

Massenspektrometrie Plattform

Department für Chemie und Biochemie

Institut für Organische Chemie, Greinstrasse 4, 50939 Köln

Institut für Biochemie, Zulpicher Str. 47a, 50674 Köln

Nutzungsordnung

27.10.2025

Inhalt

1. Auftrag und Zielsetzung
2. Struktur und Organisation der Massenspektrometrie Plattform
3. Geräte und Leistungsangebote
4. Betriebskonzept
5. Datenmanagement
6. Sicherheit
7. Urheberschaft & Veröffentlichungen

Anlage 1. Personal

Anlage 2. Instrumente und Geräte

1. Auftrag & Zielsetzung

Die Massenspektrometrie (MS) Plattform des Departments für Chemie und Biochemie der Universität zu Köln (UzK) ist eine Einrichtung des Departments für Chemie und Biochemie der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät (MNF) der UzK. Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer der Massenspektrometrie Plattform verbindlich. Die Einbindung der Massenspektrometrie Plattform in die Forschungsaktivitäten und in die Lehre im Department für Chemie und Biochemie, sowie der MNF der UzK regelt die übergeordnete Ordnung der Analytischen Plattformen des Departments für Chemie und Biochemie der UzK.

2. Struktur und Organisation der MS-Plattform

2.1 Leitung der Massenspektrometrie Plattform

Die wissenschaftliche, technische und Personal-Verantwortung hat der Leiter der Massenspektrometrie Plattform:

Professor Dr. Mathias Schäfer

Massenspektrometrie Plattform
Department für Chemie und Biochemie
Greinstrasse 4, 50939 Köln
T 0221 470 3086
F 0221 470 3064
email: mathias.schaefer@uni-koeln.de

2.2 Personal der Massenspektrometrie Plattform

Die Personalausstattung und die dienstrechtliche Zuordnung der Mitarbeiter/innen der Massenspektrometrie Plattform im Department für Chemie und Biochemie regelt die übergeordnete Ordnung der Analytischen Plattformen des Departments für Chemie und Biochemie der UzK.

Die Mitarbeiter/innen der Massenspektrometrie Plattform weist **Anhang 1**. Personal, aus.

3. Geräte und Leistungsangebote

Die Geräte der Massenspektrometrie Plattform werden in **Anhang 2**. Instrumente und Geräte, ausgewiesen.

Folgende Leistungen werden am Standort (Institut für Organische Chemie) angeboten:

- A) Probenvorbereitung
- B) Messung von EI und CI-MS mit direkter Probenzufuhr über eine Schubstange (low Res und high Res oder mit GC Fraktionierung)
- C) Messung von ESI-MS mit direkter Probenzufuhr über eine Spritzenpumpe (low Res) und high Res (akkurate Ionenmassen)
- D) Produktionen MS Spektren mit Stoßaktivierung massenselektierter Vorläuferionen in einer Ionenfalle mit ESI-MS; ESI-MS_n, Registrierung der Produktionen bei hoher Auflösung
- E) Anleitung und Beratung zur Strukturaufklärung und Interpretation der Messergebnisse

Folgende Leistungen werden am Standort (Institut für Biochemie) angeboten:

- I) Messung von ESI-MS über Spritzenpumpe oder Autosampler

J) Messung von ESI-MS mit spezifischen MRMs gekoppelt mit HPLC (Quantifizierung möglich)

K) Fraktionierung der Proben möglich (UV oder Fluoreszenz basiert) (analytisch)

4. Betriebskonzept

4.1. Nutzungsberechtigte der Massenspektrometrie Plattform

Nutzungsberechtigt sind Angehörige des Departments Chemie und Biochemie. Messaufträge von Angehörigen anderer Fachbereiche und Departments der Universität Köln sowie von externen Antragstellern werden bei freien Kapazitäten bearbeitet. Die Leitung der Massenspektrometrie Plattform ist für alle Fragen der Nutzung zuständig. Er oder ggfls. instruierte Mitarbeiter/innen weisen in die Geräte ein.

4.2. Zugangs- und Nutzungsregelungen

Im Regelfall erfolgt Service-Nutzung: Die Mitarbeiter/innen der Plattform führen je nach Bedarf die Probenvorbereitung, Messung der Proben und routinemäßige Auswertung der Spektren und Ergebnisse durch. Die Proben müssen während den üblichen Arbeitszeiten abgegeben werden. Die entsprechenden Formulare können von der Homepage der Massenspektrometrie Plattform heruntergeladen werden und werden vollständig ausgefüllt. Abgegebene Proben müssen ausreichend gekennzeichnet werden.

Nach Einweisung können MS-Experimente in bestimmtem Fällen auch selbstständig von autorisierten Mitarbeitern durchgeführt werden:

Messungen mit **ESI-MS-** und **GC-MS** können nach Einweisung und Freigabe durch den Plattformleiter von Angehörigen des Departments für Chemie und Biochemie durchgeführt werden. Eine Einweisung in die Instrumente umfasst auch zwingend eine Sicherheitsbelehrung. Eine Einweisung durch nicht autorisierte Personen ist nicht zulässig. Die Nutzer müssen ihre Messungen im Logbuch eintragen bzw. die Messung entsprechend dokumentieren. Die Proben müssen nach den Messungen wieder mitgenommen und die MS-Geräte gereinigt hinterlassen werden.

Spezial-Messungen und **komplexe Auswertungen** (evtl. Strukturaufklärungen) können durch die Mitarbeiter/innen der Abteilung durchgeführt werden. Rücksprache mit der wissenschaftlichen Leitung der Massenspektrometrie Plattform ist Voraussetzung.

Selbstnutzer/innen verpflichten sich:

Die geltenden Sicherheitsbestimmungen im Labor zu befolgen, Beschädigungen zu vermeiden und technische Probleme der Abteilungsleitung unverzüglich mitzuteilen. Den DFG-Empfehlungen zu guter wissenschaftlicher Praxis (GWP) ist Folge zu leisten.

Nutzermeeting:

Die Massenspektrometrie Plattform organisiert nach Bedarf und in regelmäßigem Turnus, mind. einmal jährlich, Nutzermeetings zur Qualitätssicherung und zur Stärkung der Interaktion mit den Nutzern.

4.3. Kostenumlage und Kostenpauschalen

Die Kosten, der in Anspruch genommenen Leistungen / bzw. der Nutzung der Geräte der MS-Plattform, werden den Angehörigen des Departments für Chemie und Biochemie der UzK in Rechnung gestellt.

Bei der Berechnung der Kosten wird zwischen Universitäts-Internen und Universitäts-Externen Nutzern unterschieden. Für externe Nutzer/innen werden Rechnungen je nach Auftragsumfang unter Berücksichtigung einer Vollkostenkalkulation erstellt.

Antragsteller/ Nutzer	ESI-, EI-, CI (HR) MS	Wissenschaftlicher Support	LCMS8060 Triplequadrupole (Shimadzu)
Nutzer UzK	250 €/Tag (8h) bzw. 125 €/halber Tag	25 €/h (optional)	250 €/Tag (8h) bzw. 125 €/halber Tag

Die Abrechnungen erfolgen mindestens einmal pro Jahr. Die Rechnungen werden nach Arbeitsgruppen aufgeschlüsselt den Instituten zugeschickt. Werden die Abrechnungen nicht nach einer Zahlungsfrist von 4 Wochen beglichen, erfolgt eine Mahnung. Bei fortgesetzter Säumnis erfolgt die Einstellung der Messtätigkeit für die betreffende Einrichtung.

5. Datenmanagement

Die wissenschaftlichen Daten, die in der Massenspektrometrie Plattform generiert werden, sind zunächst auf den Geräterechnern gespeichert. Die Sortierung erfolgt dabei nach a) Arbeitsgruppe, b) Nutzer/in und c) Probenbezeichnung., bzw a) Datum, b) Arbeitsgruppe, c) Nutzer/in, d) Probenbezeichnung am Standort Biochemie. Alle relevanten Daten werden regelmäßig zur Langzeitspeicherung auf ein externes Datenträgersystem des RRZK übertragen (siehe hier: <https://rrzk.uni-koeln.de/daten-speichern-teilen/online-speicher-sofs/sofs-fuer-einrichtungen>).

6. Sicherheit

Alle Mitarbeiter/innen und Nutzer/innen der Massenspektrometrie Plattform erhalten jährlich eine Sicherheitseinweisung. Die allgemeine Sicherheitseinweisung umfasst spezifische Abläufe in der Einrichtung und die Diskussion der sicherheitsrelevanten Aspekte beim Arbeiten mit den analytischen Instrumenten, sowie den Umgang mit Chemikalien im nass-chemischen Laboratorium. Die Sicherheitseinweisung erfolgt durch die Plattformleitung und die Geräteverantwortlichen. Die Teilnahme an der Sicherheitseinweisung wird dokumentiert und beim Chemikalienmanagement, Frau Sylvia Rakovacz hinterlegt. Für die Laboratorien der Massenspektrometrie Plattform besteht eine Gefährdungsbeurteilung nach Arbeitsschutzgesetz und der AGUM e.V. in Zusammenarbeit mit dem Sachgebiet Hochschulen und Forschungseinrichtungen der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (DGUV). Es gelten die Regeln für das Arbeiten in nasschemischen Laboren.

7. Urheberschaft & Veröffentlichungen von Forschungsergebnissen der Massenspektrometrie Plattform

Der generelle Umgang mit massenspektrometrischen Datensätzen, deren Urheberschaft, die Publikation von entsprechenden Datensätzen in Artikeln, Buchbeiträgen und Monographien und die Veröffentlichung von Forschungsergebnissen in Tagungsbeiträgen (Poster, Vorträge, etc.) regelt die übergeordnete Ordnung der Analytischen Plattformen des Departments für Chemie und Biochemie der UzK.

Rechte und Pflichten in Bezug auf unabhängige Forschungsarbeiten und Projekte des Plattformleiters sind in den Statuten der übergeordneten Ordnung der Analytischen Plattformen des Departments für Chemie und Biochemie der UzK niedergelegt.

Anhang 1. Personal

Die Mitarbeiter/innen der Massenspektrometrie Plattform sind (Stand 1-2025)

Im Institut für Organische Chemie

Prof. Dr. Mathias Schäfer

Leiter der Massenspektrometrie Plattform
Department für Chemie und Biochemie
Greinstrasse 4, 50939 Köln
T 0221 470 3086
F 0221 470 3064
email: mathias.schaefer@uni-koeln.de

Michael Neihls, CTA

Massenspektrometrie Plattform
Department für Chemie und Biochemie
Greinstrasse 4, 50939 Köln
T 0221 470 3067
F 0221 470 3064
email: neissm@uni-koeln.de

Gamze Gömec, Ms Sc

Massenspektrometrie Plattform
Department für Chemie und Biochemie
Greinstrasse 4, 50939 Köln
T 0221 470 3067
F 0221 470 3064
email: ggoemez@uni-koeln.de

Im Institut für Biochemie

Anja Hochheiser, BTA

Department für Chemie und Biochemie
Zülpicher Str. 47a, 50674 Köln
Tel.: 0221 470 6433
Email: anja.hochheiser@uni-koeln.de

Ansprechpartnerin für Frau Hochheiser im Institut für Biochemie ist Frau

Prof. Dr. Ines Neundorf

Department für Chemie und Biochemie

Institut für Biochemie

Zülpicher Str. 47a, 50674 Köln

Phone: +49 (0) 221 470 8847

Fax: + 49 (0) 221 470 5091

Email: ines.neundorf@uni-koeln.de

Anhang 2. Instrumente und Geräte (Stand 01-2025)

Folgende Geräte befinden sich aktuell in der Massenspektrometrie Plattform des Departments für Chemie und Biochemie:

Standort: Institut für Organische Chemie, Greinstraße 4, 50939 Köln

A) ESI-LTQ-Orbitrap XL (ThermoScientific) gekoppelt mit einer HPLC zur automatisierten Probengabe

B) GC-EI/CI- Orbitrap Exactive (ThermoScientific)

C) GC-EI/CI-ISQ single Quad GC-MS (ThermoScientific)

Standort: Institut für Biochemie, Zülpicher Str.47, 50674 Köln

A) ESI-LTQ XL Linear Ion Trap MS (ThermoScientific) gekoppelt mit einem HPLC 1260 Infinity System (Agilent) mit automatischer Probenaufgabe

B) LCMS8060 Triplequadrupole (Shimadzu) gekoppelt mit Nexara XR HPLC (bioinertter Autosampler zur automatisierten Probengabe, UV-Detektor, Fluoreszenzdetektor, Fraktionssammler)