



INSTITUTE FOR  
MOLECULAR SYSTEMS  
ENGINEERING AND  
ADVANCED MATERIALS



UNIVERSITÄT  
HEIDELBERG  
ZUKUNFT  
SEIT 1386

# Einzelnutzungsordnung für das Röntgendiffraktometer Rigaku Smartlab 9 kW

IMSEAM Core Facility (ICF)

18. November 2024

Es gelten die Rahmennutzungsordnung der Universität sowie die allgemeine Nutzungsordnung der IMSEAM Core Facility (ICF) als übergeordnete Nutzungsordnungen.

## 1. Geltungsbereich

Diese Ordnung regelt die Nutzung des Rigaku Smartlab 9 kW Röntgendiffraktometers (BD68000079-01) im Raum 01.401 am IMSEAM im Anwendungsbetrieb. Das Gerät ist Teil der Core Facility des IMSEAM.

Das Rigaku Smartlab System ist ein hochauflösendes Röntgen-Diffraktometer. Zur Ausstattung gehören eine 9 kW Drehanode, sowie der hochenergetisch auflösende 2D-Halbleiterdetektor HyPix-3000, welcher Betriebsarten in 0D, 1D und 2D unterstützt. Das System ist geeignet für Dünnschicht- und Pulvermessungen. Zu den möglichen Messmodi gehören XRR, 2D SAXS/WAXS, GID.

Für die Nutzung sind die Verwendung folgender Probenhalter inbegriffen: Auf die Standard-Halterung (Universal Z Attachment Platform) können verschiedene Aufsätze appliziert werden. Der Standard-Aufsatz (Standard Attachment Head) mit aufgesetztem Referenz-Probenteller (Height Reference Sample Plate) für Referenz-Messungen, der GI-Probenteller (Grazing Incidence Stage) für Dünnschicht-Messungen, sowie der rotierende Aufsatz für Pulverproben (Capillary Spin Attachment Head).

## 2. Benennung der für den Gerätebetrieb (technisch und wissenschaftlich) zuständigen Personen

- (1) Verantwortlicher Hauptnutzer des Geräts ist die [IMSEAM Core Facility](#).
- (2) Allgemeiner Ansprechpartner und geräteverantwortliche Person ist (in Vertretung) [Dr. Olaf Skibbe](#).
- (3) Ansprechpartner für wissenschaftliche Fragestellungen sind die Nutzer des Geräts (die geräteverantwortliche Person kann hier zur Kontaktaufnahme herangezogen werden).
- (4) [Dr. Olaf Skibbe](#) ist zuständiger Strahlenschutzbeauftragter.

## 3. Art der Gerätenutzung

Das System wird den Nutzern im Anwendungsbetrieb zur Verfügung gestellt. Nach Absprache können Messungen im Servicebetrieb vorgenommen werden.

## 4. Zugangsregelungen und Voraussetzungen für die Gerätenutzung

### 4.1. Anwendungsbetrieb

- (1) Siehe Regularien der Allgemeinen Nutzungsordnung (Abschnitt 1).
- (2) Die zur Nutzung erforderliche Geräteeinweisung wird zur Anwendung bei Dünnschicht-Proben, sowie bei der Messung von Pulver-Proben, durch die in 2 genannte geräteverantwortliche Person durchgeführt. (Die Unterweisung beinhaltet nur die Durchführung der Messung, keine theoretischen Hintergründe oder Hilfestellung bei Auswertung der Daten).
- (3) Das vorhandene Battery Attachment ist Eigentum der Arbeitsgruppe von [Prof. Dr. Klingeler](#). Die Verwendung setzt die vorherige Absprache mit dem Eigentümer und, neben der obligaten Geräte-Einweisung, eine separate Einweisung in die Nutzung des Attachments voraus.
- (4) Die weiterhin vorhandene Cryo Stage (Nutzubngsregeln s. Anhang A) ist Eigentum der Arbeitsgruppe von [Prof. Dr. Deschler](#). Die Verwendung setzt die vorherige Absprache mit dem Eigentümer und, neben der obligaten Geräte-Einweisung, eine separate Einweisung in die Nutzung des Attachments voraus.
- (5) Für die Nutzung des Geräts ist eine vorherige Strahlenschutzunterweisung unerlässlich, diese muss mindestens einmal jährlich wiederholt werden.
- (6) Der Zugang zum Raum ist durch ein manuelles Schließsystem geregelt. Die Schlüssel-Ausgabe erfolgt, nach Abschluss sämtlicher notwendiger Unterweisungen, über [Dr. Olaf Skibbe](#).

## 5. Beschreibung der Nutzungszeitvergabe und des Buchungssystems

- (1) Die Nutzungszeitvergabe erfolgt ausschließlich über den zugehörigen Sharepoint-Buchungskalender. Nutzer können, sobald Sie vom Geräteverantwortlichen freigeschaltet wurden, selbständig Zeit-Slots im entsprechenden Kalender buchen. Die Nutzung des Geräts darf nur im gebuchten Zeitraum erfolgen.
- (2) Messzeit kann in halben bzw. ganzen Messtagen gebucht werden.
  - Halber Messtag: 8 bis 13 Uhr oder 13 bis 18 Uhr
  - Ganzer Messtag: 8 bis 18 Uhr
- (3) Ausfall durch Wartung: Sollte das Gerät aufgrund eines Defektes oder einer Wartung nicht zur Verfügung stehen, ist keine Buchung möglich bzw. muss die Buchung durch die gerätezuständige Person storniert werden. Der Anwender wird automatisch per Email über die Stilllegung des Gerätes informiert. Bei der Stornierung von Buchungen erfolgt eine persönliche Email durch die geräteverantwortliche Person zur Information der entsprechenden Nutzer.

## 6. Nutzungsgebühren

Aufschlüsselung der Kosten: Die Kosten zum Betrieb des Geräts setzen sich wie folgt zusammen:

### 6.1. Kosten für Anschaffung und Betrieb

- Strom, Wasser
- Stelle zur technischen Betreuung
- Ersatz und Reparatur von elektrischen und mechanischen Komponenten, die nicht typischen Verschleißteilen entsprechen (z. B. Vakuumpumpen, Netzteile, Computer)
- Kosten für Softwareupdates

### 6.2. Kosten zur Durchführung des Messbetriebs und zur Sicherung der Analysenqualität

- Nutzungsbedingte Kosten für Verbrauchsmaterial und Verschleißteile (z. B. Chemikalien zur Proben-Reinigung, Wartungs- und Reparaturkosten für nutzungsbedingte Verschleißteile)
- Neuerwerb bzw. Nachkauf von zertifizierten Standards
- Stelle für projektbezogene Betreuung (z. B. grundlegende Einweisung der Nutzer, Besprechung von Messparametern)

### 6.3. Umlage

Für die Berechnung der anteiligen Betriebskosten, die auf akademische Nutzer umgelegt werden können, wurden ausschließlich die in 6.2 aufgelisteten Kosten berücksichtigt. Daraus ergeben sich folgende Nutzungspauschalen:

- Kosten halber Messtag: 50 €
  - Kosten ganzer Messtag: 75 €
- (1) Mit der Einweisung eines Nutzers muss Messzeit im Wert von 500 € erworben werden, die dann als Guthaben wahlweise in halben oder ganzen Messtagen in Anspruch genommen werden kann. Lässt eine Gruppe zwei Nutzer gleichzeitig einweisen, muss sie für 750 € Messzeit erwerben. Die so erworbene Messzeit kann auch auf andere Nutzer der Arbeitsgruppe übertragen werden.
  - (2) Nutzungsgebühren werden bei Bedarf angepasst.
  - (3) Die Abrechnung erfolgt halbjährlich.

## 7. Regelungen bei der Gerätenutzung

- (1) Der Nutzer hat das Gerät sachgerecht zu nutzen und nur die Methoden / Bedienungselemente anzuwenden, für die er eine Einweisung erhalten hat.
- (2) Die Hinweise entsprechend der Sicherheitsbelehrungen und sämtlicher arbeits- oder sicherheitsrelevanter Vorschriften sind einzuhalten. Für die ordnungsgemäße Durchführung der Untersuchungen in Übereinstimmung mit den entsprechenden Richtlinien/Bestimmungen (z. B. Gentechnik, Infektionsschutz, Strahlenschutz etc.) ist jeder Nutzer selbst verantwortlich.
- (3) Die in Abschnitt 2 festgelegte geräteverantwortliche Person ist umgehend über Defekte und Sicherheitsmängel an dem Gerät zu informieren, außerdem ist das Arbeiten am Gerät dann sofort einzustellen.
- (4) Ein- bzw. Ausschalten der Röntgenröhre: Bei Buchung eines halben Messtages am Vormittag hat der Nutzer zu kontrollieren, ob noch ein weiterer Nutzer das Gerät am selben Tag nachmittags gebucht hat. Im Fall einer weiteren Buchung ist die Röntgenröhre im eingeschalteten Zustand zu hinterlassen, ansonsten auszuschalten. Der Nutzer, welcher das Gerät für den Nachmittag gebucht hat, ist dafür zuständig, dass die Röntgenröhre am Ende des Tages ausgeschaltet wird (selbst wenn er den Messtermin nicht wahrnimmt).
- (5) Logbuch: Sämtliche Messungen sind, nach den Erläuterungen während der Geräteeinweisung, ins elektronische Logbuch einzutragen. Am Ende der gebuchten Zeit ist zusätzlich eine Eintragung in das in Papierform vorhandene Logbuch vorzunehmen.
- (6) Zum Ende des Nutzungszeitraums ist der Arbeitsplatz sauber und ordentlich zu hinterlassen.

- (7) Anweisungen der fürs Gerät zuständigen Personen sind Folge zu leisten.
- (8) Möchte ein Nutzer das Gerät nicht weiterhin nutzen, z. B. aufgrund der Beendigung des Arbeitsverhältnisses oder dem Ende eines wissenschaftlichen Projekts, ist die unter 2 genannte geräteverantwortliche Person umgehend darüber zu informieren.

## **8. Beschreibung der Datenübertragung, -weitergabe und Archivierung**

- (1) Datensicherung: Die Nutzer sind selbst für die Sicherung ihrer Daten verantwortlich. Der Hauptnutzer ist nicht zu einer Speicherung der Daten verpflichtet und somit berechtigt, die Daten nach der Anwendung zu löschen. Die Archivierung dieser Daten obliegt dem Anwender selbst. Ältere Daten dürfen bei Kapazitätsmangel ohne weitere Vorwarnung oder Datensicherung durch den in 2 genannten Geräteverantwortlichen gelöscht werden.
- (2) Die Übertragung der Daten erfolgt per USB-Stick. Verwendete Datenträger sind vor Gebrauch neu zu formatieren bzw. zu bereinigen.

## **9. Regelung zur IP und Acknowledgements**

Für die Beteiligung des IMSEAM gelten die in der Allgemeinen Nutzungsordnung festgelegten Regelungen.

## **10. Genehmigung der Nutzungsordnung**

Siehe Regularien der Allgemeinen Nutzungsordnung (Abschnitt 5).

## **11. Anpassungsfreiheit**

Siehe Regularien der allgemeinen Nutzungsordnung (Abschnitt 6).

## **12. Inkrafttreten**

Genehmigt durch das Steering Committee der ICF am 18.11.2024.

### **Kontakt ICF**

Dr. Olaf Skibbe  
Institute for Molecular Systems Engineering and Advanced Materials  
Universität Heidelberg  
Im Neuenheimer Feld 225  
D-69120 Heidelberg  
Raum 03.109  
E-Mail: [olaf.skibbe@uni-heidelberg.de](mailto:olaf.skibbe@uni-heidelberg.de)  
Tel.: +49-(0)6221-54 198 90

## **A. XRD usage with new cryo stage**

### **A.1. Introduction**

The XRD is now equipped with a cryo stage for measurements at temperatures down to 15 K. To measure X-ray diffraction at temperatures below the condensation temperature of air (77 K for nitrogen), one has to place the sample in high vacuum to prevent the formation of condensates on the sample surface.

The newly established cryo stage consists of a vacuum chamber at the sample position with suitable windows (made of Kapton) for the incoming and outgoing X-rays.

The pumping station for the high vacuum (consisting of a membrane pump and a turbo molecular pump) is located outside the XRD housing. A vacuum pipe is led inside the housing to provide the vacuum for the cryo stage.

The cryo stage vacuum chamber can be unmounted and removed from the measuring housing, so that the usual measurements are still possible. Nevertheless, assembly and disassembly take some effort and time.

### **A.2. Aim**

The aim is to set up rules which allow both, the simple access for usage with or without the cryo stage, at the fewest amount of assembly work. In detail:

- The required usage should be possible within the next two weeks.
- Assembly or disassembly should only be done if necessary.
- The scheduled operation mode should be transparent to all users.

### **A.3. Using the cryo stage**

The cryo stage can be used by users who have an introduction to its usage. If you are interested in using the cryo stage, please contact Prof. Felix Deschler.

### **A.4. Rules**

The basic/default state of the machine is the one without the cryo stage installed.

If the system should be used with the cryo stage installed, the following rules apply:

- The change to the cryo stage setup is announced in the booking calendar at least one week in advance. For this purpose, a calendar feature "cryo stage installed" will be available. This announcement is not equal to booking measurement slots, the latter has to be done as usual.
- The change to the cryo stage mode lasts one calendar week and is changed back to the default mode at the end of the week.
- If on Friday of the cryo stage week there is no booking for the following week, the cryo stage mode can be expanded for one week. This can be repeated.

Please do not book measuring slots too far ahead. The booking calendar allows to see who booked the measurement dates. In case you see a conflict of your requirements with an existing booking, feel free to contact the respective user and try to find a solution.

#### **A.5. Remarks**

To improve the usability, this set of rules can be changed or adjusted if the user's experiences indicate improvements. Therefore, please share your thoughts, suggestions or even complaints with the staff.