

Nutzerordnung für die Metabolomicsplattform am Institut für Biologie und Biotechnologie der Pflanzen

Beschlossen am: 28.03.2023

Die Metabolomicsplattform der Abteilung für Grüne Biotechnologie am Institut für Biologie und Biotechnologie der Pflanzen (IBBP) steht unter der Leitung von Prof. Dr. Till Ischebeck. Die Metabolomicsplattform umfasst derzeit GC/Q-TOF (mit Headspace und SPME Analyse) untergebracht in Räumen der AG Ischebeck. Die spezialisierte Analyse von pflanzlichen, mikrobiologischen und tierischen Proben wird den Arbeitsgruppen des IBBPs, des Fachbereichs Biologie und interessierten Arbeitsgruppen der WWU zugänglich gemacht. Zudem steht sie auf Anfrage auch Gruppen in Deutschland und weltweit zur Verfügung.

Neben der Nutzung der Arbeitsgruppe Ischebeck als Hauptnutzer zur Etablierung und Weiterentwicklung neuer Methoden, stehen die massenspektrometrischen Analysen den Arbeitsgruppen des IBBPs, dem Fachbereich Biologie und anderen Arbeitsgruppen der Universität als spezifische Kollaborationsprojekte oder in Serviceleistungen (im Rahmen der Verfügbarkeit) zur Verfügung.

Als Kollaborationsprojekte bieten wir die Massenspektrometrie basierte Analyse von Metaboliten aus unterschiedlichen Geweben an, welches das Spezialgebiet der AG Ischebeck darstellt. Zudem stellt die Arbeitsgruppe ihre Expertise im Bereich der Probenvorbereitung und der Datenanalyse zur Verfügung (Kostenschema, siehe unten).

§1 Ordnung

§1.1 Die Nutzerordnung regelt:

- (1) die Organisation der Arbeitsabläufe zur Nutzung der Metabolitanalytik
- (2) die Beziehungen zu Anwendern und Kollaborationspartnern.

§1.2 Die Nutzerordnung ist für alle Nutzer verbindlich.

§2 Organisation der Metabolomicsplattform

§2.1 Verantwortliche Personen und Mitarbeiter der Plattform sind:

- (1) Leiter der Plattform: Prof. Dr. Till Ischebeck
- (2) Wissenschaftliche Mitarbeiter: Dr. Lea Hembach, Dr. Martin Bonin
- (3) Technische Assistentin: Karin Topp

§2.2 Die Metabolomicsplattform wird ausschließlich von verantwortlichen Personen der AG Ischebeck betrieben und können unter Aufsicht und Anweisung von anderen Mitgliedern der AGs des IBBPs benutzt werden. Eine selbstständige Benutzung nach gründlicher Unterweisung ist ebenfalls möglich.

§2.3 Geräteverantwortlich für das GC/Q-TOF (mit Headspace und SPME Analyse) Massenspektrometer in Schlossplatz 8 sind Prof. Dr. Till Ischebeck, Dr. Lea Hembach, Alexander Naßmacher assistiert von Karin Topp. Die Geräteverantwortlichen sind bei Krankheit oder Urlaub in Vertretung verantwortlich.

§2.4 Die Metabolomicsplattform steht folgenden Gruppen (in abgestufter Priorität) für die massenspektrometrische Analyse von Proben zur Verfügung:

- (1) Arbeitsgruppen des IBBP und Partnern aus Forschungsverbänden (z.B. SFBs, FOR)
- (2) Arbeitsgruppen des Fachbereichs Biologie
- (3) Nutzer aus anderen akademischen (non-profit) Organisationen
- (4) Nutzer aus kommerziellen Unternehmen

§3 Regeln und Aufgaben der Mitarbeiter der Metabolomicsplattform

§3.1 Zu den Aufgaben der Leiter der Plattform zählen:

- (1) Die Einteilung und Anleitung der an der Plattform beschäftigten Mitarbeiter.
- (2) Die zweckdienliche Verwendung der Plattform zugewiesenen Ressourcen.
- (3) Die Organisation interner Arbeitsabläufe im Hinblick auf Effizienz und gleichbleibend hohe Qualität der Ergebnisse, sowie reibungslose Interaktion mit Nutzern.
- (4) Die Wartung, Instandhaltung und Optimierung des Geräts.
- (5) Die Betreuung und Anleitung von Anwendern und Kollaborationspartnern, die zeitlich befristet ein Projekt in der Plattform bearbeiten.
- (6) Die Weiterbildung und Organisation der Teilnahme von Mitarbeitern an Fortbildungsmaßnahmen mit dem Ziel, die methodisch-technischen Möglichkeiten der Plattform an die allgemeinen Entwicklungen anzupassen.
- (7) Die Pflege der Homepage sowie der bioinformatischen Plattformen zur Datenspeicherung und -auswertung
- (8) die Priorisierung der Probenbearbeitung bei einem ungewöhnlich hohen Probenaufkommen bzw. in Fällen erhöhter Dringlichkeit.

§3.2 Der Computer des Massenspektrometers darf nicht für das Surfen im Internet benutzt werden, außer es handelt sich dabei um wartungsbezogene Recherchen. Automatische Windows-Updates sind deaktiviert und werden einmal wöchentlich bei Wartung der Geräte von den wissenschaftlichen Mitarbeitern bzw. technischen Assistentinnen installiert. Das Installieren von Programmen ohne Absprache mit den Leitern der Plattform ist untersagt.

§3.3 Alle Proben müssen nach den aktuellen Protokollen der Metabolomicsplattform zur Probenvorbereitung vorbereitet werden.

§3.4 Der Datentransfer der Rohdaten auf den Server der Abteilung erfolgt automatisch mit Hilfe der SyncToy-Software.

§3.5 Es müssen wöchentliche Qualitätsstandards analysiert werden, um eine hohe Qualität und zuverlässige Analysen zu garantieren. Bei Nachlassen der Sensitivität oder der Messgenauigkeit wird das Gerät gereinigt bzw. neu kalibriert. Bei Verschlechterung der Chromatographie wird die Säule ausgetauscht. Ein Ölwechsel der Vorpumpen erfolgt einmal jährlich.

§3.6 Für die bioinformatische Datenanalyse zur Identifizierung und Proteomquantifizierung stehen die Softwarepakete des Geräteanbieters auf dem Messrechner zur Verfügung. Die Software MsDIAL wird auf einem separaten Rechner installiert. Beide Rechner sind über die remote Desktop Funktion zugänglich.

§3.7 Die Nutzungsdauer der Geräte durch die einzelnen Projekte wird von den technischen Assistenten erfasst. Die erfassten Daten werden bei Bedarf statistisch ausgewertet. Für kostenpflichtige Nutzer dienen die Daten als Berechnungsgrundlage für das Nutzungsentgelt. Die Metabolomicsplattform behält sich vor, aus technischen oder organisatorischen Gründen einzelne vorgemerkte Termine nach Rücksprache mit dem gebuchten Benutzer zu verschieben oder abzusagen.

§4 Probenanahme und Massenspektrometrische Analyse

§4.1 Bei Service- wie auch Kooperationsprojekten bieten die wissenschaftlichen Mitarbeiter und/oder Leiter der Metabolomicsplattform ausführliche Beratung bezüglich der Versuchsplanung, wichtiger Kontrollen und zur Probenvorbereitung an, sowie die quantitative Auswertung und Interpretation der massenspektrometrischen Daten.

§4.2 Proben für die massenspektrometrische Analyse müssen von den Kooperationspartnern nach genauer Anweisung vorbereitet und können nach Terminvereinbarung abgegeben werden. Die Proben

erhalten dann eine eindeutige und fortlaufende Identifikationsnummer (ID). Messtermine können in Absprache mit den wissenschaftlichen Mitarbeitern gebucht werden.

§4.3 Proben können entweder per Post oder nach Anmeldung persönlich zwischen 10 und 14 Uhr (Raum 109, Schlossplatz 8, 48149 Münster) gebracht werden. Die Plattform übernimmt keine Haftung für die Proben. Toxische, pathogene sowie radioaktive Proben können nicht bearbeitet werden.

§4.4 Benutzer/innen müssen vor Abgabe ihrer Proben einen Probenfragebogen (Datei: Sample submission form) ausfüllen (siehe Anhang), die allgemeine Personen- und Projekt-bezogene Daten erfragt. Diese Daten können per EDV weiterverarbeitet werden; die Vertraulichkeit der Daten ist gewährleistet. Weiterhin erklären der Versuchsdurchführende und der übergeordnete Projektleiter auf dem Fragebogen mit ihren Unterschriften, dass die Proben chemisch und biologisch unbedenklich sind und die Sicherheit und Gesundheit der Mitarbeiter der AG Ischebeck nicht gefährden. Ohne das korrekte Ausfüllen des Fragebogens und ohne Unterschriften ist keine Messung an dem Geräte der Plattform möglich. Der Fragebogen kann online heruntergeladen werden.

§4.5 Als Service-Dienstleistungen oder auf Kollaborationsbasis können folgende Arbeiten, die über die Routinemessungen am Gerät hinausgehen, durchgeführt werden:

- a) Extraktion von Metaboliten aus verschiedenen Geweben
- b) Derivatisierung der Proben
- c) MS/MS Analyse zur Strukturaufklärung unbekannter Metaboliten
- d) Auswertung der Daten

§5 Datensicherung

Alle Rohdaten und ausgewertete Daten der Forschungs- und Kooperationsprojekte der Metabolomicsplattform werden zentral auf einem speziellen Laufwerk des Servers des Fachbereichs Biologie der WWU gespeichert und täglich gesichert. Die Rohdaten werden für 10 Jahre gespeichert und können bei Bedarf von den Kooperationspartnern eingesehen und kopiert werden. Daten aus Serviceprojekten werden über die WWU Cloud den Nutzern zum Download zur Verfügung gestellt und der Nutzer des Service ist für die Dauerhaftigkeit und Fehlerfreiheit der Sicherung der Daten selbst verantwortlich.

§6 Kosten

Die Metabolomicsplattform ist bestrebt, die Betriebskosten (Wartung, Reparaturen, Verbrauchsmittel) aus Drittmitteln sowie Einnahmen aus Serviceleistungen zu bestreiten. Die im Betrieb anfallenden Kosten werden auf die wissenschaftlichen Gruppen umgelegt. Im Fall von Drittmittel geförderten gemeinsamen Projekten, in denen pauschale Mittel für die Arbeiten der Metabolomicsplattform vorgesehen sind, werden Einzelleistungen nicht in Rechnung gestellt.

Die aktuell gültigen Preise werden in der aktuellen Nutzungsordnung veröffentlicht. Der Gesamtpreis für die Analysen setzt sich aus den Kosten für die Probenvorbereitung einer messzeitabhängigen Pauschale und eventueller Datenanalyse zusammen.

Die Kosten für die Probenvorbereitung und Datenauswertung hängen von der Anzahl und der Art der Proben ab. Auf Anfrage wird ein Kostenvoranschlag erstellt. Die benötigte Messdauer variiert je nach Komplexität und Art der Proben zwischen 15 und 60 min. Die Kosten für die Probenvorbereitung und die Messzeit betragen 25 € pro Stunde. Für die Datenanalyse werden 50 € pro Stunde berechnet.

§7 Veröffentlichung von Daten

Die Publikation von Messdaten, die im Rahmen einer Kollaboration oder eines Gemeinschaftsprojekts erhalten wurden, ist mit der Leitung der Metabolomicsplattform abzusprechen und der wissenschaftliche Beitrag angemessen anzuerkennen. Generell behält sich die Metabolomicsplattform auf alle generierten Daten das Urheberrecht vor. Bei Serviceanalysen geht das Urheberrecht mit der Bezahlung der Leistung auf den Auftraggeber über. Die Beteiligung der

Metabolomicsplattform an der Entstehung von Daten muss in jedem Fall entsprechend den Regeln der guten wissenschaftlichen Praxis (siehe DFG-Richtlinie) bei deren Veröffentlichung berücksichtigt werden. Rechtfertigt der Umfang der Beteiligung eine Co-Autorenschaft von Mitarbeitern der Metabolomicsplattform (z.B. Beteiligung an Versuchsplanungen, und/oder aufwendige Auswertungen und Interpretationen von Ergebnissen, Entwicklung von Methoden, ua.) so sind diese bei der Erstellung des Manuskriptes zu berücksichtigen. Jede andere Form der Beteiligung (Service) ist im Acknowledgement zu erwähnen.