

Nutzerordnung

1) Nutzerprojekte und Organisation der Plattform

Die MS Plattform bietet allen Forschern, insbesondere denen des Biozentrums Köln und des CEPLAS Clusters, die Identifikation und Quantifikation von Metaboliten aus diversen biologischen Matrices an.

Die Serviceleistung beinhaltet dabei grundsätzlich die Analyse der gewünschten Metabolitklassen mittels chromatographischer und massenspektrometrischer Verfahren. Je nach Bedarf wird der Forscher bei der Erörterung der Probenvorbereitung, des experimentellen Designs, der Datenauswertung sowie der Aufarbeitung der Rohdaten zur Veröffentlichung unterstützt.

Es wird die Möglichkeit geboten, Proben im Hochdurchsatz mit automatisierter Auswertung zu vermessen als auch Identifikation und basale Strukturaufklärung von unbekannt Substanzen mittels hochauflösender MS wie auch MSⁿ.

Die Nutzer geben Ihre bereits extrahierten Proben in den bereitgestellten Gefäßen in der Plattform ab und erhalten die Ergebnisse der Analysen in der vorher vereinbarten Form.

2) Geräte

Für die massenspektrometrischen Messungen stehen folgende Geräte-/Kopplungsmöglichkeiten zur Verfügung:

Ein QTRAP 5500 System (AB Sciex), einem Hybrid-Triple Quadrupol / Lineare Ionenfalle-Massenspektrometer, welches an eine 1260 HPLC (Agilent) oder einen Advion TriVersa Nanomate gekoppelt werden kann. Die Ionenquelle erlaubt sowohl Electrospray Ionisierung (ESI) als auch Atmospheric Pressure Chemical Ionisierung (APCI), weiterhin kann eine Nano-ESI Ionenquelle angeschlossen werden.

Die maXis 4G (Bruker) ein Quadrupol / Time-of-Flight Gerät kann an eine Ultra 3000 UHPLC (Dionex) oder einen 450 GC (Bruker) gekoppelt werden. Die Ionenquelle erlaubt ebenfalls ESI und APCI Ionisierung.

Die QExactive (Thermo), ein Orbitrap System, kann an eine Accela UPLC (Thermo) gekoppelt werden und Fraktionen können parallel zur MS Analyse gesammelt werden. Zur Ionisierung steht eine nano ESI/ ESI Quelle zur Verfügung.

Die ICP-MS 7700 (Agilent), ein *Inductively coupled plasma* Massenspektrometer, steht zur Gesamtelementanalyse zur Verfügung.

Für die Anwendung von *Matrix-assisted laser desorption/ionization* (MALDI) Imaging stehen ein MALDI TOF (AB Sciex) sowie ein MALDI Bruker Ultraflex zur Verfügung.

Die oben aufgeführten Geräte werden in der Regel ausschließlich von den geräteverantwortlichen Mitarbeitern bei Durchführung der angefragten Analysen bedient. Eine Bedienung durch die Nutzer selbst ist nicht vorgesehen. Die Bedienung der Geräte

durch Studenten/Doktoranden/PostDocs im Rahmen von Kursen und Praktika erfolgen nur unter Anleitung.

3) Nutzungsberechtigung und Prioritäten

Bei freien Kapazitäten erfolgt die Bearbeitung der Proben anhand des Abgabedatums. Bei vollständiger Auslastung wird die Reihenfolge, in der die eingehenden Proben analysiert werden durch folgenden Prioritätenschlüssel bestimmt:

- i) Arbeitsgruppen des Biozentrums Köln sowie des CEPLAS Clusters
- ii) Analysen für kurz vor der Veröffentlichung stehende Projekte oder bereits in Revision befindliche Manuskripte
- iii) Externe akademische Kooperationspartner

Sollte es zu einer Überlastung kommen, sodass nicht alle Nutzungsanfragen erfüllt werden können, wird sich vorbehalten, vorübergehend nur Analysen der Priorität (i) anzunehmen.

Die endgültige Entscheidung über die Reihenfolge der Bearbeitung liegt bei der Leitung bzw. dem Operator.

4) Gebühren

Die Plattform erhebt Gebühren für routinemäßig laufende Analysen. Diese Gebühren werden für die Anschaffung von Software & Updates sowie Standardsubstanzen, Chemikalien, Verbrauchsmaterial sowie der Methodenentwicklung verwendet.

Gerade in dem noch relativ jungen Forschungsbereich Metabolomics gibt es noch reichlich Entwicklungsarbeit zu leisten, sodass auch hier die Plattform bemüht ist, kontinuierlich weitere massenspektrometrische Methoden zu etablieren. Dies gilt auch für die Handhabung bzw. Analytik von bisher in der Plattform noch nicht analysiertem Probenmaterial. Bei Analysen, bei denen in der Plattform noch nicht routinemäßig laufende Verfahren angewendet werden oder für die erst eine Methode entwickelt werden muss, kann nicht von vornherein garantiert werden, dass der Nutzer letztendlich verwertbare Ergebnissen erhält.

Details zu den entstehenden Kosten werden im Rahmen eines Agreements während des Beratungsgesprächs festgelegt.

Kosten für die reinen Messzeiten LC/GC MS werden für 8h bzw. 24h veranschlagt.

Für die Nutzung der ICP/MALDI MS werden die Kosten per Probe abgerechnet.

5) Kontaktaufnahme und Probenübergabe

Bei Initiierung eines neuen Projekts muss ein Termin für eine Projektbesprechung mit der Leitung vereinbart werden.

Kontakte

Dr. Sabine Metzger (LC-M, QTRAP, QqTOF, ICP-MS)
Biozentrum Köln
Zülpicher Str. 47a
50674 Köln
s.metzger@uni-koeln.de
0221/470-8521

Dr. Susanne Neupert (MALDI-MS)
Biozentrum Köln
Zülpicher Str. 47a
50674 Köln
mail@susanne-neupert.de
0221/470-8267

Katja Preuss (LC-Q-Exactive-MS)
Biozentrum Köln
Zülpicher Str. 47a
50674 Köln
kpreuss@uni-koeln.de
0221/470-6636

In diesem streng vertraulichen Gespräch werden die geplanten Versuche besprochen und die optimal geeignete Messmethode ermittelt. Darüber hinaus wird der zeitliche und finanzielle Aufwand bestimmt. Technisches Personal sowie Geräteoperatoren werden von der Leitung ggf. zur Besprechung hinzugezogen. Die Abgabe von Proben für eine massenspektrometrische Analyse bzw. die Nutzung von Geräten ist nur nach vorheriger Rücksprache bzw. Anmeldung bei der Leitung möglich.

Die Nutzer müssen vor Abgabe der Proben ein Probenformular ausfüllen, auf dem Personen-, Projekt- und Proben-bezogene Daten abgefragt werden. Darüber hinaus wird mit Unterschrift bestätigt, dass die Proben chemisch und biologisch unbedenklich sind und die Sicherheit und Gesundheit der Mitarbeiter der Facilities nicht gefährden sowie dass die Nutzungsbedingungen und die Gebühren anerkannt werden. Ohne ein vollständig ausgefülltes und unterschriebenes Formular werden die Proben nicht bearbeitet. (Formular zum Download).

Keine Nutzungsgebühr soll im Rahmen der Lehre erhoben werden.

Rechnungen über die Nutzung werden vierteljährlich an die Arbeitsgruppenleiter gestellt.

6) Datenanalyse und Datensicherung

Die unmittelbare Speicherung der akquirierten Messdaten erfolgt auf dem PC. Diese Roh-Daten werden mit den dazugehörigen Auswertungen auf Servern des Rechenzentrums der Universität zu Köln langfristig archiviert ("Scale out File Service" (SoFS)). Die Synchronisierung der Speicherlaufwerke erfolgt durch die Mitarbeiter. Die Datensicherung findet am Rechenzentrum in mehrfacher Kopie statt, sodass ein vollständiger Datenverlust praktisch ausgeschlossen ist. Die Nutzer haben keinen Zugriff auf die am Rechenzentrum gespeicherten Daten. Die Nutzung des SoFS wird nicht in Rechnung gestellt.

Die vereinbarten Kontrollen zur Integrität der Messmethode / des Gerätes werden dem Nutzer für den Zeitraum der Messung in ausgewerteter Form zur Verfügung gestellt.

Die Datenanalyse erfolgt je nach Absprache durch die Mitarbeiter oder die Nutzer. Nach Abschluss des Projektes erhält der Nutzer alle Rohdaten in Kopie, sowie die Auswertung im vorher vereinbarten Umfang.

7) Publikation von Ergebnissen

Hat die Beteiligung der Mitarbeiter maßgeblich zum wissenschaftlichen Gelingen des Projekts beigetragen (z.B. Entwicklung neuer Methoden, aufwendige Auswertungen (Grafiken), Interpretationen von Ergebnissen), ist eine Co-Autorenschaft gerechtfertigt. Jede andere Form der Beteiligung ist in den Acknowledgements bzw. in der Danksagung von zu erwähnen. Die Unterschrift des Acknowledgement Agreements ist Voraussetzung für die Analyse (Formular zum Download).

8) Konsequenzen bei Nichtbeachtung

Werden die in dieser Nutzerordnung genannten Richtlinien wiederholt missachtet, kann die Gruppe von der weiteren Nutzung der ausgeschlossen werden

Köln, 22.07.2016