



Universität Ulm | 89069 Ulm | Germany

Kristallisationsplattform der Universität Ulm

Dr. Thomas Monecke
James-Franck-Ring N27
89081 Ulm
Tel.: +49 731-50 23163
Fax: +49 731-50 23169
thomas.monecke@uni-ulm.de

Nutzungsordnung der Kristallisationsplattform der Universität Ulm

Die Kristallisationsplattform der Universität Ulm (XtalFacility Ulm) ist eine zentrale wissenschaftliche Einrichtung der Fakultät für Naturwissenschaften. Als Forschungs- und Serviceeinrichtung soll sie Wissenschaftlern der Universität und von außerhalb die Möglichkeit eröffnen, die Methode der Röntgenkristallographie (**kollaborativ** oder als **Serviceleistung**) erfolgreich zu nutzen. Ziel der Plattform ist es, allen interessierten Arbeitsgruppen die Möglichkeit zu bieten, entweder selbst durch Anleitung oder als Service, die Infrastruktur (Chemikalien, Kristallisationsmaterial, Großgeräte, Messzeit an Synchrotronen) als auch die Expertise der Plattform für Projekte zu nutzen. Alle notwendigen Schritte (Proteinkristallisation, Kristalloptimierung, Bestimmung geeigneter Kryo-Bedingungen, Datensammlung, Strukturbestimmung und -verfeinerung, sowie Interpretation der Daten) können hier zentral durchgeführt werden. Mit Inanspruchnahme der Kristallisationsplattform erklärt sich der Nutzer mit dieser Nutzungsordnung einverstanden.

Weiterführende Informationen werden auf der *homepage* des Institutes für Pharmazeutische Biotechnologie <https://www.uni-ulm.de/nawi/institute-of-pharmaceutical-biotechnology/> bereit gestellt.

Das Personal der Plattform besteht aus:

- **Koordinator:** Dr. Thomas Monecke
- **Leitung:** Prof. Dr. Dierk Niessing
- **Mitarbeiterin:** Lisa Dreiseitel

§1 Einweisung

Alle Geräte dürfen nach erfolgter Einweisung durch autorisiertes Personal der Kristallisationsplattform selbstständig genutzt werden. Nutzer dürfen anwendungsbezogene Einstellungen ändern. Grundlegende Einstellungen oder Konfigurationen dürfen nicht verändert werden. Die Messung von Datensätzen an Synchrotronen wird ausschließlich durch Personal der Kristallisationsplattform durchgeführt.



§2 Haftung

Für Schäden an Geräten oder Werkzeugen, welche nachweislich durch unsachgemäße Bedienung entstanden sind, ist der jeweilige Nutzer bzw. der Institutsdirektor verantwortlich, der die entstandenen Reparaturkosten übernehmen muss. Die Betreiber der Kristallisationsplattform sind berechtigt, in begründeten Fällen den Nutzer von der weiteren Bedienung auszuschließen.

§3 Meldepflicht

Im Falle von auftretenden Softwareproblemen, Fehlermeldungen, Gerätedefekten oder ähnlichen Vorfällen muss der Nutzer seine Arbeit sofort unterbrechen und ist verpflichtet, dies schnellstmöglich dem verantwortlichen Administrator mitzuteilen. Es ist verboten, eigenständige Reparaturversuche oder Justierungen vorzunehmen.

§4 Terminvereinbarung

Zum Pipettieren von Kristallisationsansätzen mit dem Pipettier-Roboter (Mosquito Xtal3) muss der Nutzer mindestens 2 Tage im Voraus mit dem autorisierten Personal einen Termin vereinbaren. In jedem Fall muss sich der Nutzer mit dem Personal der Kristallisationsplattform absprechen, um Zugang zu den Räumlichkeiten zu erhalten, so dass ein reibungsloser Ablauf gewährleistet werden kann. Projekte werden nacheinander abgearbeitet bzw. in der Reihenfolge der Terminvereinbarung.

§5 Datenspeicherung und -sicherung

Daten dürfen grundsätzlich nur in den dafür vorgesehenen Ordnern des jeweiligen Steuerrechners zwischengespeichert werden. Es ist nicht erlaubt, ohne Absprache eigene Speichermedien an die Steuerrechner anzuschließen. Für die Sicherung der eigenen Daten ist der Benutzer selbst verantwortlich. Die Daten auf den Steuerrechnern werden regelmäßig von den Administratoren gesichert und gegebenenfalls gelöscht. Synchrotron-Daten werden durch die Administratoren gesichert.

§6 Verwendung von Daten- und Bildmaterial in Publikationen

Werden Bilder oder Daten in Publikationen verwendet, die auf der Nutzung der Facility **als Service** basieren, muss die Kristallisationsplattform namentlich in der Danksagung (*Acknowledgements*) der Publikation genannt werden.

Bei über die Bereitstellung der Infrastruktur und Einweisung hinausgehende Unterstützung handelt es sich um eine **wissenschaftliche Kollaboration**. Ein Anspruch auf Erlass der Gebühren (siehe §7) bei Kollaborationen besteht nicht. Bei der Verwendung einer Kristallstruktur oder anderer Daten, die in Kollaboration gewonnen wurden, ist ein Mitarbeiter der Facility oder der direkte Kollaborationspartner Ko-Autor der Publikation. Stellt die Kristallstruktur den wesentlichen Teil der Publikation dar, erklärt sich der Nutzer mit einer Erst-Autorenschaft des Koordinators oder des direkten Kollaborationspartners und einer korrespondierenden Autorenschaft des Leiters des Instituts für Pharmazeutische Biotechnologie einverstanden. Bei



geteilten Erst- und korrespondierenden Autorenschaften entscheidet der jeweilige Beitrag zur Publikation über die Reihenfolge.

Ergebnisse werden nur dem Auftraggeber übermittelt bzw. nur mit dessen ausdrücklichem Einverständnis an Dritte weitergegeben.

§7 Nutzungskosten und Gebühren

Alle Nutzer müssen sich anteilig an den laufenden Kosten aller Geräte der Kristallisationsplattform beteiligen. Dies geschieht über einen Aufschlag auf die verwendeten Verbrauchsmaterialien. Die aktuellen Nutzungskosten sind in der folgenden Tabelle aufgeführt.

Service	Preis
96-well Platte , sitting drop, 1 oder 2 Tropfen (inkl. Platte, Screen, Spitzen, Versiegelung)	50 €
24-well Platte , sitting drop, 1 Tropfen (inkl. Platte, Screen, Spitzen, Versiegelung)	35 €
24-well Platte , hanging drop (inkl. Platte, Screen, Spitzen, Versiegelung)	50 €
zusätzlich Additivscreen oder Schwermetallscreen pro 24-well oder 96-well Platte	15 €
Strukturlösung und -verfeinerung	Nur in Kollaboration

Für die verschiedenen Experimente bzw. für das Verbrauchsmaterial fallen unterschiedliche Kosten an. Die Preise für Verbrauchsmittel (z.B. Platten, Spitzen für den Kristallisations-Roboter, Chemikalien) basieren auf den jeweils aktuellen Einkaufspreisen und können jährlichen Änderungen unterliegen. Die Berechtigung eines Mitarbeiters zur Nutzung der Kristallisationsplattform ist von dem jeweiligen Institutsleiter oder einem budgetverantwortlichen Stellvertreter schriftlich zu erteilen. Sollten entstandene Forderungen nicht beglichen werden, kann der Nutzer, die Arbeitsgruppe bzw. das Institut von der weiteren Nutzung ausgeschlossen werden. Finanzielle Forderungen verfallen durch einen Ausschluss nicht.

§8 Probenvorbereitung für die Proteinkristallisation

Um ein optimales Screening und eine gute Reproduzierbarkeit gewährleisten zu können, müssen einige Faktoren beachtet werden. Entsprechende Unterlagen und Reagenzien müssen beigelegt werden (siehe auch Antragsformular):

- 1) Der niedrigmolare Proteinpuffer sollte so wenig Bestandteile wie möglich enthalten, nämlich gerade so viel, dass das Protein stabil ist. Dabei soll möglichst kein Phosphatpuffer verwendet werden.



- 2) Das Protein muss sauber (mindestens 95% in der SDS-PAGE) und homogen sein (monodispers und nur ein mono- bzw. oligomerer Zustand). Eine Abbildung der SDS-PAGE des finalen Reinigungsschrittes sowie ein Homogenitätsnachweis (z. B. Chromatogramm der Gelfiltration) sollte beigefügt werden.
- 3) Das Protein sollte unter den gewählten Lagerbedingungen mehrere Tage stabil sein.
- 4) Die Mindestkonzentration an Protein beträgt 1 – 10 mg/ml, ist aber probenabhängig. Die Proteinkonzentration und das Molekulargewicht sollten angegeben werden.
- 5) Das Mindestvolumen an Proteinlösung pro Screen (96 Bedingungen) beträgt 30 µl.
- 6) Etwa 2 ml Puffer mit Angaben über die Zusammensetzung sind beizufügen.
- 7) Das Datum der Proteinreinigung und die Lagerbedingungen (z.B. Temperatur) sind anzugeben.
- 8) Sofern bestimmte Zusätze (z. B. Metall-Ionen, Kofaktoren etc.) für die Aktivität oder Stabilität essentiell sind, sollten diese bitte ebenfalls angegeben werden.
- 9) Wenn es einen Aktivitätstest gibt, ist das Protein im verwendeten Puffer aktiv?
- 10) Bei Ko-Kristallisation werden Angaben über das/die Substrat(e) bzw. Produkt(e) und geeignete Konzentration(en) für die Ko-Kristallisation benötigt. Sind die Substrat(e) bzw. Produkt(e) nicht kommerziell erhältlich, müssen diese vom Nutzer bereitgestellt werden.