



# AMTLICHE MITTEILUNGEN

Nr. 1097 Datum: 23.05.2016

## **Interims-Benutzungs- und Entgeltordnung des Moduls Mass Spectrometry der Core Facility der Universität Hohenheim**

## **Interims-Benutzungs- und Entgeltordnung des Moduls Mass Spectrometry der Core Facility der Universität Hohenheim**

Der Senat der Universität Hohenheim hat in seiner Sitzung am 4. Mai 2016 auf Grund von § 19 Abs. 1 Satz 2 Nr. 10 des Gesetzes über die Hochschulen des Landes Baden-Württemberg (Landeshochschulgesetz – LHG ) vom 1. Januar 2005 (GBl. S. 1), zuletzt geändert durch Artikel 1 des Gesetzes vom 8. April 2014 (GBl. 2014 S. 99), die nachfolgende Interims-Benutzungs- und Entgeltordnung für das Modul Mass Spectrometry der Core Facility der Universität Hohenheim beschlossen.

### **§ 1 Organisationsform der Serviceeinheit**

Das Modul Mass Spectrometry ist eine Einheit der zentralen wissenschaftlichen Einrichtung Core Facility Hohenheim.

Sie bietet massenspektrometrische Analysen und weitere ergänzende Dienstleistungen für Mitarbeiterinnen bzw. Mitarbeiter und Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim sowie für externe Kooperationspartnerinnen und Kooperationspartner der Universität. Die Leistungen des Moduls Mass Spectrometry sind entgeltpflichtig.

### **§ 2 Leistungen der Serviceeinheit**

#### **(1) Geräte**

Folgende Geräte stehen für die massenspektrometrischen Analysen zur Verfügung:

1. Autoflex III MALDI-TOF-TOF Massenspektrometer (Bruker Daltonics)

Das Autoflex III ist ein orthogonales MALDI-TOF-TOF-System, das eine Identifizierung von Biomolekülen über die exakte Bestimmung der Molekülmasse ermöglicht. Außerdem kann durch eine gezielte Fragmentierung von Biomolekülen (MS/MS-Spektren), die über die Massenbestimmung erhaltene Identifizierung verifiziert werden. Anwendungsbereiche sind vor allem die (a) Identifizierung von Proteinen aus 1D-, 2D- oder 2D DIGE-Gelen, (b) Massenbestimmung von Peptiden, Proteinen, Lipopeptiden, Glykopeptiden, Oligonucleotiden, etc. zur Qualitätskontrolle bzw. Identifizierung (c) Top-Down-Sequenzierung von intakten Proteinen zur Bestimmung des N-Terminus über MALDI-ISD (In Source Decay).

2. LTQ Orbitrap XL ESI-Massenspektrometer (Thermo Fischer Scientific)

Das LTQ Orbitrap XL Massenspektrometer wird ausschließlich für die Proteinanalytik eingesetzt und gekoppelt mit einer nano-HPLC-Anlage (nano Acquity UPLC, Waters) betrieben. Anwendungsbereiche sind (a) die Identifizierung von Proteinen aus komplexen Gemischen, (b) die Identifizierung von posttranslationalen Proteinmodifikationen und (c) relative Quantifizierung von Proteinen (mit und ohne Isotopenmarkierung).

### 3. 5500 QTRAP-Massenspektrometer (AB SCIEX)

Das 5500 QTRAP-Massenspektrometer wird für die quantitative Analyse von Metaboliten und Proteinen eingesetzt. Hierbei können Metabolite mit bekannter Masse bzw. Proteine mit bekannter Sequenz in komplexen Gemischen über SRM (Selected Reaction Monitoring)- oder MRM (Multiple Reaction Monitoring)-Experimente selektiv nachgewiesen und quantifiziert werden. Zu diesem Zweck wird das Gerät entweder zusammen mit einer nano-HPLC-Anlage (Ultimate 3000, Dionex) oder einer UHPLC-Anlage (1290 UHPLC, Agilent) für die Analyse von Proteinen bzw. Metaboliten betrieben. Anwendungsbereiche sind (a) relative Quantifizierung von Metaboliten und Proteinen über SRM/MRM-Experimente, (b) absolute Quantifizierung von Metaboliten und Proteinen über SRM/MRM-Experimente (mit Isotopenmarkierung) und (c) Vorläufer-Ionen- oder Neutralverlust-Screening-Experimente für die Identifizierung von bestimmten Substanzklassen oder Modifikationen in komplexen Proben.

### 4. QExactive Plus Orbitrap Massenspektrometer (Thermo Fisher Scientific)

Über die Arbeitsgruppe von Frau Prof. Waltraud Schulze (Fachgebiet „Systembiologie der Pflanze“, 260b) besteht Zugang zu einem QExactive Plus ESI-MS, an dem ein Teil der zur Verfügung stehenden Messzeit (45% der Betriebszeit des Gerätes) von der Serviceeinheit für Serviceanalysen genutzt werden kann. Das Gerät wird gekoppelt mit einer nano-HPLC-Anlage (EasyLC1000, Thermo Fisher Scientific) betrieben und wird ausschließlich für die Proteinanalytik eingesetzt. Anwendungsbereiche sind (a) die Quantifizierung von Proteinen in hochkomplexen Proteinextrakten und (b) die gezielte Quantifizierung von posttranslationalen Proteinmodifikationen über SIM oder PRM.

## (2) Analysearten

In der Serviceeinheit können folgende Analysearten durchgeführt werden:

### 1. PMF (Peptid-Massen-Fingerprint)-Analyse (MALDI-TOF)

Die Nutzer können hierfür ein 1D- oder 2D-Proteingel zusammen mit einem Datenblatt (s. Vordruck) in der Serviceeinheit abgeben. Die PMF-Analyse beinhaltet einen in Gel Verdau einer Gelbande (bzw. Spot) mit Trypsin (andere Proteasen nach Absprache möglich), die Probenvorbereitung (Entsalzung über C<sub>18</sub>-Tip und Auftragen der Probe), die Messung und eine Datenbanksuche. Darüber hinaus wird eine Verifizierung des PMF-Ergebnisses über die Fragmentierung eines Peptides (MS/MS-Analyse) angeboten.

### 2. Molekulargewichtsbestimmung Proteine, Peptide und Metabolite (MALDI-TOF)

Die Analyse beinhaltet die präzise Molekulargewichtsbestimmung von Biomolekülen mittels MALDI-TOF Massenspektrometrie. Das Auftragen der Probe auf den MALDI-TOF-Probenhalter wird von der Serviceeinheit durchgeführt. Die Kosten für die MALDI-TOF Matrix sind im Preis für die Analyse enthalten, wenn die Messung von der Serviceeinheit durchgeführt wird.

### 3. NanoLC- bzw. UHPLC-MS Analyse (Proteine und Metaboliten)

Die Analyse beinhaltet die Trennung von Biomolekülen über C<sub>18</sub>-RP-Chromatographie und die Bestimmung der Molekülmassen. Eine weitergehende Datenauswertung und Interpretation der Daten wird nicht vorgenommen und muss von den Nutzern selber durchgeführt werden.

4. NanoLC- bzw. UHPLC-MS/MS-Analyse (HPLC-Analysezeit < 2 h, Proteine und Metaboliten)

Die Analyse beinhaltet die Trennung von Biomolekülen über C<sub>18</sub>-RP-Chromatographie und die Bestimmung der Molekülmassen sowie die Akquirierung von Fragmentierungsspektren zur Sequenz- bzw. Strukturaufklärung der Biomoleküle. Die anschließende Auswertung inklusive einer Datenbanksuche bzw. Interpretation der Fragmentierungsspektren wird von der Serviceeinheit vorgenommen. Für Protein-Analysen ist der enzymatische Verdau der Proteinproben mit einer Protease und die Entsalzung über C<sub>18</sub>-Tips Bestandteil der Analyse und muss nicht von den Nutzern durchgeführt werden.

Im Falle von relativen oder absoluten Quantifizierungen von Proteinen, posttranslationalen Proteinmodifikationen oder Metaboliten (isotopenmarkiert oder label-freie Quantifizierung, SRM-, SIM- und PRM-Analysen) wird im Rahmen der Datenauswertung eine Quantifizierung von Biomolekülen mit Hilfe der Analyse-Software des Geräteherstellers oder mit externen Software-Paketen durchgeführt. Weitere Details zu den vorhandenen Softwarepaketen finden sich auf der Homepage der Serviceeinheit. Statistische Auswertungen, die über die in den vorhandenen Softwarepaketen enthaltenen Funktionen hinausgehen, müssen von den Nutzern selbstständig durchgeführt werden. Gleiches gilt für die Einbindung von Informationen aus Datenbanken in die Ergebnistabellen.

5. NanoLC- bzw. UHPLC-MS/MS Analyse von hochkomplexen Proben (HPLC-Analysezeit > 2 h, Proteine/Metaboliten)

Die Analyse hochkomplexen Proben erfordert eine aufwändigere chromatographische Auftrennung der Proben und damit eine längere Analysezeit am Gerät selbst. Um der höheren Nutzungszeit Rechnung zu tragen, werden Analysen mit Messzeiten > 2 h pro Analyse mit einer höheren Nutzungsgebühr in Rechnung gestellt. Ansonsten gelten die gleichen Bestimmungen, die bereits unter 4. für Analysen mit Messzeiten < 2 h beschrieben wurden.

6. Typhoon-Imager

Der Typhoon variable mode Imager ist eine gemeinsame Anschaffung von 6 Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim. Mit diesem Gerät können Arbeitsgruppen nach Einweisung selbstständig mit Fluoreszenzfarbstoffen markierte oder radioaktive Gele scannen.

7. DNA-Arrays

Zum Scannen von DNA-Arrays auf Standard-Objektträgern steht ein GenePix 4000B Microarray Scanner zur Verfügung, der nach Einweisung durch das Personal der Serviceeinheit von Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim kostenlos genutzt werden kann.

## § 3 Nutzung

### (1) Kontaktaufnahme und Projektbesprechung

Zu Beginn eines neuen Projekts muss ein Termin für eine Projektbesprechung mit dem wissenschaftlichen Personal des Moduls vereinbart werden. Die entsprechenden Ansprechpartnerinnen und Ansprechpartner sind auf der Homepage der Serviceeinheit aufgeführt. In diesem Gespräch werden die geplanten Versuche besprochen, die optimal

geeignete Probenvorbereitung und Analysemethode ermittelt sowie der zeitliche bzw. finanzielle Aufwand für die Analysen bestimmt.

## **(2) Probenvorbereitung**

Die Probenvorbereitung bis zur eigentlichen massenspektrometrischen Analyse wird nach Absprache geeigneter Probenvorbereitungsprotokolle von den Nutzern durchgeführt. Die Abgabe von Proben für eine massenspektrometrische Analytik bzw. die Nutzung des MALDI-TOF Massenspektrometers ist nur nach vorheriger Rücksprache mit dem Personal der Serviceeinheit möglich. Detaillierte Informationen zur Vorbereitung der Proben sind auf der Website der Serviceeinheit („FAQ“) verfügbar.

## **(3) Durchführung der Analysen**

1. Die Analysen des Moduls Mass Spectrometry werden grundsätzlich vom Personal des Moduls durchgeführt.
2. Die Bearbeitung der Proben erfolgt nach Reihenfolge des Abgabedatums. Bei vollständiger Auslastung der Kapazitäten werden Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim gegenüber externen Auftraggebern bevorzugt. Können nicht alle Nutzungsanfragen erfüllt werden, so behält sich das Modul vor, vorübergehend nur Proben von Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim zu analysieren. Diese Prioritätsreihenfolge gilt auch für die Überbuchung einzelner Geräte. Service-Messungen im Rahmen des Volls-service werden gegenüber anderen Messungen bei der Terminvergabe bevorzugt.
3. Arbeitsgruppen der Universität Hohenheim haben die Möglichkeit, Proben am MALDI-TOF Massenspektrometer selbst zu messen, d.h. die Probenvorbereitung und das Auftragen der Proben auf eigenen Probenhaltern (Targets) durchzuführen. Eine selbstständige Durchführung der Messung am Gerät und die Datenbanksuchen sind nur nach Absprache und vorheriger Einweisung durch die Laborleiterin oder den Laborleiter des Moduls möglich.
4. Öffnungszeiten: Die Nutzung der Geräte zur Massenspektrometrie und Proteinbiochemie der Serviceeinheit ist wochentags von 8:00 Uhr bis 17:00 Uhr möglich. Außerhalb der Öffnungszeiten besteht für eingewiesene Nutzerinnen und Nutzer die Möglichkeit, sich in der Serviceeinheit gegen Eintrag ins Schlüsselbuch einen Schlüssel auszuleihen. Der Schlüssel ist unverzüglich nach der Messung zurückzugeben.
5. Eine Aufnahme in die Liste der eingewiesenen Nutzerinnen und Nutzer erfolgt auf Antrag bei der Leiterin oder beim Leiter der Serviceeinheit.
6. Bei unsachgemäßer Benutzung haftet die Nutzerin oder der Nutzer für entstandene Schäden.
7. Nach Ablauf des Projektes werden noch vorhandene Proben an die Nutzer zurückgegeben oder nach Absprache mit den Nutzern entsorgt.

## § 4 Datensicherung

- (1) Die unmittelbare Speicherung der akquirierten Messdaten erfolgt jeweils auf dem lokalen Rechner am Analysegerät. Die Daten werden zudem auf externen Speicherlaufwerken gesichert. Nach Abschluss des Projektes erhält die Nutzerin oder der Nutzer alle Rohdaten in Kopie, sowie die Auswertung im vorher vereinbarten Umfang. Die weitere Datensicherung nach Abschluss des Projektes obliegt den einzelnen Nutzern.
- (2) Die Daten auf den externen Speicherlaufwerken werden durch ein Passwort vor dem unbefugten Zugriff von außen geschützt
- (3) Bei Verlust der Daten kann die Serviceeinheit nicht zur Verantwortung gezogen werden.

## § 5 Haftung

- (1) Die Geräte der Serviceeinheit sind nur nach Einweisung durch die Laborleiterin oder den Laborleiter oder durch ihn autorisierte Mitarbeiter selbstständig zu bedienen.
- (2) Kommt es infolge unsachgemäßer Bedienung zu Schäden, haften die jeweiligen Nutzer.
- (3) Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Moduls können nicht für das Zustandekommen von irrelevanten Daten verantwortlich gemacht werden.
- (4) Das Modul Mass Spectrometry behandelt Proben mit der gebotenen Sorgfalt. Für den Verlust oder die Beschädigung von Proben (z.B. wegen Stromausfalls) übernimmt das Modul keine Haftung.

## § 6 Entgelte

### (1) MALDI-TOF-Massenspektrometer (Autoflex III)

	<b>Intern</b> (Durchführung erfolgt durch die Serviceeinheit)	<b>Intern</b> (Selbstständige Durchführung)	<b>Extern</b> (Durchführung erfolgt durch die Serviceeinheit)
<b>PMF-Analyse (MALDI-TOF)</b> inklusive 1 MS/MS-Spektrum	40 € je Probe Staffelung: ab 20 Proben: 20 € je Probe ab 100 Proben: 10 € je Probe	20 € je Probe Staffelung: ab 20 Proben: 10 € je Probe ab 100 Proben: 5 € je Probe	80 € je Probe Staffelung: ab 20 Proben: 40 € je Probe ab 100 Proben: 20 € je Probe
<b>Molekulargewichtsbestimmung Peptide/Proteine/Metabolite (MALDI-TOF)</b>	20 € je Probe Staffelung: ab 10 Proben: 10 € je Probe	10 € je Probe Staffelung: ab 10 Proben 5 € je Probe	40 € je Probe Staffelung: ab 10 Proben 20 € je Probe

### ESI-Massenspektrometer (LTQ-OrbitrapXL, 5500 QTRAP, QExactive Plus)

	<b>Intern</b>  (Durchführung erfolgt durch die Serviceeinheit)	<b>Intern</b>  (Selbstständige Durchführung)	<b>Extern</b>  (Durchführung erfolgt durch die Serviceeinheit)
<b>NanoLC- bzw. UHPLC-MS</b>	40 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 20 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache		80 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 40 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache
<b>NanoLC- bzw. UHPLC MS/MS</b>  <b>HPLC-Analysezeit &lt; 2 h</b>	60 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 30 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache		120 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 60 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache
<b>NanoLC- bzw. UHPLC MS/MS</b>  <b>Analyse von hochkomplexen Proben</b>  <b>HPLC-Analysezeit &gt; 2 h</b>	100 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 50 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache		200 € je Probe  Staffelung:  ab 20 Proben: 100 € je Probe  > 100 Proben: Preis nach Absprache

- (2) Die Staffelung bezieht sich auf die Proben je Auftrag, nicht auf die Anzahl der Proben pro Halbjahr. Für externe Kooperationspartner fällt zusätzlich zu den Entgelten die Umsatzsteuer (zurzeit 19%) an. Die Preise beziehen sich auf die Kosten für die Messung und die dafür nötigen Verbrauchsmaterialien (Lösungsmittel, Probengefäße, etc.). Werden Referenzsubstanzen für die Methodenetablierung oder absolute Quantifizierungen benötigt, werden diese entweder von den Nutzern gestellt oder nach Absprache vom Modul gekauft und den Nutzern in Rechnung gestellt.
- (3) Änderungen der Entgelttabelle werden bei Bedarf auf einvernehmlichen Vorschlag der Modulleiterin oder des Modulleiters und der Geschäftsführenden Direktorin oder des Geschäftsführenden Direktors der CFH und nach Abstimmung mit der Prorektorin oder dem Prorektor für Forschung vom Rektorat beschlossen. Die geänderten Gebührensätze sind nach erfolgtem Rektoratsbeschluss in den Amtlichen Mitteilungen der UHOH zu veröffentlichen, damit sie rechtswirksam werden.

## **§ 7 Abrechnungsmodalitäten**

- (1) Jede Arbeitsgruppe / jedes Fachgebiet erhält halbjährlich eine Aufschlüsselung der gemessenen Proben. Die Berechnung erfolgt auf der Grundlage der Entgelttabelle des § 6. Grundlage für die Rechnungsstellung sind die bis zum Abrechnungszeitpunkt bearbeiteten Aufträge.
- (2) Die Abrechnung wird per Hauspost zugestellt. Externe Kooperationspartner erhalten die Abrechnung nach abgeschlossener Bearbeitung ihrer Probe auf dem Postweg. Einnahmen und Ausgaben des Moduls werden auf einem eigenen Buchungsabschnitt verbucht.

## **§ 8 Publikation von Ergebnissen**

Hat die Beteiligung der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Moduls wesentlich zum wissenschaftlichen Gelingen eines Projekts beigetragen, z.B. durch die Entwicklung neuer Methoden, aufwändige Auswertungen (z.B. Quantifizierung großer Datensätze) oder Interpretationen von Ergebnissen, so ist die betreffende Person als Co-Autorin bzw. als Co-Autor der Publikation zu nennen. Jede andere Form der Beteiligung, ist von den Nutzern in der Danksagung (Acknowledgement) der Publikation zu erwähnen.

## **§ 9 Inkrafttreten**

Diese Interims-Benutzungs- und Entgeltordnung tritt 01.07.2016 in Kraft. Sie gilt bis zum Beschluss einer endgültigen Benutzungs- und Entgeltordnung für das Modul Mass Spectrometry durch den Senat der Universität Hohenheim.

Die Benutzungs- und Entgeltordnung der Serviceeinheit des Life Science Centers in ihrer Fassung vom 15.12.2014 (Amtliche Mitteilungen Nr. 1003) tritt gleichzeitig mit dem Inkrafttreten der Interims- Benutzungs- und Entgeltordnung außer Kraft.

Hohenheim, 23. Mai 2016

Professor Dr. Stephan Dabbert

- Rektor -