und Biochemie an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln. Sie handelt als eigenständige wissenschaftliche Einrichtung des Departments für Chemie und Biochemie, führt unabhängige Forschung im Gebiet der NMR-Spektroskopie durch und ermöglicht allen wissenschaftlichen Mitgliedern des Departments sowie externen Wissenschaftler*innen die Nutzung der NMR-Spektroskopie. Dies beinhaltet die Anwendung der NMR sowohl in der Analytik als auch in der Forschung, und die Vermittlung der notwendigen Kenntnisse der Methode in der Lehre im Rahmen der Studiengänge des Departments für Chemie und Biochemie. Zudem kooperiert die NMR-Abteilung in Forschungsprojekten mit nationalen und internationalen Forschungseinrichtungen und trägt so zur Vernetzung des Departments für Chemie und Biochemie bei. Die/der Leiter*in der Abteilung für NMR-Spektroskopie ist bestrebt den neuesten Stand der Technik aller Spektrometer zu gewährleisten, neue NMR-Methoden zu implementieren und zu entwickeln und diese dem Department für Chemie und Biochemie zugänglich zu machen.

2. Struktur und Organisation

Die Abteilung für NMR-Spektroskopie wird von einem*r Wissenschaftler*in geleitet, die/der für die Aufgaben in Forschung und Lehre, die Administration, die Personalführung und die angemessene Geräteausstattung verantwortlich ist. Sie/er wird insbesondere für die Gewährleistung des Routineanalytik-Betriebs und die Hard- und Software durch eine*n Ingenieur*in, sowie für die Durchführung von NMR-Messungen durch zwei technische Assistent*innen unterstützt.



3. Geräte

Derzeit betreibt die Abteilung für NMR-Spektroskopie sechs Spektrometer verschiedener Magnetfeldstärke (je zweimal 400 MHz und 500 MHz, und je einmal 300 MHz und 600 MHz, siehe <https://nmr.chemie.uni-koeln.de/>). Die Ausstattung der NMR-Spektrometer soll möglichst komplementär zueinander sein und einen hohen Durchsatz an Proben ermöglichen um den Einsatz eines breiten NMR-Methodenspektrums zu gewährleisten. Zwei Spektrometer (300 MHz und einmal 400 MHz) stehen als Open-Access Geräte nach Einweisung durch die/den Leiter*in und Mitarbeiter*innen der Abteilung für NMR-Spektroskopie den Nutzer*innen für den Routineanalytik-Betrieb zur Verfügung. Vier weitere Geräte (400 MHz, zweimal 500 MHz und 600 MHz) werden als Forschungsgeräte von den Mitarbeiter*innen der Abteilung für NMR-Spektroskopie für Auftragsmessungen der Nutzer*innen betrieben.

4. Betriebskonzept

Die Open-Access Geräte können, abgesehen von Zeiten in denen Wartungsarbeiten (bspw. Reparaturen oder Füllen von Kühlmitteln) durchgeführt werden müssen, jederzeit von den Nutzer*innen genutzt werden. Alle Nutzer*innen können an den Forschungsgeräten zudem Messungen mit besonderen Anforderungen in Auftrag geben (bspw. Heterokern-Messungen, Dynamikmessungen, Messungen von Proben mit geringer Substanzmenge). Diese Messungen werden von den Mitarbeiter*innen der Abteilung für NMR-Spektroskopie an einem geeigneten Gerät durchgeführt. Nach Absprache können auch Termine für Auftragsmessungen vereinbart werden, bspw. bei Titrations- oder Zeitreihen, Messungen instabiler Substanzen oder ähnlichem. Jede*r Nutzer*in erhält nach Zusicherung der Einhaltung der durch die/den Leiter*in der Abteilung für NMR-Spektroskopie festgelegten Regeln zur Nutzung der Spektrometer einen eigenen Account im Labor-Informations- und Management-System (LIMS) (<https://laplace.nmr.uni-koeln.de/>) der Abteilung für NMR-Spektroskopie. Diese Regeln sind durch die/den Leiter*in der Abteilung für NMR-Spektroskopie spezifiziert und werden im Rahmen einer individuellen Einweisung in die Nutzung der NMR-Geräte kommuniziert. Sie betreffen die Handhabung der NMR-Proben und Spektrometer, und sind Voraussetzung für einen reibungslosen Analytik-Betrieb. Über das LIMS können die Routinemessungen durchgeführt und Messungen in Auftrag gegeben werden.



Bei wissenschaftlichen Fragestellungen berät die/der Leiter*in der Abteilung für NMR-Spektroskopie, sowohl bei der Auswahl oder Entwicklung geeigneter NMR-Methoden als auch bei der Interpretation und Auswertung von NMR-Spektren. In den vom Department für Chemie und Biochemie angebotenen Studiengängen vermittelt die/der Leiter*in der Abteilung für NMR-Spektroskopie die notwendigen Kenntnisse zur Nutzung der NMR-Spektroskopie. Darüber hinaus führt die/der Leiter*in bei Bedarf jede*n interessierte*n Nutzer*in in die NMR-Spektroskopie ein. Die Ansprechpersonen der NMR-Plattform sind auf <https://nmr.chemie.uni-koeln.de/> aufgeführt.

5. Nutzungsgebühren

Die Betriebskosten der Abteilung für NMR-Spektroskopie werden entsprechend der Nutzung den Arbeitskreisen des Departments für Chemie und Biochemie jährlich in Rechnung gestellt. Als Orientierung für die Höhe der Gebühren gelten die Hinweise der Deutschen Forschungsgemeinschaft zu gerätebezogenen Nutzungskosten und Core Facilities (<https://www.dfg.de/resource/blob/168404/55-04-de.pdf>). Die Kühlmittel (flüssiger Stickstoff und flüssiges Helium) werden aus Mitteln des Departments für Chemie und Biochemie getragen. Alle Spektrometer der Abteilung für NMR-Spektroskopie sind an die Helium-Rückverflüssigungsanlage des Departments für Physik der Universität zu Köln angeschlossen, wodurch die Beschaffung von flüssigem Helium in kooperativer Zusammenarbeit mit dem Department für Physik kosteneffizient realisiert werden kann.

6. Datenmanagement

Die Sicherung der NMR-Daten, die über das LIMS zur Verfügung gestellt werden, liegt in der Verantwortung der Nutzer*innen. Zur Auswertung und Analyse bietet das Department für Chemie und Biochemie Zugang zu der Software Mnova NMR, deren Lizenzvergabe und Nutzung von der Abteilung für NMR-Spektroskopie organisiert und verwaltet wird. Alternativ wird die Nutzung der über eine akademische Lizenz frei zugänglichen NMR-Auswertungssoftware TopSpin von Bruker empfohlen.



7. Sicherheit

Die Bedienung der NMR-Spektrometer ist nur nach vorheriger Einweisung in die Nutzung der Geräte, die eine Sicherheitsunterweisung durch die/den Leiter/in Abteilung für NMR-Spektroskopie beinhaltet, erlaubt. In NMR-Laboren können besondere Gefahren durch die Nutzung der Hochfeldmagnete, insbesondere für Personen mit Magnetfeld-sensitiven Implantaten (bspw. Herzschrittmacher), sowie der Kühlmittel (Flüssigstickstoff und flüssiges Helium) ausgehen.

8. Urheberschaft und Veröffentlichungen

Sofern keine über Analytik-Messungen hinausgehende wissenschaftliche Zusammenarbeit vereinbart wurde, obliegt die alleinige Urheberschaft der NMR-Daten bei den Nutzer*innen. Bei einer wesentlichen Beteiligung an Konzeption oder Durchführung von Experimenten und/oder der wissenschaftlichen Analyse der NMR-Daten sind die Mitarbeiter*innen der Abteilung für NMR-Spektroskopie entsprechend der DFG-Leitlinien zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in die Autorenschaft aufzunehmen. Bei Publikationen von Daten aus dem Routineanalytik-Betrieb wird um eine Erwähnung in der Danksagung gebeten, bspw. durch „We gratefully acknowledge support in NMR spectroscopy from the NMR Facility, Department of Chemistry and Biochemistry, University of Cologne.“.