

Nutzerordnung der Servicestelle Röntgenbeugung der Universität des Saarlandes

Stand: 1.12.2023

Verantwortliche:

Univ.-Prof. Dr. G. Kickelbick

Dr. Bernd Morgenstern

PD Dr. Oliver Janka

Inhalt

- §1 Geltungsbereich
- §2 Nutzungsberechtigte
- §3 Wissenschaftlich und technische Verantwortliche
- §4 In der Servicestelle vorhandene Geräte
- §5 Zugangsregelung für angebotene Serviceleistungen
- §6 Pflichten bei der Nutzung von Serviceleistungen
- §7 Aufgaben, Rechte und Pflichten der für den Betrieb Verantwortlichen
- §8 Strahlenschutz
- §9 Haftung des Gerätebetreibers/Haftungsausschluss
- §10 Nutzungszeitvergabe
- §11 Kostenpauschalen
- §12 Konsequenzen bei der Nichtbeachtung der Nutzerordnung
- §13 Inkrafttreten

§1 Geltungsbereich

Die Ordnung regelt die Nutzung der Röntgengeräte in der Servicestelle Röntgenbeugung an der Universität des Saarlandes, Fachrichtung Chemie. Die Nutzungsordnung ist verbindlich für die Nutzung aller Geräte, die dieser Servicestelle zugeordnet sind.

§2 Nutzungsberechtigte

Nutzungsberechtigt sind alle Arbeitsgruppen der Universität des Saarlandes sowie Arbeitsgruppen aus den verschiedenen angegliederten Forschungsinstituten auf dem Campus.

Nicht unmittelbar nutzungsberechtigt sind externe, kommerziell ausgerichtete Institute und Institutionen. Die Nutzung kann bei den verantwortlichen Personen (siehe §3) beantragt werden.

Bei Kooperationsprojekten zwischen Arbeitsgruppen der Universität des Saarlandes oder den verschiedenen Forschungsinstituten auf dem Campus und externen, kommerziell ausgerichteten Instituten und Institutionen muss ebenfalls eine Nutzung beantragt werden.

§3 Wissenschaftlich und technisch Verantwortliche

- (1) Die Servicestelle Röntgenbeugung wird gemeinschaftlich von den Professoren der Anorganischen Chemie getragen; d.h. der Professur für Allgemeine und Anorganische Chemie, derzeit Univ.-Prof. Dr. David Scheschkewitz, der Professur Anorganische Festkörperchemie, derzeit Univ.-Prof. Dr. Guido Kickelbick und der Professur für Koordinationschemie, derzeit Univ.-Prof. Dr. Dominik Munz. Die Geräteverantwortlichkeiten für die Einkristalldiffraktometer liegt dabei bei Univ.-Prof. D. Scheschkewitz und diejenige für die Pulverdiffraktometer bei Univ.-Prof. G. Kickelbick. Als geschäftsführender professoraler Leiter der Servicestelle Röntgenbeugung agiert Univ.-Prof. Dr. Guido Kickelbick.
- (2) Technische Ansprechpartner und Gerätebetreuer der Geräte sind derzeit PD Dr. Oliver Janka (Pulverdiffraktion) und Dr. Bernd Morgenstern (Einkristallröntgenstrukturanalyse).
- (3) Als Sicherheits- und Strahlenschutzbeauftragte fungieren PD Dr. Oliver Janka und Dr. Bernd Morgenstern gemeinschaftlich. Ihnen ist in Fragen der Sicherheit und des Strahlenschutzes im Bereich der Servicestelle Folge zu leisten.

§4 In der Servicestelle vorhandene Infrastruktur

Geräteausstattung

- Einkristalldiffraktometer D8 Venture, Hersteller Fa. Bruker AXS, Erstinbetriebnahme 2019 ausgestattet mit MoK α - und CuK α -Röntgenröhre und Photon II-Detektor mit Tieftemperaturkühlung bis 100 K.
- Einkristalldiffraktometer Synergy-S, Hersteller Fa. Rigaku, Erstinbetriebnahme Januar 2024 ausgestattet mit MoK α -Röntgenröhre und HyPix-6000HE Hybrid Photon Counting (HPC) Detektor mit Tieftemperaturkühlung bis 100 K.
- Pulverdiffraktometer D8 Advance A25, Hersteller Fa. Bruker AXS, Erstinbetriebnahme 2012. Standardaufbau: CuK α -Feinfokusröhre, 280 mm Messkreisradius, variable Divergenzblende, Drehprobenträger in Reflexionsstellung, Vor- und Schneidblende zu Probenträger, Lynxeye-Detektor. Zubehör: Hochtemperaturkammer Anton-Paar HTK 1200N, Reaktionskammer Anton-Paar XRK 900, Temperierkammer Eigenbau, Kapillarprobenträger, Göbel-Spiegel.
- Pulverdiffraktometer **(1)** X'Pert Pro MPD, Hersteller Fa. PANalytical, Erstinbetriebnahme 2009. Standardaufbau: CuK α -Feinfokusröhre, variable Divergenz- und Vorblende, Drehprobenträger für Reflexionsstellung, 15-fach Autosampler, PIXel-Detektor.
- Pulverdiffraktometer **(2)** X'Pert Pro MPD, Hersteller Fa. PANalytical, Erstinbetriebnahme 2010. Standardaufbau: CuK α -Feinfokusröhre, variable Divergenz- und Vorblende, verschiedene Probenbühnen, PIXel-Detektor.

Datenbanken (auf geeigneten Auswerte-PCs zur Nutzung verfügbar)

- CSD Datenbank (3 Updates im Kalenderjahr) – enthält Molekülstrukturen
- ICSD Datenbank (1 Update im Jahr) – enthält „Festkörperstrukturen“

Software (auf geeigneten Auswerte-PCs zur Nutzung verfügbar)

- Bruker AXS Topas 5.0 – Auswertung von Pulverbeugungsdaten
- Diamond 4 – Darstellung von Strukturdaten

Datenarchivierung

- Workstation zur Archivierung der Daten.

§5 Zugangsregelung für angebotene Serviceleistungen

- (1) Zugang zu den Räumen der Servicestelle haben die Geräteverantwortlichen, die Gerätebetreuer, die Operatoren und technisches Personal. Andere Personen dürfen die Räume nur in Begleitung von einer der oben genannten Personen betreten.
- (2) An einem Gerät direkt arbeiten dürfen nur eingewiesene Benutzer (Operatoren). Die Einweisungen erfolgen durch die Gerätebetreuer. Die Erlaubnis als Operator arbeiten zu dürfen erfordert eine schriftliche Bestätigung durch den Gerätebetreuer und den Geräteverantwortlichen. Ausnahmen können die zuständigen Geräteverantwortlichen genehmigen.
- (3) Operatoren dürfen nur Proben aus der eigenen Forschung und aus der Forschung ihrer jeweiligen Arbeitskreise vermessen, soweit nicht ausdrücklich höhere Rechte schriftlich durch den geschäftsführenden Professor der Servicestelle zugestanden wurden.
- (4) Personen außerhalb der Arbeitskreise der Anorganischen Chemie können im Normalfall nur als Operatoren am Diffraktometer X'Pert (1) eingewiesen werden. Um außer Messungen auch Umbauten am Diffraktometer durchführen zu dürfen, benötigt ein Operator für die jeweilige Umbauart eine gesonderte Einweisung und Genehmigung.
- (5) Messungen, die nicht unter §5 (3) fallen, sind Servicemessungen. Servicemessungen können nur durch die Geräteverantwortlichen sowie durch eingewiesene Gerätebetreuer durchgeführt werden. Dazu muss ein Auftragsformular ausgefüllt werden, welches auf der Webseite der Servicestelle heruntergeladen werden kann. Weitere Informationen sind ebenfalls auf der Webseite zu finden. Das Antragsformular muss ausgefüllt und unterschrieben mit der Probe dem Geräteverantwortlichen / Gerätebetreuer übergeben werden.
- (6) Die Gerätebetreuer entscheiden im Fall von Ressourcen-Auslastung oder Geräte-Ausfall über eine verzögerte Annahme von Nutzungsanfragen. Angenommene Proben werden, wenn möglich, ihren Anforderungen nach aufbewahrt und gemessen, sobald freie Kapazitäten vorhanden sind. Eine ersatzweise Nutzung eines anderen Gerätes der Serviceabteilung liegt im Ermessen der Gerätebetreuer.
- (7) Die Nutzungsberechtigung kann versagt oder zurückgenommen werden, wenn:
 - kommerzielle Proben, auch über Dritte, ohne Genehmigung des Geräteverantwortlichen gemessen werden,
 - nicht gewährleistet erscheint, dass essenzielle Pflichten der Operatoren erfüllt werden,
 - bei Ressourcen-Auslastung,
 - die vorhandene, instrumentelle Ausstattung für die beabsichtigte Messung ungeeignet erscheint,
 - die Beschäftigten außergewöhnlichen Gesundheitsrisiken ausgesetzt wären,

- die Geräte durch die Proben Schaden nehmen könnten,
 - es offensichtlich ist, dass durch die beantragte Nutzung andere, berechnigte Nutzungen negativ beeinflusst werden.
- (8) Die Nutzungsberechtigung gilt ausschließlich für den Messumfang der beantragten Gerätenutzung.

§6 Pflichten bei der Nutzung der Geräte

- (1) Die in §4 genannten wissenschaftlichen Instrumente sollen zu wissenschaftlichen Zwecken und nach den Richtlinien guter wissenschaftlicher Praxis (www.dfg.de) genutzt werden. Dabei müssen auch ethische Grundsätze und gesetzliche Regularien eingehalten werden.
- (2) Die allgemeinen Sicherheitsvorschriften für das Arbeiten in Laboratorien (allgemeine, verbindliche Laborordnung) müssen eingehalten werden.
- (3) Die Nutzer/innen sind dazu verpflichtet, vorhersehbare Beeinträchtigungen des Betriebs zu unterlassen. Zudem ist nach bestem Wissen jedwede Handlung zu unterlassen, die zu Störungen bzw. Schäden an der Infrastruktur führen könnte, bzw. zu etwaigen gesundheitlichen Beeinträchtigungen anderer Nutzer oder der Mitarbeiter der Servicestelle.
- (4) Nutzungsberechtigungen können nicht an andere Institutionen übertragen werden. Alle Handlungen sind ausschließlich durch die Nutzungsberechtigten zu verantworten.
- (5) In den Räumen der Servicestelle ist keine Probenpräparation möglich. Die Proben müssen daher außerhalb der Servicestelle von den Operatoren präpariert werden.
- (6) Darüber hinaus bestehen besondere Verpflichtungen hinsichtlich:
 - Dokumentationen der Nutzung der Geräte im Betriebsbuch und der gemessenen Proben inkl. Archivierung der Auftragsformulare,
 - der Benutzung von Software, Dokumentationen und anderer Daten, die besonderen gesetzlichen Regelungen (z.B. Urheberrechtsschutz, Copyright) unterliegen,
 - der Beachtung lizenzvertraglicher Bedingungen bezüglich erworbener und benutzter Software, Dokumentationen oder Fremddaten,
 - des Kopierschutzes von Software, Dokumentationen und Daten. Diese dürfen, soweit nicht ausdrücklich erlaubt, weder kopiert, weitergegeben noch zu anderen als den erlaubten, insbesondere nicht zu gewerblichen Zwecken genutzt werden.
- (7) Ohne die Einwilligung der zuständigen Geräteverantwortlichen ist es nicht erlaubt, manuelle Eingriffe in die Hardware-Installation bzw. Konfiguration der Geräte vorzunehmen, nicht genehmigte Software zu installieren oder installierte Software zu verändern.
- (8) Stellt ein Nutzer ein ungewöhnliches Ereignis an einem der Geräte fest, dass auf eine Fehlfunktion, Geräteverschleiß, oder Gerätedefekt hinweist, so hat er unverzüglich einen

Gerätebetreuer zu informieren (Fehlermeldung) und das Ereignis im Betriebsbuch einzutragen. Dies gilt insbesondere für selbst verursachte Defekte am Gerät.

- (9) Stellt ein Nutzer fest, dass eine bestimmte Nutzung gegenüber dem bisher üblichen Vorgehen durch ein anderes Vorgehen optimiert werden kann, so ist ebenfalls ein Gerätebetreuer zu benachrichtigen (Informationsaustausch).
- (10) Eine Einweisung erfolgt jeweils gerätespezifisch. Nutzer, die keine Einweisung zur Durchführung von Standardmessungen an einem bestimmten Gerät erhalten haben, dürfen daran nicht selbstständig Messungen starten. Nutzer, die keine Einweisung zur Durchführung eines bestimmten Geräteumbaus haben, dürfen keinen Geräteumbau durchführen.

Nicht als Umbau zählen:

- Einsetzen oder Austausch eines geeigneten Rack inkl. Proben,
- Austausch der Vorblende zur Begrenzung der Strahlhöhe.

Arbeiten, die als Umbau zählen sind:

- Ein- und Ausschalten des Hochspannungsgenerators,
 - Sämtliche Justagearbeiten,
 - Veränderungen an der Röntgenoptik und -geometrie,
 - Wechseln der Probenbühne,
 - Ein- und Ausbau des Probenwechslers,
 - Einstellungen an der Kühlung (Wasserkreislauf),
 - Installation von speziellen Aufbauten (z.B. Temperierkammern, Reaktionsgase).
- (11) Im Fall von Fachpublikationen sind die Beiträge der Servicestelle den wissenschaftlichen Gepflogenheiten entsprechend zu berücksichtigen. Erfolgte Publikationen oder Patente, die auf Ergebnissen der erbrachten Serviceleistungen basieren, müssen den Verantwortlichen der Servicestelle mitgeteilt werden.
 - (12) Schäden, die durch nichtsachgerechte Nutzung der Messgeräte oder durch fehlendes Fachwissen durch Operatoren grob fahrlässig verursacht werden, werden den betreffenden Operatoren, bzw. deren Instituten in Rechnung gestellt.

§7 Aufgaben, Rechte und Pflichten der für den Betrieb Verantwortlichen

- (1) Die in §3 (2) genannten Gerätebetreuer verpflichten sich dazu, eine Dokumentation über die erteilten Nutzungsberechtigungen zu erstellen.
- (2) Die Gerätebetreuer sind berechtigt, den Verlauf von Messungen jederzeit zu kontrollieren und bei Fehlfunktion gegebenenfalls abubrechen.

- (3) Die Gerätebetreuer sind, soweit dies erforderlich ist, dazu berechtigt, Einsicht in die Dateien der Operatoren zu nehmen.
- (4) Die von den Operatoren aufgenommen Messdaten werden vertraulich behandelt.
- (5) Der Arbeitsumfang der Servicestelle im Bereich Pulverdiffraktion endet im Regelfall mit der Übergabe der gemessenen Rohdaten. Eine weitergehende Datenbearbeitung kann durchgeführt werden, ist aber in der Regel kostenpflichtig. Rohdaten bzw. weiterführende Berechnungen werden, wenn möglich in einem standardisierten Datenformat übermittelt. Im Bereich der Einkristalldiffraktion werden die Strukturdaten verfeinert und die Daten in Form eines cif-Files übergeben.

§ 8 Strahlenschutz

- (1) Die Operatoren der Servicestelle benötigen zum Beginn ihrer Tätigkeit eine Strahlenschutzunterweisung, welche einmal jährlich wiederholt werden muss. Beim Ablauf der wiederkehrenden Strahlenschutzunterweisung erlischt sofort die Nutzungserlaubnis.
- (2) Um eine Strahlenbelastung der Nutzer zu minimieren verfügt jedes der Diffraktometer über hochwirksame Einrichtungen für den Strahlenschutz. Dazu dienen Sicherheitskreise und Abschirmungen.
- (3) Der Raum innerhalb der Abschirmung eines Gerätes ist als Kontrollbereich nach der Röntgenverordnung zu betrachten. Der Raum, in dem die Geräte aufgestellt sind, ist kein Kontrollbereich und unterliegt damit nicht der individuellen Personendosimetrie.
- (4) Sollte eine individuelle Personendosimetrie gewünscht werden, so ist dies vor Beginn jeglicher Tätigkeiten beim Leiter der Servicestelle Röntgenbeugung anzuzeigen. Die entstehenden Kosten werden dem Vorgesetzten des Operators in Rechnung gestellt.
- (5) Ein Nutzer oder Operator ist nicht berechtigt Einrichtungen des Sicherheitskreises außer Funktion zu setzen oder zu überbrücken. Abweichungen hiervon bedürfen in jedem Einzelfall eine Absprache mit dem zuständigen Strahlenschutzbeauftragten.
- (6) Für Umbauten am Diffraktometer ist es auch nicht zulässig, dass eine Person sich vollständig innerhalb des Strahlenschutzgehäuses befindet oder bewegt, solange der Generator eingeschaltet ist.

§9 Haftung des Gerätebetreibers/Haftungsausschluss

- (1) Die Universität des Saarlandes und ihre Geräteverantwortlichen und -betreuer übernehmen keine Garantie bzw. Haftung dafür, dass:
 - a) spezifische Messvorgaben durch die vorhandenen Geräte und deren Konfiguration erfüllt werden können,
 - b) notwendige Ressourcen jederzeit, störungsfrei, fehlerfrei und ohne Unterbrechung zur Verfügung gestellt werden können,
 - c) eine fehlerfreie und dauerhafte Datensicherung durchgeführt werden kann.

- (2) Die Universität des Saarlandes und ihre Geräteverantwortlichen und -betreuer übernehmen keine Verantwortung für die Fehlerfreiheit der zur Verfügung gestellten Software. Sie haften auch nicht für die Vollständigkeit und Qualität der Messdaten.
- (3) Die Universität des Saarlandes und ihre Geräteverantwortlichen und -betreuer haften nicht für Schäden gleich welcher Art, die den Nutzer/innen aus der Inanspruchnahme der genannten Serviceleistungen entstehen sowie auch insbesondere nicht für Schäden jedweder Art, die durch eigenverantwortlich getätigte Aufarbeitungen und Messungen entstanden sind.

§ 10 Kostenpauschalen

Für die Kosten der in Anspruch genommenen Leistungen der Servicestelle Röntgenanalyse werden für Arbeitsgruppen der Universität des Saarlandes mit ihren Forschungsprojekten im Wesentlichen die reinen Betriebskosten inklusive eines Anteiles für Gerätewartung und Geräte-Update sowie für Verschleißmaterial veranschlagt.

Kosten bei Servicebetrieb an den Einkristalldiffraktometern

- a) Die Aufnahme der Datensätze erfolgt üblicherweise im Servicebetrieb. Das heißt, die vom Nutzer zur Messung bereitgestellten Kristalle werden mit einem ausgefüllten Auftragsformular bei der Servicestelle abgegeben. Die Auswahl eines geeigneten Kristalls, die Montage und Justage auf dem Diffraktometer sowie die Datensammlung erfolgt durch Mitarbeiter der Servicestelle.
- b) Die Proben werden möglichst nach der Reihenfolge der Abgabe in der Servicestelle abgearbeitet. Über den konkreten Ablauf entscheiden die Gerätebetreuer der Einkristalldiffraktometer.
- c) Die Strukturbestimmung von Biomolekülen (Proteinkristallographie) ist nicht möglich.
- d) Die Daten werden, soweit möglich, in geeigneter Form aufbereitet und dem Nutzer in Form einer cif-Datei (Crystallographic Information File) zur Verfügung gestellt.
- e) Die Servicestelle bietet einen Zugang zur Strukturdatenbank „Cambridge Structural Database“ (CSD) und hält Arbeitsplätze mit Softwareprogrammen zur Visualisierung und Bearbeitung von Molekülstrukturen bereit.
- f) Sollte eine ungeeigneten Probe (z. B. vermeintliche Kristalle streuen nicht), eine bereits bekannte Verbindung bzw. ein Nebenprodukt (es wurde zum Beispiel ein Salz statt der Zielverbindung auskristallisiert) abgegeben worden sein oder aus anderen Gründen keine Strukturlösung möglich sein (unlösbares Verzwillingung o. ä.), so wird trotzdem der Betrag für die Datensammlung fällig.

- g) Die Gebühren für die Messungen am D8 Venture und X8 Apex II im Servicebetrieb belaufen sich derzeit auf:

Nutzerkategorie	nur Datensammlung	voller Service
Fachrichtung Chemie	40 €	80 €
UdS	60 €	120 €
Angegliederte Forschungsinstitute	100 €	200 €
Externe Institutionen	Abrechnung nach Trennungsrechnung	

Kosten bei Nutzung oder Servicebetrieb an den Pulverdiffraktometern

- a) Die in der nachfolgenden Tabelle angegebenen Gebühren gelten für Standardproben, also Probenpulver in ausreichender Menge für die Stahlprobenträger mit eingefräster Vertiefung oder für kleine, plane polykristalline Werkstücke oder kleine, beschichtete Glasplatten o.Ä.
- b) Für Sonderproben erhöhen sich die Gebühren, z.B. bei Verwendung von Glaskapillaren, Domprobenträger (für Luft- bzw. feuchtigkeitsempfindliche Proben), einer Heizkammer.
- c) Die Proben werden zusammen mit dem Auftragsformular beim Gerätebetreuer abgegeben. Erfolgt die Präparation des Materials oder die Auswertung durch den Gerätebetreuer oder einer Person in dessen Auftrag, so wird dies zusätzlich berechnet. Die Präparation kann im Normalfall nicht im Diffraktometerraum erfolgen, sondern ist vorab in einem chemischen Labor durchzuführen.
- d) Die Messzeiten werden über einen digitalen Kalender verwaltet, zu dem alle Operatoren Zugang haben. Die Messzeiten werden auch dann berechnet, wenn diese nicht genutzt werden. Reservierte Zeiten können bis 24 Stunden vor Beginn der Messung durch Anfrage beim zuständigen Gerätebetreuer storniert werden, danach wird die verbuchte Messzeit entsprechend berechnet. Wird erkannt, dass Messungen von Operatoren durchgeführt wurden, ohne dass ein Eintrag in den Kalender erfolgt ist, so werden doppelte Gebühren berechnet. Im Wiederholungsfall kann ein Entzug des Status Operator erfolgen.
- e) Die Gebühren für die Messungen am D8 im Servicebetrieb belaufen sich derzeit auf:

Kategorie	nur Datensammlung	zusätzlich Präparation	zusätzlich Auswertung
Fachrichtung Chemie	5 €/h Messzeit	+10 €/Probe	nach Aufwand
UdS	7 €/h Messzeit	+10 €/Probe	nach Aufwand
Angegliederte Forschungsinstitute	10 €/h Messzeit	+10 €/Probe	nach Aufwand
Externe Institutionen	Abrechnung nach Trennungsrechnung		

f) Die Gebühren für die Auswertung der Daten werden wie folgt erhoben:

Kategorie	Qualitative Phasenanalyse	Quantitative Phasenanalyse	Strukturverfeinerung
Fachrichtung Chemie	10 €/h Auswertezeit	15 €/h	25 €/h
UdS	13 €/h Auswertezeit	18 €/h	28 €/h
Angegliederte Forschungsinstitute	15 €/h Auswertezeit	20 €/h	30 €/h
Externe Institutionen	Abrechnung nach Trennungsrechnung		

Werden Kosten für bspw. die Strukturverfeinerung erhoben, so sind bei dieser Auswertung ebenfalls eine qualitative und quantitative Phasenanalyse enthalten.

§ 11 Publikation der erhobenen Daten

Einkristalldiffraktometer

Aufgrund des Arbeitsaufwands und dem damit verbundenen Beitrag (Auswahl und Aufsetzen des Einkristalls, Bestimmung der Kristallqualität, Bestimmung der Messstrategie und Durchführung selbiger, Datenauswertung, lösen und verfeinern der Kristallstruktur, Aufbereitung der Daten zur Publikation, Erstellung von Strukturbildern, Tabellen und ggf. Deponierung des CIF) zu einer wissenschaftlichen Publikation, ist der Mitarbeiter der Servicestelle der die Strukturuntersuchung durchgeführt hat als Co-Autor auf der entsprechenden Arbeit aufzuführen. Er stellt den entsprechenden Experimentalteil und Tabellen zur Messstrategie zu Verfügung. Weiterführende Strukturdiskussionen sind nicht Bestandteil seines wissenschaftlichen Beitrags. Ihm ist die Publikation vor dem Einreichen der Arbeit vorzulegen.

Pulverdiffraktometer

Messungen an den Pulverdiffraktometern werden in der Regel als reine Serviceleistung durchgeführt. Sollte keine weitere Auswertung der Daten gewünscht worden sein, so ist die Servicestelle Röntgenanalyse sowie der entsprechende Gerätebetreuer im „Acknowledgement“ der Arbeit aufzuführen. Wurden die Proben durch einen eigenständig messbefugten Operator vermessen, so muss lediglich die Durchführung der Messungen in der Servicestelle vermerkt werden. Entsprechende Textbausteine finden sich auf der Webseite der Servicestelle.

Sollte eine weiterführende Auswertung der Messdaten gewünscht worden sein ist aufgrund des Arbeitsaufwands und dem damit verbundenen wissenschaftlichen Beitrag (Phasenanalyse, Strukturverfeinerung aus Pulverdaten, Aufbereitung der Daten zur Publikation, Erstellung von Tabellen und Abbildungen) der Mitarbeiter der Servicestelle als Co-Autor auf der entsprechenden Arbeit

aufzuführen. Er stellt den entsprechenden Experimentalteil sowie die zur Publikation notwendigen Daten zu Verfügung. Ihm ist die Publikation vor dem Einreichen der Arbeit vorzulegen.

Publikationen, in denen die Servicestelle Röntgenanalyse erwähnt wird, sollten dem entsprechenden Gerätebetreuer nach deren Annahme zur Verfügung gestellt werden, um die Nutzung der Servicestelle zu dokumentieren.

§ 12 Datenverarbeitung, -weitergabe und Archivierung

Einkristalldiffraktometer

Im Falle von Einkristalluntersuchungen wird die Datenverarbeitung vom Operator durchgeführt:

- Datenauswertung
- Lösen und verfeinern der Kristallstruktur
- Aufbereitung der Daten zur Publikation, Erstellung von Strukturbildern, Tabellen und ggf. Deponierung des CIF

Im Anschluss werden die Daten an den Auftraggeber der Messung übergeben. Eine Archivierung erfolgt gemäß den in der Servicestelle üblichen Mechanismen.

Pulverdiffraktometer

Sollte keine weitere Auswertung der Daten gewünscht worden sein, so werden die Rohdaten ohne Aufarbeitung an den Auftraggeber übergeben.

Sollte eine weiterführende Auswertung der Messdaten gewünscht worden sein, werden die Rohdaten mit entsprechender Auswertung, grafischer Darstellung und Tabellen (nach Absprache) an den Auftraggeber übergeben.

Eine Archivierung erfolgt gemäß den in der Servicestelle üblichen Mechanismen.

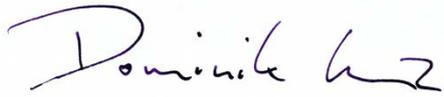
§ 13 Konsequenzen bei Nichtbeachtung der Nutzerordnung

Eine Missachtung der Regelungen kann zum Ausschluss von der Nutzung der Dienste führen.

§ 14 Inkrafttreten

Die Nutzerordnung der Servicestelle der Universität des Saarlandes tritt am Tage nach ihrer Bekanntmachung in der jeweils aktuellen Version in Kraft.

Saarbrücken, am 01. Dezember 2023



Univ.-Prof. Dr. Dominik Munz



Univ.-Prof. Dr. Guido Kickelbick



Univ.-Prof. Dr. David Scheschkewitz

Liste Gerätebetreuer und Operatoren (Stand Dezember 2023)

Liste der zur Einweisung berechnigte Personen (Gerätebetreuer)

Name	Arbeits- gruppe	Synergy-S	D8 Venture	D8	X'Pert (1)	X'Pert (2)
Janka, PD Dr. O.	Kickelbick			X	X	X
Morgenstern, Dr. B.	Kickelbick	X	X			

Liste der zur Messung an Standardproben berechnigten Personen (Operatoren)

Name	Arbeits- gruppe	Synergy-S	D8 Venture	D8	X'Pert (1)	X'Pert (2)
Engel, S.	Kickelbick			X		
Gießelmann, E.	Kickelbick			X		
Haberkorn, Dr. R.	Kickelbick			X	X	
Janka, PD Dr. O.	Kickelbick		X	X	X	X
Michaely, A.	Kickelbick			X	X	X
Morgenstern, Dr. B.	Kickelbick	X	X			
Schmauch, J.	Pelster				X	
Stemmler, M.	Busch				X	
Straub, T.	Kickelbick			X	X	