

## Nutzungsordnung der Core Facility ‚Medizinische Chemie‘ am ZTI

### Allgemeines:

Die Core Facility (CF) ‚Medizinische Chemie‘ ist eine CF des Fachbereichs Medizin. Sie verfügt über die Expertise des Designs, der Synthese und strukturellen Optimierung von Kleinmolekülen, die z.B. als einfache tool compounds für die Forschung verwendet werden können. Die weitere Optimierung von screening hits ist ebenfalls möglich, allerdings häufig nur in Form eines Kooperationsprojekts sinnvoll. Anfragen sind an die Leiterin der Core Facility zu stellen. Eine eigenständige Benutzung des Equipments der Core Facility ist nicht möglich.

Bei kommerziell erhältlichen Verbindungen entscheidet die Leitung der Core Facility unter wirtschaftlichen Gesichtspunkten, ob die Synthese der Verbindung in der Core Facility erfolgt.

### Leitung

Prof. Dr. Wibke E. Diederich  
ZTI - 00/0460  
Tel: 28-25810  
[diederich@staff.uni-marburg.de](mailto:diederich@staff.uni-marburg.de)

### 1. Service der CF

Der Service der CF umfasst:

- Recherche in chemischen Datenbanken - kostenfrei
- Reinheitsprüfung von Kleinmolekülen - kostenpflichtig
  - HPLC-MS
  - Elementaranalyse
  - quantitative  $^1\text{H}$  NMR-Spektroskopie
- Synthese von literaturbekannten Verbindungen (tool compounds) nach Prüfung der Durchführbarkeit - kostenpflichtig
- Erarbeitung alternativer Substanzvorschläge - kostenfrei
- Optimierung eines hits - kostenpflichtig (nach Prüfung der Durchführbarkeit) hinsichtlich z.B.
  - Affinität
  - Selektivität
  - Pharmakokinetik (ADME)

## 2. Nutzungsgebühren

Die Nutzungsgebühren gliedern sich in **allgemeine** und **projektspezifische** Nutzungsgebühren und sind der Aufstellung im Anhang zu entnehmen.

Die **allgemeinen** Nutzungsentgelte dienen dazu, den Betrieb der CF aufrecht zu erhalten und werden insbesondere für anteilige Personalkosten, Verbrauchsmaterialien und technische Updates verwendet. Bei der Festlegung der Höhe der Gebühren wurden die Empfehlungen der DFG zugrunde gelegt.

Bei den **projektspezifischen** Nutzungsgebühren handelt es sich um die tatsächlich angefallenen Kosten für Chemikalien, Verbrauchsmaterialien oder die Inanspruchnahme anderer Serviceabteilungen (wie z.B. der NMR-Spektroskopie, der Elementaranalytik oder der Massenspektrometrie der Fachbereiche Pharmazie bzw. Chemie), für die die Core Facility in Vorleistung getreten ist.

Die Nutzungsgebühren werden in regelmäßigen Abständen evaluiert und können bei Bedarf angepasst werden.

Die Nutzer der CF werden durch die CF-Leitung darauf hingewiesen, dass entsprechende Nutzungsgebühren bei der DFG bei neuen Forschungsanträgen mitbeantragt werden können. Hierbei werden die Antragsteller durch die CF-Mitarbeiter unterstützt.

Eine grobe Kalkulation der zu erwartenden Kosten erfolgt vor der jeweiligen Durchführung eines Auftrags durch die Leitung der Core Facility. Die Nutzungsgebühren sind auch in einem solchen Fall zu entrichten, in dem die Synthese der gewünschten Substanz letztlich nicht erfolgreich verlaufen sollte. Treten bei einem Projekt unvorhergesehene Schwierigkeiten auf, die als Folge den ursprünglichen Kostenvoranschlag um mehr als 20% übersteigen ließen, so wird der Nutzer umgehend darüber informiert, so dass dieser den betreffenden Auftrag zurückziehen kann; bereits angefallene Kosten müssen jedoch in jedem Fall entrichtet werden.

## 3. Pflichten und Aufgaben der Nutzer

- Die betreffenden Nutzer/Auftraggeber bzw. Arbeitsgruppen sind verpflichtet, die Arbeit der CF bei substanziellem wissenschaftlichem Input bei Veröffentlichungen angemessen in Form einer Ko-Autorenschaft zu berücksichtigen. In allen anderen Fällen ist die CF im Acknowledgement namentlich zu erwähnen.
- Die betreffenden Nutzer/Auftraggeber bzw. Arbeitsgruppen sind verpflichtet, die angefallenen Kosten durch die Nutzung der Core Facility zu begleichen.

## Anlage:

### Allgemeine Nutzungsgebühren

Es wird eine allgemeine Nutzungsgebühr von 20,00 € pro Synthesestufe für Angehörige des Fachbereichs Medizin erhoben. Für sonstige Angehörige der Philipps-Universität Marburg beträgt die Nutzungsgebühr 25,00 €.

### projektspezifische Nutzungsgebühren

- Chemikalien (Startmaterialien), die sich nicht im Lagerbestand der Core Facility befinden, werden vom Nutzer nach Absprache mit der Core Facility in entsprechender Menge und Reinheit bestellt und an die Core Facility geliefert. Hierzu erhält der Nutzer ein ausgefülltes Bestellblatt, aus dem die entsprechenden Daten hervorgehen.
- Chemikalien, die sich im Lagerbestand der Core Facility befinden und während des Syntheseverlaufs Verwendung finden, werden zu Lasten des Auftraggebers gleichfalls in Rechnung gestellt. Hierzu wird auf das aktuelle online-Preisverzeichnis der entsprechenden Anbieter zurückgegriffen und nur die tatsächlich verbrauchte Menge berechnet.
- Allgemeine Verbrauchsmaterialien, die im Rahmen des Reaktionsansatzes, der Reaktionskontrolle und der nasschemischen Aufarbeitung (Ausschütteln und Trocknen der org. Phase), wie z.B. Spritzen, Filter, DC-Platten, diverse organische Lösungsmittel, NaCl-Lösung, LiCl-Lösung, Magnesiumsulfat u.a., benötigt werden, werden pauschal mit 7,50 € pro Reaktionsansatz, bei Arbeiten unter Schutzgasatmosphäre mit 15,00 € berechnet.
- Die Verwendung getrockneter Lösungsmittel (für Reaktionsansätze unter Inertgas) erfolgt gesondert, wobei auch hier die tatsächlich verbrauchte Menge des Lösungsmittels in Rechnung gestellt wird.
- Für die Aufreinigung des Produkts mittels Umkristallisation werden 20 € in Rechnung gestellt. Erfolgt die Aufreinigung mittels Säulenchromatographie (Fertigkartusche und Lösungsmittel) gelten die nachfolgend genannten Preise. Die Größe der zu verwendenden Fertigkartusche ist dabei jeweils abhängig von der zu trennenden Menge und dem Trennproblem.

• 4 g Säule:	16,50 €	12 g Säule:	28,50 €
• 25 g Säule:	33,00 €	40 g Säule:	39,00 €

Muss für die Säulenchromatographie, um eine ausreichende Trennung zu erreichen, auf eine manuell durchgeführte Säulenchromatographie zurückgegriffen werden, fallen hierbei je nach Größe der Säule und Arbeitsaufwand Kosten zwischen 60,00 € - 500,00 € an. Hierüber wird der Nutzer dann gesondert informiert.
- Die vollständige analytische Charakterisierung der entsprechenden Verbindungen (Zwischen- und Endstufen) erfolgt nach Maßgabe gängiger wissenschaftlicher Journale. Die anfallenden Gebühren durch Nutzung der entsprechenden Serviceabteilungen der Philipps-Universität hierfür werden ebenfalls in Rechnung gestellt (diese können dem Internetauftritt der entsprechenden Serviceabteilungen entnommen werden). Kosten für dafür verwendete deuterierte NMR-Lösungsmittel werden zusätzlich berechnet. Für die Vorbereitung der Probe für die vollständige analytische Charakterisierung werden zusätzlich 10,00 € in Rechnung gestellt.
- Die Erstellung des Experimentellen Teils zu Publikationszwecken erfolgt kostenfrei durch die Leitung der CF.