Nutzungsordnung des „*Center for Structural Studies (CSS)*“

Das „*Center for Structural Studies*“ ist eine zentrale Forschungs- und Service-Einrichtung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen-Fakultät der Heinrich-Heine-Universität (HHU) im Bereich der strukturen-liefernden Verfahren, insbesondere zur Bestimmung der dreidimensionalen Proteinstruktur mittels Röntgendiffraktometrie oder der Lösungsstruktur von Proteinen und -Komplexen durch Small-Angle-Light-Scattering (SAXS). Ziel ist es, allen interessierten Arbeitsgruppen der HHU die Möglichkeit zu bieten, entweder selbst unter Anleitung oder als Voll-Service sowohl die Infrastruktur (Spezialchemikalien, Kristallisationsmaterial, Großgeräte, Synchrotron-Messzeit) als auch die Expertise des CSS für ihre Projekte zu nutzen. Alle notwendigen Experimente (Proteinkristallisation, Kristalloptimierung, Bestimmung geeigneter Kryobedingungen, Datensammlung, Strukturaufklärung und -verfeinerung) können hier zentral durchgeführt werden.

Eine Nutzung durch externe Forschergruppen ist nach Absprache ebenfalls möglich.

Verantwortliches, autorisiertes Personal:

Geschäftsführender Direktor: Prof. Dr. Sander Smits
Leitung: Dr. Astrid Port
Mitarbeiter: Jens Reiners

§ 1 Einweisung

Alle Geräte außer dem Pipettierroboter und dem Generator dürfen nach Einweisung durch autorisiertes Personal selbständig genutzt werden. Anwendungsbezogene Einstellungen dürfen vom Nutzer geändert werden, hingegen ist es strikt untersagt, grundlegende Einstellungen oder Konfigurationen zu verändern.
Synchrotron-Messungen werden ausschließlich durch das autorisierte Personal durchgeführt.

§ 2 Haftung

Für Schäden an Geräten, Pipetten oder anderen Werkzeugen, die nachweislich durch unsachgemäße Bedienung entstehen, ist der Nutzer bzw. der jeweilige Institutsleiter verantwortlich, der die entstandenen Reparaturkosten übernehmen muss. Die Betreiber des „*Center for Structural Studies*“ sind berechtigt, in begründeten Fällen den Nutzer von einer weiteren Bedienung auszuschließen.

§ 3 Meldepflicht bei besonderen Vorkommnissen

Im Falle von Software-Problemen, Fehlermeldungen, Gerätedefekten oder Ähnlichem, muss der Nutzer seine Arbeit sofort beenden und ist verpflichtet, dies schnellstmöglich dem verantwortlichen Administrator mitzuteilen. Es ist nicht erlaubt, eigenständige Reparaturversuche oder Justierungen vorzunehmen.

§ 4 Terminvereinbarung

Für Kristallisationsansätze mit dem Pipettierroboter, Diffraktionsmessungen am Generator oder SAXS-Messungen muss der Nutzer mindestens 2 Tage im Voraus mit dem autorisierten Personal einen Termin vereinbaren. In jedem Fall muss sich der Nutzer mit dem autorisierten Personal absprechen, um Zugang zu den Räumlichkeiten zu erhalten, damit ein reibungsloser Betrieb gewährleistet werden kann. Alle Projekte werden nacheinander abgearbeitet bzw. in der Reihenfolge der Terminvereinbarung.

§ 5 Datenspeicherung und -sicherung

Daten dürfen grundsätzlich nur auf den dafür vorgesehenen Ordnern des jeweiligen Steuerrechners zwischengespeichert werden (meist im Ordner „User“). Es ist nicht erlaubt, ohne Absprache eigene Speichermedien an die Steuerrechner anzuschließen. Für die Sicherung der eigenen Daten ist der Nutzer eigenverantwortlich. Die Daten auf den Steuerrechnern werden regelmäßig durch die Administratoren gesichtet und gegebenenfalls gelöscht. Daten vom Synchrotron werden durch die Administratoren gesichert.

§ 6 Verwendung von Daten- und Bildmaterial in Publikationen

Werden Bilder oder Daten in Publikationen einer Arbeitsgruppe verwendet, die an Geräten des CSS erzeugt oder am Synchrotron als Service gesammelt wurden, soll das „*Center for Structural Studies*“ namentlich in der Danksagung („Acknowledgements“) der Veröffentlichung genannt werden.

<u>Alle Nutzer des CSS sind verpflichtet, in ihren Publikationen der DFG zu danken:</u>

"*The Center for Structural Studies is funded by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG Grant number 417919780).*"

Für Röntgenstruktur-Daten bitte auch „INST 208/740-1 FUGG“ (Röntgendiffraktometer) angeben, für SAXS-Daten bitte „INST 208/761-1 FUGG“ (SAXS-Anlage) angeben.

Dies soll auch den verantwortlichen Personen mitgeteilt werden. Ergebnisse werden nur dem Auftraggeber übermittelt bzw. nur mit dessen ausdrücklichem Einverständnis an Dritte weitergegeben.

§ 7 Nutzungskosten

Alle Nutzer müssen sich anteilig an den Kosten für Verschleiß an allen CSS-Geräten beteiligen. Dies geschieht entweder über einen jährlichen Mitgliedsbeitrag oder über einen Aufschlag auf die verwendeten Verbrauchsmaterialien.

Gruppe	Mitgliedsbeitrag p.a.
Einzelgruppen	700 Euro
GRK's	2 000 Euro
SFB's	2 500 Euro
Exzellenzcluster	3 000 Euro
Externe	1 000 Euro

Für die verschiedenen Experimente bzw. das verwendete Verbrauchsmaterial fallen unterschiedliche Kosten an. Die Preise für Verbrauchsmittel (Platten, Chemikalien, etc.) basieren auf den jeweils aktuellen Einkaufspreisen und können jährliche Änderungen unterliegen. Die Abrechnung erfolgt halbjährlich anhand der verbrauchten Materialen. Die Berechtigung eines Mitarbeiters zur Nutzung des „*Center for Structural Studies*" ist von dem jeweiligen Institutsleiter oder einem budgetverantwortlichen Stellvertreter schriftlich zu erteilen.

§ 8 Probenvorbereitung Proteinkristallisation

Um ein optimales Screening und gute Reproduzierbarkeit gewährleisten zu können, müssen einige Faktoren beachtet werden bzw. Unterlagen/Reagenzien beigefügt werden (siehe auch Auftragsformular):

1.) Der niedrigmolare Proteinpuffer sollte so wenig Agenzien wie möglich enthalten (gerade so viel, dass das Protein stabil ist; möglichst kein Phosphatpuffer)
2.) Das Protein muss sauber (min. zu 90 % in der SDS-PAGE) und homogen sein (nur ein oligomerer Zustand)
3.) Das Protein muss über mind. 3 Wochen stabil sein (bei 4 °C, 12 °C oder 20 °C)
4.) Mindestkonzentration an Protein: 5 – 10 mg/ml
5.) Mindestvolumen an Proteinlösung pro Screen (96 Bedingungen): 15 µl
6.) Bitte etwa 2 ml Proteinpuffer mit Angaben über die Zusammensetzung beifügen

Darüber hinaus sind einige weitere Angaben für unsere Experimente notwendig:

7.) Datum der Proteinreinigung und Lagerbedingungen (Temperatur) bitte angeben
8.) Abbildung SDS-PAGE bitte beifügen

9.) Homogenitätsnachweis (z. B. Abbildung Gelfiltration) bitte beifügen
10.) Proteinkonzentration, - Molekulargewicht und -Puffer bitte angeben
11.) Sofern bestimmte Zusätze (z. B. Metall-Ionen, Cofaktoren etc.) für die Aktivität oder Stabilität essentiell sind, bitte angeben
12.) Gibt es einen Aktivitätstest? Wenn ja: ist das Protein im verwendeten Puffer aktiv?
Bei Co-Kristallisation: Angaben über das/die Substrat(e) und geeignete Konzentration(en). Sind die Substrat(e) nicht kommerziell erhältlich, müssen diese vom Nutzer bereitgestellt werden.

§ 9 Probenvorbereitung SAXS

Für eine bevorstehe Messung müssen einige Faktoren beachtet werden bzw. Unterlagen/Reagenzien beigefügt werden (siehe auch Auftragsformular):

1. Der niedrigmolare Proteinpuffer sollte so wenig Agenzien wie möglich enthalten (gerade so viel, dass das Protein stabil ist; kein Phosphatpuffer und maximal 5 % Glycerin)
2. Das Protein muss sauber (min. zu 95 % in der SDS-PAGE) und homogen sein (nur ein oligomerer Zustand)
3. Das Protein muss über mind. 2 Tage stabil sein (bei 4 °C, 12 °C oder 20 °C)
4. Mindestkonzentration an Protein: 5 - 10 mg/ml
5. Mindestvolumen an Proteinlösung pro Messung: 70 µl
6. Bitte etwa 2 ml Proteinpuffer mit Angaben über die Zusammensetzung beifügen. (Wichtig: Es muss exakt derselbe Puffer sein, in dem das Protein gereinigt/dialysiert/konzentriert wurde, um genaue Intensitätswerte zu erhalten!)

Darüber hinaus sind einige weitere Angaben für unsere Experimente notwendig:

1. Datum der Proteinreinigung und Lagerbedingungen (Temperatur)
2. Abbildung SDS-PAGE
3. Homogenitätsnachweis (z. B. Abbildung Gelfiltration)
4. Proteinkonzentration, Molekulargewicht, Extinktionskoeffizient und Pufferzusammensetzung
5. Sofern bestimmte Zusätze (z. B. Metall-Ionen, Cofaktoren etc.) für die Aktivität oder Stabilität essentiell sind, bitte angeben
6. Proteinsequenz inkl. Tags und Schnittstellen (Textfile)
7. Sofern vorhanden: Struktur oder Homologiemodel

Prof. Dr. Sander Smits