

Nutzerordnung für HT-MS | High Throughput Mass Spectrometry Core Facility

1. Präambel

Die Core Facility „High Throughput Mass Spectrometry“ (kurz: HT-MS) wurde 2019 als Core Facility, und damit als zentraler Forschungsdienstleister der Charité gegründet, um dem erhöhten Bedarf an großen proteomischen und metabolischen Probenserien in der biomedizinischen Grundlagenforschung gerecht zu werden. Die HT-MS fokussiert sich vor allem auf die quantitative Proteomik. Für diese werden automatisierte Probenvorbereitungsmethoden, sowie Ultra-Hochdurchsatz-Messverfahren entwickelt und angewandt.

Die Facility ist gezielt darauf ausgerichtet große Probenserien (> 500 Proben) zu analysieren, wie sie für systembiologische Experimente, als auch für klinische und epidemiologische Studien erforderlich sind. Dies umfasst die Analyse von Körperflüssigkeiten wie Plasma, Serum, Urin und Liquor, Zellen und Gewebe. Dadurch erweitert die Facility das Angebot, welches bereits durch die BIH Core Units Metabolomics und Proteomics zur Verfügung steht.

2. Ansprechpartner

Die Geräte werden ausschließlich von qualifiziertem und ausgewähltem Personal bedient. Die Core Facility ist eng an das Institut für Biochemie, sowie die Forschungsgruppe “Biochemie und Systembiologie des Stoffwechsels” angebunden. Durch die zentrale Bündelung von technischen und personellen Ressourcen kann die Ausstattung, Bedienung und die technische Betreuung der Geräte (z.B. Wartung) gewährleistet werden.

Wissenschaftliche Leitung und Projektmanagement

Dr. Michael Mülleder 030-450-528317 michael.mueller@charite.de

Leitung Institut für Biochemie, AG “Biochemie und Systembiologie des Stoffwechsels”

Prof. Dr. Markus Ralser 030-450-528141 markus.ralser@charite.de

Technische Ansprechpartner - Probenvorbereitung

Manuela Stäber 030-450-528415 manuela.staeber@charite.de
Daniela Ludwig 030-450-528170 daniela.ludwig@charite.de

Technische Ansprechpartner - Massenspektrometrie

Dr. Kathrin Textoris-Taube 030-450-528415 kathrin.textoris-taube@charite.de

Ansprechpartner im Bereich IT und Bioinformatik

Dr. Vadim Farztdinov vadim.farztdinov@charite.de
Dr. med. Christoph Gille 030-450-528045 christoph.gille@charite.de

Die Core Facility ist über folgende Websites repräsentiert

https://biochemie.charite.de/facilities/ht_ms_high_throughput_mass_spectrometry_core_facility/
<https://iris.charite.de/Landing/Resource/9136>

Bei Schäden/Havarie und Verhinderung der Facility, kontaktieren Sie die CFM: 030-450-575444

3. Ausstattung

Bezeichnung <i>Hersteller; Anschaffungsjahr</i>	Beschreibung	Nutzungszeit der Facility pro Jahr	Zuordnung
Biomek i7 <i>Beckman Coulter 2019</i>	Pipettierroboter zur Probenvorbereitung mit 96er-Kanal Pod und robotischem Arm, Platereader, Barcodescanner, Shaker, Thermoshaker, Washstation, Fan	2000 Std.	Charité core-funded
Biomek i5 <i>Beckman Coulter 2020</i>	Pipettierroboter zur Reformatierung von Proben 8-Kanal Pod und robotischem Arm, Platten-Barcodescanner, Tuberacks mit Barcodescanner	1000 Std.	BUA Link-Lab
LE220Rsc <i>Covaris 2020</i>	Fokussierter Ultraschall-Sonikator Gerät zur Proteinextraktion	1000 Std.	BUA Link-Lab
TripleTOF 6600 / 1290 Infinity II LC <i>SCIEX / Agilent 2020 / 2020</i>	Hybrid Quadrupole-Time Of Flight Elektrospray-Massenspektrometer / Normal-Fluss Chromatographie-System	750 Std.	SCIEX; collaboration
TripleTOF 6600 / 1290 Infinity II LC <i>SCIEX / Agilent 2016 / 2020</i>	Hybrid Quadrupole-Time Of Flight Elektrospray-Massenspektrometer / Normal-Fluss Chromatographie-System	750 Std.	BBSRC (AG Ralser)
timsTOF Pro / Ultimate 3000 RSLCnano <i>Bruker / Thermo Scientific 2020 / 2020</i>	Hybrid Trapped-Ionmobility-Quadrupole-Time Of Flight Elektrospray-Massenspektrometer mit Ionen-trap Mobility / Kapillar - Fluss Chromatographie-System	250 Std.	MSTARS (AG Ralser)
timsTOF Pro / Ultimate 3000 RSLCnano <i>Bruker / Thermo Scientific 2020 / 2003</i>	Hybrid Trapped-Ionmobility-Quadrupole-Time Of Flight Elektrospray-Massenspektrometer mit Ionen-trap Mobility / Kapillar - Fluss Chromatographie-System	250 Std.	MSTARS (AG Ralser) / BIH
Q Exactive Plus / Ultimate 3000 RSLCnano <i>Thermo Scientific 2016 / 2016</i>	Hybrid Quadrupole-Orbitrap Elektrospray-Massenspektrometer / Nanoliter-Fluss Chromatographie-System	2000 Std.	DFG GG 91b (2016)
Agilent 6470 / 1290 Infinity <i>Agilent 2016 / 2016</i>	Triplequadrupole Elektrospray-Massenspektrometer / Normal-Fluss Chromatographie-System	250 Std.	ERC (AG Ralser)

Der Standort für alle Geräte befindet sich am Charité Campus Mitte, Charitéplatz 1, 10117 Berlin; intern: Charité-CrossOver Virchowweg 6.

4. Nutzungsmodelle

Der Service der Facility kann, in Absprache mit den Nutzern, alle wichtigen Bereiche von experimentellem Design, über Probenaufarbeitung, Messung, Rohdatenanalyse, statistische und funktionelle Auswertung abdecken, oder die Nutzer dahingehend beraten. Es ist uns wichtig, dass die massenspektrometrische Analyse als Teil eines Workflows verstanden wird, für den die Qualität der vorhergehenden und anschließenden Arbeiten essentiell sind.

Die Nutzung der Core Facility wird je nach nachgefragter Leistung und Voraussetzungen seitens der Nutzer wie folgt möglich sein:

- **Servicemodell /-betrieb**
Das Servicemodell erlaubt es, den Workflow der massenspektrometrischen Analytik als Gesamtpaket zu nutzen, inklusive experimentellem Design, Probenaufbereitung, Messungen und elementarer Datenauswertung. Es können auch Teile der Serviceleistungen gebucht werden, z.B. nur die Messungen am Gerät, wobei Probenvorbereitung und Datenauswertung durch die Nutzer erfolgen - ggf. mit Unterstützung durch die Core Facility und unter Einhaltung von Richtlinien, die den Nutzern mitgeteilt werden. Eine erweiterte Datenanalyse (siehe § 7. 8 & § 8) kann als Service nur bei ausreichender Kapazität und nach schriftlich vereinbartem Datenanalyseplan mit definiertem Zeitrahmen und Leistungen ermöglicht werden. Die wissenschaftliche Interpretation der Ergebnisse stellt keine Serviceleistung dar.
- **Kooperationsmodell / Anwendungsbetrieb**
Es ist vorgesehen, dass nur qualifizierte Nutzer eine direkte Buchung der Großgeräte vornehmen können.

5. Nutzer / Zugang

Die Serviceeinrichtung ist grundsätzlich sowohl für interne als auch für externe Nutzer zugänglich. Die technisch-operative Betreuung der Geräte erfolgt durch das Personal der Core Facility und der Core Facility zugewiesenem qualifizierten Personal.

Qualifizierte Nutzer können Geräte auch selbst nutzen, sollte dies für die erfolgreiche Durchführung eines Projekts von Vorteil sein. Die Einschätzung der fachlichen Qualifikation obliegt der Core Facility. Diese kann bei Geräten zur Probenvorbereitung durch Einweisung oder Schulung erworben werden.

5.1. Prioritäten in der Nutzung

Die Core Facility HT-MS kann von folgenden Gruppen in abgestufter Priorität und mit unterschiedlichen Gebühren genutzt werden:

- | | |
|--------------------------|--|
| (1) höchste Priorität | Projekte der Forscher / Forscherinnen der Charité und assoziierter Einrichtungen |
| (2) mittlere Priorität | Projekte anderer akademischer (non-profit) Einrichtungen |
| (3) niedrigste Priorität | nicht-akademische Projekte |

6. Verfügbarkeit von Geräten

Die Facility strebt eine maximale Auslastung der Geräte an. Eine eigenständige Nutzung an Wochenenden und Feiertagen durch externe qualifizierte Nutzer ist ausgeschlossen.

7. Projektdurchführung

Neue Projekte oder Anfragen für Einzelmessungen werden über das OpenIRIS-Portal (<https://iris.charite.de/Landing/Resource/9136>) an die wissenschaftliche Leitung gerichtet. Über eine Maske werden erste Informationen zum Projekt abgefragt. Diese dienen dem Erstgespräch, um die Machbarkeit und den Umfang des Projektes, die Anforderungen an notwendige Geräte, Service, Sicherheitsaspekte und eventuell notwendige Schulungen zu besprechen. Anschließend werden neue Projekte in der Regel auf Basis einer kurzen Projektskizze über OpenIRIS eingereicht und vom Core Facility Management geprüft und genehmigt. Die Core Facility entscheidet, welche Methode für die gewünschte Untersuchung geeignet ist.

Darüber hinaus kann eine Zusammenarbeit (mit Co-Autorenschaft im Falle einer Publikation) mit den Mitarbeitern der Core Facility nach Absprache für spezielle Anforderungen sinnvoll sein, zum Beispiel wenn es um die gemeinsame Entwicklung neuer Protokolle geht.

7.1. Projektevaluierung und Priorisierung von Projekten

Die Projekte werden nach ihrer Realisierbarkeit sowie der wissenschaftlichen Zielsetzung und Relevanz durch die Leitung der Facility und ggf. nach Rücksprache mit dem Nutzerrat/Beirat bewertet und priorisiert. Die Facility kann nur Projekte annehmen, die ihrem Methodenspektrum entsprechen.

In der Regel werden die Proben in der Reihenfolge ihres vollständigen Eingangsdatums analysiert. Dazu gehört die Bestätigung des erstellten Angebots mit geplanten Leistungen, die Übergabe der Proben, die anhand einer kompletten und korrekten Probenliste überprüft werden, sowie eine vollständige Auflistung relevanter Metadaten.

Bei Überbelegung werden die Proben anhand der unter Punkt § 5.1 und oben genannten Reihenfolge der Prioritäten bearbeitet. Im Fall von Überbelegung liegt die Entscheidung der Priorisierung beim Nutzerrat.

Sollten Daten aus besonders wichtigen Gründen benötigt werden, z. B. für die Wiedervorlage eines Manuskripts, werden diese Proben auf begründeten Wunsch des Nutzers vorrangig ausgewertet.

7.2. Angebotserstellung

Nach der Freigabe des Projektes, erstellt die Leitung der Facility auf Grundlage der Projektzusammenfassung und der ersten Gespräche ein Angebot. Das jeweilige Angebot, sowie die Nutzerordnung, muss vor Projektbeginn unterschrieben an die Facility übergeben werden. Im Angebot ist der Umfang der Dienstleistung, bis wann die Dienstleistung erbracht wird und die entsprechenden Preise enthalten. Interne Projekte müssen auf dem Angebot die zu belastende Kostenstelle angeben und vom Projektleiter und Kostenstellenverantwortlichen unterschrieben werden. Externe Angebote müssen unter Angabe einer Rechnungsadresse eingereicht werden.

Bei den berechneten Kosten handelt es sich um einen Kostenvoranschlag. Die Kosten können sich entsprechend des tatsächlichen Aufwands ändern. Ist es absehbar, dass die Kosten mehr als 20% vom Angebot abweichen, wird der Projektleiter informiert, um über eine Fortführung, Anpassung oder gegebenenfalls Abbruch zu besprechen.

7.3. Nutzungszeiten / Buchung

Qualifizierte Nutzer werden für Buchungsanfragen auf OpenIRIS freigeschaltet. Die Buchung wird in Rücksprache mit dem Geräteverantwortlichen und in Rücksicht auf andere Projekte genehmigt.

7.4. Training

Einweisung und Schulung richten sich nach der Qualifikation der Person. Der personelle und materielle Aufwand wird anhand des Kostenkatalogs in § 8 auf die Nutzer umgelegt.

7.5. Stornierung

Bei Stornierung eines geplanten Projekts, behält sich die Core Facility vor, alle bereits anfallenden Materialkosten sowie durchgeführten Arbeiten, wie Projektmanagement, zu verrechnen.

Wird die Buchung eines Geräts nicht spätestens 24h vor Nutzung abgesagt, wird der volle Preis berechnet.

7.6. Probenmanagement

Übergabe

Vor Beginn der Analysen müssen die Nutzer eine vollständige Probenbeschreibung inklusive relevanter Metadaten und Hinweise zum sicheren Umgang und zur Lagerung abgeben.

Es liegt in der Verantwortung des Projektleiters den Probentransport so zu organisieren, dass Probenintegrität sowie notwendige Sicherheitsvorkehrungen garantiert sind, z. B. Personenschutz, Verhinderung der Freisetzung. Die Facility kann die Planung unterstützen.

Die Abgabe von Proben ist nur nach vorheriger Anmeldung und Bestätigung des Termins möglich (Tel.: 030-450-528317, Kontakt über OpenIris).

Der Versand von Proben kann an die Adresse der Core Facility erfolgen. Wir erwarten die Mitteilung einer Trackingnummer, um den Versand zu verfolgen.

*Core Facility - High Throughput Mass Spectrometry
Charité - Universitätsmedizin Berlin
Charitéplatz 1, 10117 Berlin
(intern: Virchowweg 6, Geb. 2360, R. 04.312)
Tel.: 030 450 528317 / 030 450 528415*

Lagerung

Die Lagerung der Proben erfolgt unter den vereinbarten Bedingungen, die die Intaktheit der Proben best-möglich gewährt. Ein Probenmanagementsystem erlaubt die klare Zuordnung und das Tracking der Probe und ihrer Derivate. Eine Lagerung ist in der Regel nur für die Dauer der Durchführung der Serviceleistung möglich.

Vernichtung und Rückgabe

In der Regel werden die Proben und ihre Derivate bei Abschluss des Projekts und nach schriftlicher Bestätigung vernichtet oder zurückgesendet. Eine vorzeitige Vernichtung oder Rückgabe kann jederzeit vom Nutzer verlangt werden. Die Facility behält sich vor, den Arbeitsaufwand und die Versandkosten in Rechnung zu stellen.

7.7. Datenmanagement

Datenspeicherung

Rohdaten werden 20 min nach Abschluss der kompletten Aufzeichnung auf einen Server transferiert (Schreibe und Leserechte). Um die Intaktheit der Datei zu gewährleisten, wird zuvor eine CheckSum berechnet und diese bestätigt. Wenn notwendig für die weitere Verwendung, wird automatisch eine Konvertierung der Dateien in ein anderes Format durchgeführt. Bevor die Datei zur permanenten Speicherung auf einen Storage Server kopiert wird, wird die richtige Benennung und Vollständigkeit der Studie überprüft. Zum Schluss werden die Rohdaten, nach nochmaliger Überprüfung der Intaktheit der Dateien auf dem Storage Server, von den Aufzeichnungsrechnern gelöscht. Klinische Daten, sowie

Kommunikation mit den Kunden werden auf den Servern der Charité in einer standardisierten Verzeichnisstruktur abgelegt. Jede Studie erhält hierfür eine Identifikationsnummer. Die Daten können nur von Mitgliedern der Core Facility und zugeordnetem Personal gelesen werden. Für den Datenaustausch mit den Kunden, können Charité-intern, Lese- bzw. Schreibrechte auf spezielle Incoming- und Outgoing-Ordner gesetzt werden.

Datentransfer

Für den Transfer der Messdaten wird den Nutzern ein eigens vom Geschäftsbereich IT für die Core Facility eingerichteter Transferserver mit individuellen Serversegmenten bereitgestellt. Diese Segmente befinden sich auf einem von der Charité betreuten und gesicherten Server und nur vorab zugelassene Nutzer sind zugriffsberechtigt. Die auf diesen individuellen Segmenten hinterlegten Daten können von dort auf eigene Speichermedien/Serverplätze transferiert werden. Dies verhindert die Nutzung von ungeeigneten Medien (i.e. transportable, nicht-verschlüsselte Festplatten) für den Datentransfer. Die Rohdaten, ohne klinische oder anderweitige Metadaten, werden automatisch auf einen sicheren Server des Berlin Institute of Health übertragen. Für die permanente Speicherung der Daten ist jeder Nutzer selbst verantwortlich, dies ist auch in der Nutzungsordnung festgelegt. Die Core Facility kann die Nutzer aber hinsichtlich des nötigen Speicherplatzes beraten und diesbezüglich auch den Geschäftsbereich IT der Charité mit einbeziehen. Dieser ist für die Bereitstellung von ausreichend abgesichertem Speicherplatz verantwortlich.

Datenlöschung

Die Probandokumentation wird für mindestens 5 Jahre in der Core Facility Massenspektrometrie aufbewahrt. Alle Daten stehen den Nutzern zur Verfügung. Sie können jederzeit übertragen und auf Wunsch gelöscht werden. Zu beachten ist, dass es sich um große Datenmengen handelt und daher entsprechende Speichermedien nötig sind. Die Rohdaten werden permanent gespeichert. Diese beinhalten keine relevanten Projektdaten, um eine missbräuchliche Nutzung durch Dritte auszuschließen.

Datenauswertung

Wir sehen die Datenauswertung als einen essentiellen Teil der massenspektrometrischen Analyse. In der Regel identifiziert die Core Facility geeignete Programme, Tools und bioinformatischen Methoden, die standardisiert eingesetzt werden, um die Qualität der Analyse zu garantieren und eine Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Experimenten und Studien zu erleichtern. Der Service der Facility bietet die Rohdatenprozessierung (Computational Mass Spectrometry) sowie eine elementare bioinformatische Analyse der Daten. Diese beinhaltet in der Regel eine Qualitätskontrolle und Outlier-Analyse, Normalisierung, Imputation, eine Analyse zur Verfügung gestellter Metadaten sowie eine explorative Auswertung.

Eine erweiterte Datenanalyse kann als Service nur bei ausreichender Kapazität und nach schriftlich vereinbartem Datenanalyseplan mit definiertem Zeitrahmen und Leistungen ermöglicht werden. Diese beinhaltet, nicht ausschließlich, statistische Modellierung, Integration verschiedener Datensätze, erweiterte explorative und funktionelle Analyse sowie Entwicklung von Modellen z.B. zur Klassifizierung oder Vorhersage.

7.8. Sonstiges

Es können nur Proben der gentechnischen Sicherheitsstufe 1 und biologischen Sicherheitsstufen 1 und 2 durch die Facility akzeptiert werden, sofern diese nicht durch validierte Verfahren inaktiviert wurden. Es ist ferner erwünscht, dass auch Proben der Sicherheitsstufen 2, sofern es mit den Methoden der Core Facility vereinbar ist, inaktiviert werden.

Es liegt in der Verantwortung des Projektleiters alle notwendigen Auflagen in den Bereichen Tierschutz, Ethikkommission, Datenschutz, biologische und gentechnische Sicherheit etc. zu beachten und verlangte Maßnahmen zu gewährleisten. Die Core Facility High Throughput Mass Spectrometry behält sich vor, Projekte abzulehnen oder abubrechen, falls diese Anforderungen nicht erfüllt werden. Bereits verursachte Kosten werden den Nutzern in Rechnung gestellt.

8. Leistungskatalog / Nutzungsgebühren

Die Inanspruchnahme der Dienstleistungen der Core Facility High Throughput Mass Spectrometry ist für alle Nutzer kostenpflichtig. Zur internen Abrechnung über ILV muss eine zu belastende Kostenstelle, und bei externem Nutzer eine Rechnungsanschrift, auf dem Angebot angegeben werden.

Die Preise werden, basierend auf Materialkosten und geleisteten Arbeitsstunden, individuell berechnet. Dies ist beispielhaft mit den Preisen der internen Leistungsverrechnung / Kategorie I, anhand der angebotenen Leistungen für ein Experiment für 80, 160, 480 und 960 Proben berechnet. Hierbei werden die Materialkosten für Probenmanagement, Probenvorbereitung, Messung, und Logistik direkt an die Kunden weitergegeben. Die Preise werden regelmäßig, anhand der Einkaufskosten, aktualisiert. Die durchgeführten Arbeiten werden in Administration, Probenvorbereitung, instrumentelle Analytik, Computational Mass Spectrometry und Datenanalyse gegliedert und die Personalkosten des zugeordneten Personals als Stundensätze verrechnet. Durch die speziell auf große Probenanzahl ausgelegten Arbeitsabläufe, können die Kosten für kleinere Studien nicht substantiell reduziert werden.

Die Rechnungsstellung erfolgt nach Abschluss des Projektes. Bei größeren bzw. langfristigen Projekten jeweils am Ende des Quartals. Die Nutzungsgebühren sind innerhalb von 14 Tagen nach Rechnungserhalt zu zahlen.

Unterstützung bei Antragsstellung

Projektleiter können die Nutzungsgebühren in Förderanträgen beantragen (in DFG-Anträgen unter dem Punkt „Requested other costs“). Die wissenschaftliche Leitung der Core Facility ist Ihnen bei der entsprechenden Kostenschätzung in der Antragsphase gerne behilflich.

Generell ist die Pauschale, wie sie von der DFG für die Massenspektrometrie vorgeschlagen wird, für groß angelegte Hochdurchsatzstudien nicht geeignet und ihre Anwendung auch nicht zwingend erforderlich. Die Kosten für unsere Dienstleistungen können voll vergütet werden, müssen aber detailliert aufgelistet werden, um Transparenz zu ermöglichen. Gerne stellen wir Ihnen eine Kostenkalkulation zur Verfügung, die Sie als Anhang/Ergänzung Ihrem Antrag beifügen können.

In der Regel sollte das Projekt vor Antragsstellung mit der Facility besprochen werden.

SERVICE	DESCRIPTION	INSTRUMENT	COST PER SAMPLE PER SAMPLE SET OF*			
			80	160	480	960
PLASMA AND SERUM PROTEOMICS	200 – 300 proteins in 5 min	SCIEX 6600 TripleTOF	40 €	25 €	20 €	15 €
MICROBIAL PROTEOMICS (IN-SOLUTION DIGEST)	High abundance proteome in 5 min	SCIEX 6600 TripleTOF	45 €	30 €	25 €	20 €
CELLLINE BASED COMPOUND SCREENING	~ 4000 proteins in 5 min	SCIEX 6600 TripleTOF	45 €	30 €	25 €	20 €
TISSUE PROTEOMICS FRESH FROZEN & FFPE	~ 2.500 proteins in 5 min	SCIEX 6600 TripleTOF	40 €	30 €	25 €	25 €
	~ 4000 proteins in 2 hrs	Thermo Scientific Q-Exactive Plus	50 €	40 €	35 €	30 €
	~ 6000 proteins in 2 hrs	Bruker timsTOF Pro	50 €	40 €	35 €	30 €
SCREENING FOR CHANGES IN FREE AMINO ACIDS	19 proteinogenic, 6 additional amino acids; no cysteine	Agilent 6470	35 €	20 €	15 €	10 €
SCREENING FOR CHANGES IN CENTRAL METABOLISM	65 metabolites of glycolysis, TCA, PPP, cofactors, nucleotides, amino acids in 11 min	Agilent 6470	35 €	25 €	20 €	15 €

Die Kosten beinhalten keine Datenanalyse oder Projektadministration etc. und beziehen sich auf Probenvorbereitung und massenspektrometrische Messung, sowie Rohdatenprozessierung.

Beschreibung Code	Tarif Kat. I ILV	Tarif Kat. II akademische Projekte	Leistungen
Data Analysis DA	51 €	74 €	Data Analysis (DA) beinhaltet, nicht ausschließlich, eine Qualitätskontrolle und Outlier-Analyse, Normalisierung, Imputation, eine Analyse der Metadaten sowie eine explorative Auswertung. Eine erweiterte Datenanalyse kann als Service nur bei ausreichender Kapazität und nach schriftlich vereinbartem Datenanalyseplan mit definiertem Zeitrahmen und Leistungen ermöglicht werden. Diese beinhaltet, nicht ausschließlich, statistische Modellierung, Integration verschiedener Datensätze, erweiterte explorative und funktionelle Analyse sowie Entwicklung von Modellen z.B. zur Klassifizierung oder Vorhersage.
Computational Mass Spectrometry COMP	53 €	77 €	Computational Mass Spectrometry (COMPT) beinhaltet, nicht ausschließlich, folgende Tätigkeiten: Signalintegration, Metabolit/Peptid/Protein-Identifikation, Datenbanksuche, Quantifizierung und Datenexport.
Sample Preparation SP	39 €	56 €	Sample Preparation (SP) beinhaltet, nicht ausschließlich, folgende Tätigkeiten: Probenannahme und Dokumentation, Balancieren experimenteller Gruppen und Reformattierung, Probenextraktion, Probenbearbeitung, Clean-Up und Konditionierung.
Analytical Instrumentation INSTR	54 €	79 €	Analytical Instrumentation (INSTR) beinhaltet, nicht ausschließlich, folgende Tätigkeiten: Betrieb der analytischen Geräte, Generierung von Qualitätskontrollen, internen und externen Standards, Systemeignungstest sowie Kalibrierung, Datenaufnahme, initiale Qualitätskontrolle und Datensicherung.
Project Administration PA	51 €	74 €	Project Administration (PA) beinhaltet, nicht ausschließlich, folgende Tätigkeiten: Besprechungen, Proben und Informationsmanagement, Datenmanagement und Reporterstellung.
Special Item – Material MAT	1.00 €	1.45 €	Special Item - Materials (MATS) beinhaltet die Verbrauchsmittel, die für die unterschiedlichen Leistungen benötigt werden. Diese werden im Angebot und der Rechnung grob aufgeschlüsselt.
Special Item – Labour LAB	1.00 €	1.45 €	Special Item - Labour (LAB) beinhaltet die zur Erfüllung des Auftrags notwendigen Tätigkeiten, die nur mit höherqualifiziertem Personal durchgeführt werden können, z.B. Methodenentwicklung, spezialisierte Analyse etc.

Die Stundensätze für die Tätigkeiten werden über das zugewiesene Personal berechnet.

9. Rechte & Pflichten

Alle Nutzer

Nutzer dürfen sich in den Räumen der Core Facility High Throughput Mass Spectrometry nur nach vorheriger Sicherheitsbelehrung aufhalten. Die Sicherheitsbelehrung wird durch den Leiter der Core Facility durchgeführt und schriftlich bestätigt.

Für die ordnungsgemäße Durchführung der Untersuchungen in Übereinstimmung mit den entsprechenden Richtlinien/Bestimmungen (z.B. Gentechnik, Tierschutz, Infektionsschutz, Strahlenschutz etc.) ist jeder Nutzer eigenverantwortlich.

Qualifizierte Nutzer

Qualifizierte Nutzer besitzen eine notwendige Expertise auf dem Gebiet der Massenspektrometrie. Sie sind zur eigenständigen Bedienung der Geräte nach ausführlicher Einweisung und Einarbeitung berechtigt. Diese Nutzer verpflichten sich, die ihnen bekannt gegebenen Vorschriften zur Messroutine, Datenspeicherung und Datenmanagement einzuhalten. Weiterhin verpflichten sie sich, regelmäßige Wartungsaufgaben zu übernehmen. Nach erfolgreicher Einarbeitung erhalten qualifizierte Nutzer durch die operative Leitung eine persönliche Zugangsberechtigung (Freischaltung des Transponders). Der Transponder darf nicht an Dritte weitergegeben werden. Die Nutzer haben Sorge zu tragen, dass keine Unbefugten Zugang zu den Räumen/Geräten haben.

10. Laborregeln

Laufender Betrieb

Die Nutzer sind verpflichtet die Grundsätze der Guten Laborpraxis (GLP) zu befolgen. Die Geräte und das zugehörige Equipment sind in einwandfreiem Zustand zu halten.

Technische Störungen u./o. mangelhafte Gerätschaften sind sofort bei den in § 2 dieser Ordnung aufgeführten Personen zu melden. Ein selbständiger Einbau bzw. Wechsel von Ersatzteilen darf nur nach vorheriger Einweisung und Rücksprache durchgeführt werden.

Vor Beginn jeder Messung müssen sich die Nutzer über OpenIRIS u./o. dem Laborbuch, das an den Geräten ausliegt, über aktuelle Betriebsänderungen/Störungen informiert haben. Die Buchung des Geräts muss bestätigt sein. Nach Beendigung der Untersuchung müssen die Räume/Geräte in ordentlichem und hygienisch einwandfreiem Zustand hinterlassen werden.

Bedarfmittel

Standardverbrauchsmittel wie z.B. Handschuhe, Lösungsmittel, Spitzen, HPLC-Vials etc. werden durch die Facility ohne zusätzliches Nutzungsentgelt bereitgestellt. Für sonstige Arbeitsmittel hat jeder Nutzer selbst zu sorgen.

11. Verwertungsrechte und Autorenschaften

Alle Verwertungsrechte stehen der jeweiligen Arbeitsgruppe zu, die die Erfindung getätigt hat, falls nicht anderweitig vereinbart. Einschränkungen entstehen für Beschäftigte der Charité durch die Regelungen der Technologie Transfer Stelle der Charité und die entsprechenden gesetzlichen Regelungen (z.Bsp. im ArbNErfG, UrhG etc.). Davon ausgenommen sind technische Entwicklungen, die die analytische Plattform betreffen.

Bei der Veröffentlichung von Daten muss die Beteiligung der Facility High Throughput Mass Spectrometry eindeutig kenntlich gemacht werden. Die Nutzer verpflichten sich, die Facility im Acknowledgement anzugeben. Beispiel: "We thank the Core Facility High Throughput Mass Spectrometry of the Charité for support in acquisition (i.a. and analysis) of the data." Bei wissenschaftlicher Beteiligung, z. B. Entwicklung neuer Methoden, Versuchsplanung, erweiterte

Datenanalyse, wissenschaftlicher Interpretation der Ergebnisse, sind die beteiligten Mitarbeiter im Sinne einer guten wissenschaftlichen Praxis als Co-Autoren zu berücksichtigen und bei der Erstellung des Manuskriptes zu beteiligen. Vor Einreichung eines Manuskripts/Patents sollte dieses, z.B. zur Überprüfung des technischen Details, der Core Facility zur Kommentierung vorgelegt werden.

Die Finanzierungsquellen der Studien sind gemäß guter wissenschaftlicher Praxis erkenntlich zu machen, in Regel in den Acknowledgements.

12. Haftung der Nutzer

Es gibt keine Versicherung für die Ausrüstung in Facility. Daher ist jeder Nutzer der selbstständig an den Geräten arbeiten darf, während der gebuchten Mess-/Auswertzeit, verantwortlich für die Ausrüstung und kann für Schäden haftbar gemacht werden. Wenn Geräte aufgrund von Fehlverhalten beschädigt werden, ist der Nutzer und ggf. der Projektleiter für den Schaden und ggf. Folgeschäden, die aus einem Geräteausfall resultieren, haftbar.

Jede Forschergruppe ist während ihrer Messzeit für i) die Einhaltung der gesetzlichen Bestimmungen, ii) Aufstellung und die Einhaltung von SOPs und iii) eine fachgerechte Übergabe der Labore und Geräte verantwortlich.

Alle Nutzer haften für Schäden und Folgeschäden, die aufgrund von grober Fahrlässigkeit oder unter Vorsatz verursacht wurden. Externe Nutzer müssen vor der ersten Benutzung der Geräte/Räumlichkeiten nachweisen (Schreiben der Versicherung oder Kopie der Police), dass ihre Versicherung die Summe der in Frage kommenden Gerätschaften im Schadensfall absichert.

Im Schadensfall benachrichtigt Sie umgehend die Leitung der Core Facility. Falls dies nicht möglich ist, kontaktieren Sie das Charité Facility Management (CFM, Hotline: 030 450 575 444).

13. Haftung der Core Facility

Schadensersatzansprüche gegen die Core Facility High Throughput Mass Spectrometry werden auf Vorsatz und grobe Fahrlässigkeit beschränkt. Die Haftung für Folgeschäden wird ausgeschlossen. Die Haftungsbeschränkung gilt nicht für Personenschäden.

Die Core Facility High Throughput Mass Spectrometry haftet nicht für Schäden und Folgeschäden, die daraus entstehen, dass die Einrichtung nicht oder nicht im vorgesehenen Umfang aufrechterhalten werden kann bzw. ihr Betrieb aufgrund behördlicher Auflagen eingeschränkt oder eingestellt werden muss. Die Core Facility High Throughput Mass Spectrometry haftet ebenfalls nicht für Geräteausfälle und für Schäden, die daraus entstehen, dass die technischen Geräte nicht oder nicht im vorhergesehenen Umfang zur Verfügung stehen oder nicht sachgemäß genutzt wurden. Des Weiteren haftet die Core Facility nicht für Schäden, die ein Nutzer durch Nicht-befolgen der Sicherheitsanweisungen verursacht.

Die Core Facility kann keine Haftung für eingelagerte Proben und gespeicherte Daten übernehmen.

14. Salvatorische Klausel und Gültigkeit der Nutzerordnung

Sollten einzelne Bestimmungen der Nutzerordnung unwirksam sein, so wird die Gültigkeit der übrigen Bestimmungen dadurch nicht berührt. Anstelle der unwirksamen Bestimmung soll eine Regelung gelten, die dem am nächsten kommt, was die Core Facility High Throughput Mass Spectrometry gewollt hat oder gewollt hätte, wenn ihr die Unwirksamkeit der Bestimmung bekannt gewesen wäre. Dasselbe gilt für etwaige Vertragslücken.

Die Nutzerordnung ist für alle Nutzer der Core Facility High Throughput Mass Spectrometry verbindlich. Darüber hinausgehende Vereinbarungen werden insbesondere mit externen Nutzern getroffen und bedürfen der Schriftform. Die Nutzerordnung ist in der jeweiligen Fassung unbegrenzt gültig, bis sie durch eine neue Fassung ersetzt oder durch Auflösung der Core Facility gegenstandslos wird.

15. Unterschriften

Wir haben die vorliegende Nutzerordnung zur Kenntnis genommen und akzeptieren die hier aufgeführten Bedingungen

Dr. Michael Müller

Leitung Core Facility
High Throughput Mass Spectrometry
Tel: 0049-30-450-528317
E-Mail: michael.mueller@charite.de