

**ANTRAG AUF FÖRDERUNG AUS DEM ZENTRALEN QUALITÄTSSICHERUNGSFONDS
DER UNIVERSITÄT HEIDELBERG**

I. Antragsteller

Name, Vorname: Klingeler, Rüdiger	akadem. Grad: Prof. Dr.
Geburtsdatum: 16.01.1969	Fakultät: Physik und Astronomie
Institut: Kirchhoff-Institut für Physik	
Telefon: 54-9199	Telefax: 54-9869
E-mail: klingeler@kip.uni-heidelberg.de	
Name, Vorname: Lattard, Dominique	akadem. Grad: Prof. Dr.
Geburtsdatum:	Fakultät: Chemie und Geowissenschaften
Institut: Institut für Geowissenschaften	
Telefon: 54-4810	Telefax: 54-4805
E-mail: Dominique.Lattard@geow.uni-heidelberg.de	

II. Angestrebtes Projekt / geplante Maßnahme

Hochauflösendes Laue-Diffraktometer zur Untersuchung von Einkristallen

III. Förderdauer: Einmalig

IV. Antragssumme pro Semester: 32.466,- € (im WS 2013/14)

V. Beabsichtigte Verwendung: Sachmittel

VI. Erklärung der Antragsteller

Wir bitten darum, die beantragten Mittel zur Verbesserung von Studium und Lehre wie in der Beschreibung dargestellt einzusetzen.



Prof. Dr. R. Klingeler
Experimentalphysik
Kirchhoff-Institut f. Physik



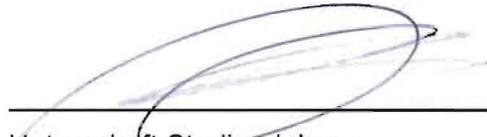
Prof. Dr. D. Lattard
Experimentelle Mineralogie
Inst. f. Geowissenschaften

VI. Erklärung der Studiendekane und/oder der Leiter der Einrichtungen

Als Studiendekan der unter I. genannten Fakultäten befürworte ich diesen Antrag und erkläre gleichzeitig, dass die hier beantragte Finanzierung aus dezentralen Qualitätssicherungsmitteln nicht erbracht werden kann.

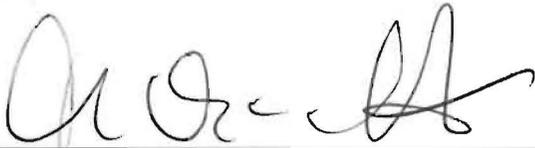


Unterschrift Studiendekan



Unterschrift Studiendekan

Als Leiter der unter I. genannten Einrichtung befürworte ich diesen Antrag und erkläre gleichzeitig, dass die hier beantragte Finanzierung nicht aus Institutsmitteln erbracht werden kann.



Unterschrift Leiter Institut für Geowissenschaften



Unterschrift Leiter Kirchhoff-Institut für Physik

1. Titel des Vorhabens: Hochauflösendes, schnelles Laue-Diffraktometer für die praktische Grundausbildung in den Geowissenschaften und der Physik

2. Zusammenfassung

Durch die Aufrüstung einer zurzeit nicht nutzbaren Röntgenanlage mit einem hochauflösenden Detektorsystem wird ein modernes Laue-Diffraktometer die praktische Grundausbildung in den Studiengängen Geowissenschaften und Physik realisiert. Die Laue-Diffraktometrie ist eine grundlegende experimentelle Methode, die in den Curricula beider Studiengänge fest verankert ist. Zurzeit wird diese für sehr viele strukturbestimmende Röntgenverfahren grundlegende Methode in der Lehre jedoch nur theoretisch besprochen, da bislang an der Universität Heidelberg trotz der hohen Bedeutung für die Ausbildung der Studierenden kein Laue-Diffraktometer existiert. Daher verbessert die Beschaffung eines Laue-Diffraktometers die Qualität der Ausbildung in beiden Studiengängen jenseits der Grundsicherung der Lehre. Das neue Gerät wird in den experimentellen Übungen, Praktika und Fortgeschrittenenpraktika sofort eingesetzt, da das Lehrpersonal zur Verfügung steht und das Gerät kann sofort in die vorhandenen Lehrpläne und -veranstaltungen eingebunden werden kann. Darüber hinaus ist das neue Laue-Diffraktometer ein ideales Gerät zur forschungsnahen Ausbildung der Studierenden im Rahmen von Projektpraktika, Projektarbeiten, Bachelor- und Masterarbeiten. Der gemeinsame Aufbau und die gemeinsame Nutzung des Laue-Diffraktometers dokumentieren die inhaltliche Nähe der beiden Studiengänge durch gemeinsame Lehrveranstaltungen und stärken somit die interdisziplinäre Ausbildung und den Kontakt der Studierenden über die Fakultäts- und Fächergrenzen hinweg. Auch Studierenden der Chemie stehen das Gerät bzw. die o.g. Kurse für die praktische Ausbildung zur Verfügung.

3. Ziele und Entwicklungsstrategie

Ziel der Maßnahme ist die Bereitstellung eines hochauflösenden, schnellen Laue-Diffraktometers für die Ausbildung von Studierenden der Geowissenschaften und der Physik. Hierzu soll eine vorhandene ältere und ohne Detektor nicht nutzbare Röntgenapparatur mit einem hochauflösenden, schnellen Detektorsystem für Röntgenstrahlung ausgerüstet werden. Die neue Anlage schließt eine an der Universität Heidelberg existierende Lücke in der praktischen Ausbildung der Studierenden in den beteiligten Studiengängen.

Der Aufbau einer Laue-Kamera erfordert die Beschaffung eines modernen, schnellen Detektorsystems inklusive Auswertesoftware, das zusammen mit den vorhandenen Bauteilen (Generator, Röntgenröhre, Sicherheitsschrank) ein einsatzfähiges modernes System ergibt. Konkret werden mit der beantragten Maßnahme zwei Ziele erreicht:

- Die **Verbesserung der Grundausbildung in den Studiengängen Geowissenschaften und Physik.** Die Laue-Diffraktometrie ist in den Curricula als wichtige Methode verankert und das Gerät kann daher sofort in der Grundausbildung eingesetzt werden. Das Laue-Diffraktometer wird in der Röntgengrundausbildung im B.Sc.-Studiengang Geowissenschaften (3 Kurse), in der Röntgenausbildung im M.Sc.-Studiengang (Pflichtveranstaltungen im Schwerpunkt Geochemie und Geomaterialien, 1 Kurs), sowie in den geowissenschaftlichen Synthesepraktika im B.Sc. und M.Sc.-Studiengang eingesetzt. Die o.g. Kursveranstaltungen werden auch von Studierenden anderer Fächer besucht. Zusätzlich wird ein neuer Versuch im Fortgeschrittenen-Praktikum in der B.Sc.-Ausbildung Physik eingerichtet. Die Wichtigkeit neuer FP-Versuche für eine kurze Studiendauer wird dadurch verdeutlicht, dass in der Physik ca. 30% der Studierenden die B.Sc. Ausbildung nicht wie vorgesehen mit der Bachelorarbeit, sondern aufgrund der immer längeren Wartezeiten im FP erst später mit einem FP-Versuch abschließen. Die hohe Geschwindigkeit der modernen Röntgendetektoren ermöglicht dabei eine wesentlich effizientere Lehre, da lange Belichtungszeiten entfallen.
- Die **Verbesserung der forschungsorientierten Ausbildung:** Das Laue-Diffraktometer ist ideal geeignet, um im Rahmen von Projektpraktika, Bachelor- und Masterarbeiten durch Studierende eingesetzt zu werden. Gerade im Bereich der Projektpraktika und der Bachelorarbei-

ten existiert bereits jetzt ein Bedarf an zusätzlichen qualifizierten Themen, der in den kommenden Jahren absehbar ansteigen wird. Die Laue-Methode ist bereits Teil des theoretischen Curriculums in beiden Studiengängen. Das beantragte Laue-Diffraktometer ist daher ein ideales Gerät zur forschungsnahen Ausbildung der Studierenden.

Geplante Nutzung und Auslastung: Durch die gemeinsame Nutzung ist zu erwarten, dass das neue Gerät eines der am stärksten ausgelasteten studentischen Experimente an der Universität Heidelberg werden wird. Uns ist kein Experiment in der Ausbildung der Studierenden mit einer ähnlich hohen Auslastung bekannt. Die konkrete Planung verteilt sich gleichmäßig auf beide beteiligte Fakultäten und lautet wie folgt:

- Praktische Versuche zur Lehre in den Geowissenschaften (Röntgenkurse I-III, exp. Mineralogie im B.Sc. und M.Sc., Labormethoden): ca. 40 Versuchstage pro Jahr (+ 5 Tage Vorbereitung).
- Fortgeschrittenenpraktikum Physik: Es gibt ca. 250-300 Physik-BSc-Studierende pro Jahrgang, die 8 Versuche (3-4 Tage je Versuch) i.d.R. in Zweiergruppen durchführen. Wir planen 10 Termine je Semester, d.h. 80 Versuchstage pro Jahr (+ ca. 14 Tage Vorbereitung, Kalibration).
- 2 BSc-Projektpraktika je Semester (40 Versuchstage pro Jahr, das entspricht 6 Credit Points pro Studierendem/r) (Geowissenschaften+Physik).
- 2 Bachelorarbeiten pro Jahr (ca. 60 Versuchstage pro Jahr) (Geowissenschaften+Physik).
- Zugang durch B.Sc.- und M.Sc.-Studierende der Geowissenschaften, Physik und Chemie für Einzelexperimente (ca. 15 Versuchstage pro Jahr).
- Wartung der Anlage, TÜV, etc.: ca. 20 Tage pro Jahr.

Dies würde eine Auslastung der neuen Anlage für Lehraktivitäten von ca. 260 Tagen ergeben, d.h. die Anlage wird zu 100% ausgelastet sein. Die Kurse werden in der Vorlesungszeit oft parallel stattfinden und sich evtl. überschneiden. Dies könnte jedoch durch entsprechende Reduktionen oder termingerechte Planung der Projektpraktika etc. oder den FP-Versuchen geregelt werden.

4. Beschreibung der Situation / Ist-Stand

Das Laue-Verfahren ist ein fundamentales Verfahren zur Untersuchung von kristallinen Materialien. Es ist unverzichtbar zum Orientieren von Einkristallen in Forschung und Industrie, aber auch ein ideales Werkzeug, um im Labormaßstab neue Materialien, Werkstoffe und Mineralien hinsichtlich ihrer Perfektion, Eindomänigkeit und kristallinen Güte zu charakterisieren. Zudem nimmt das Prinzip der Laue-Diffraktometrie in den Curricula der Fächer Geowissenschaften und Physik eine wichtige Rolle ein. Sie stellt nicht nur an sich eine sehr wichtige experimentelle Methode dar, sondern anhand der Laue-Röntgenbeugung wird auch das extrem wichtige Konzept des reziproken Gitters eingeführt. Es ist das wichtigste Experiment zum Verständnis der Grundlagen *aller* Beugungsverfahren. Es bildet die zudem Grundlage moderner Verfahren zur Gefügeuntersuchung wie z.B. EBSD (Rückstreuungselektronenbeugung). Trotz der hohen Bedeutung der Laue-Diffraktometrie für Studium und Lehre existiert an der Universität Heidelberg kein Laue-Diffraktometer.

Die Aufrüstung einer existierenden, seit einiger Zeit aber nicht mehr nutzbaren Röntgenanlage¹ vervollständigt die praktische Ausbildung der Studierenden in idealer Weise und verbindet diese gleichzeitig mit einem wichtigen Baustein für eine moderne, konkurrenzfähige und interdisziplinär genutzte Lehr-Infrastruktur der beteiligten Fachbereiche. Durch den gemeinsamen Aufbau und die gemeinsame Nutzung des Laue-Diffraktometers werden zudem sowohl gemeinsame interdisziplinäre Lehrveranstaltungen über die Fakultäts- und Fächergrenzen hinweg gestärkt bzw. realisiert. Das neue Verfahren wird dabei sofort in die Lehrkonzepte eingebunden. Insgesamt würde durch die beantragten Mittel die Qualität der Lehre an der Universität Heidelberg durch die Verbesserung der praktischen Ausbildung sichtbar erhöht.

¹ Die Anlage war kann ohne Detektor nicht verwendet werden, ist aber technisch umrüstbar. Vergleichbare Generatoren sind in den letzten Jahren z.B. an der TU München, RU Bochum, U Köln usw. zu Laue-Anlagen umgerüstet worden.

5. Arbeitsprogramm zur Zielerreichung

Die Aufrüstung der vorhandenen Röntgenanlage erfolgt durch ein Detektorsystem, welches digitale Datenaufnahme in Laue-Rückstreugeometrie erlaubt. Der Detektor basiert auf einem modernen CCD-Kamerasystem, mit dem entweder Echtzeitaufnahmen mit reduzierter Auflösung oder hochauflösende Aufnahmen bei längerer Belichtungszeit möglich sind. Zur Orientierung der Proben dienen manuelle Goniometer sowie eine Auswertesoftware. Die Umbauarbeiten werden aus Kostengründen durch die beteiligten Institute selbst durchgeführt.

6. Zeit- und Finanzplanung

6.1 Zeitplanung

Der Detektor kann unmittelbar beschafft und das vorhandene Diffraktometer in einem Zeitraum von ca. 8 Wochen aufgerüstet werden. Die weiteren Umbaumaßnahmen werden mit etwa 4 Wochen veranschlagt, so dass nach TÜV-Abnahme das Gerät ca. 4 Monate nach Bewilligung für den Lehr- und Übungsbetrieb zur Verfügung stehen wird. Die beteiligten Institute werden bei der Aufrüstung eng zusammenarbeiten, wobei federführend Dr. Burchard (Geowissenschaften) und Dr. Reygers (FP-Leiter Physik) die Arbeiten leiten werden. Gleichzeitig steht Lehrpersonal für die Anleitung der Studierenden zur Verfügung, so dass sofort die Einbindung in den Lehrbetrieb erfolgen wird.

6.2 Finanzplanung

Ein Angebot der Fa. Photonic Science liegt bei. Die Kosten für die Realisierung des Laue-Diffraktometers sind im Vergleich niedrig und dadurch begründet, dass existierende Röntgenanlagen der Geowissenschaften bzw. Physik zusammengebracht und aufgerüstet werden, so dass (auch mit praktischer Unterstützung durch die Chemie, s. Tabelle) die Kosten für ein Komplettsystem (ca. 93.000,- €) mehr als halbiert werden können. Dabei werden die Umbauarbeiten durch die beteiligten Institute selbst durchgeführt und finanziert. Es ist zu betonen, dass dem Detektor die entscheidende Bedeutung für die Auflösung zukommt, so dass trotz der Kostenersparnis ein modernes und hochauflösendes Diffraktometer für Studium und Lehre zur Verfügung stehen wird.

Gesamtprojekt	ca. 93.000,-	
Detektorsystem	32.466,-	Antragssumme
QuaSiMi SS 2013	8125,-	Bewilligungssumme im SS2013
Generator mit Röntgenröhre	ca. 27000,-	Eigenbeitrag Geowissenschaften/Physik
Sicherheitsschrank	ca. 18000,-	Eigenbeitrag Geowissenschaften/Physik
Umbauarbeiten	ca. 2500,-	Eigenbeitrag Geowissenschaften/Physik
TÜV Abnahme	ca. 1000,-	Eigenbeitrag Geowissenschaften/Physik
Goniometeraufsätze	ca. 4000,-	Beitrag Chemie

Der Betrieb des Laue-Diffraktometers wird geringe Folgekosten verursachen, deren Höhe sich nach dem Nutzungsgrad richtet und welche anteilig durch die Nutzer übernommen werden. Dieses Prinzip hat sich bei der gemeinsamen Nutzung von Infrastruktur als sehr tragfähig erwiesen.

Das Laue-Diffraktometer wird in der Lehre für die Geowissenschaften eingesetzt werden und stärkt damit die Lehr- und Forschungs-Infrastruktur eines kleinen Faches. Da es fakultätsübergreifend beantragt und eingesetzt werden wird, ist eine dezentrale Finanzierung nicht möglich. Die QuaSiMi der Geowissenschaften werden schon in erheblicher Höhe zur Teilfinanzierung eines neuen Röntgen-Pulverdiffraktometers eingesetzt, in der Physik wird das Astronomiepraktikum modernisiert. Daher bitten wir um eine Finanzierung der Aufrüstung aus zentralen Qualitätssicherungsmitteln. Die o.g. Umbauarbeiten werden wir aus eigenen Mitteln finanzieren.

Anlagen: - Angebot Proposal N°: 21/10/13/1205/DB/Fr_rev2
- Abbildungen vorhandener Apparaturen

Photonic Science

Millham, Mountfield, Robertsbridge, E.Sussex, TN32 5LA
Email: daniel@photonic-science.com

Tel.: +44 (0)1580 881199 Fax: +44 (0)1580 880910
Web site: www.photonic-science.co.uk

LAUE PROPOSAL

Photonic Science Proposal N°: 21/10/13/1205/DB/Fr_rev2

14 November 2013

To the attention of Prof. Dr. Rüdiger Klingeler
Kirchhoff Institute for Physics

1. Photonic Science CCD Laue X-ray Imaging camera

- Active input area of approx. 155 (h) x 105 (v) mm (approx.) imaged on the sensor
- Minimum input pixel size of 83 μ square, 1867 x 1265 pixels
- Pre collimation with mechanical adaptor to existing X-ray shutter
- Post collimation with 0.7-1.0-1.4mm
- Positioning feet on the work stand
- Selectable exposure from 1ms to minutes
- On chip pixel addition allowing increased sensitivity at the expense of resolution
- Automatic background subtraction mode
- 16-bit high precision acquisition mode
- 12-bit fast preview mode

2. Manual goniometer assembly (1002 + 408)

- Manual goniometer head: 64mm height, 2 axis of rotation Rx / Ry: +/- 20 / +/- 17 degrees amplitude and 0.1 degree accuracy respectively, X/Y displacement: +/- 5mm, Z displacement: 2.5mm (for crystals max. 30 x 30 mm), incl. 2 crystal holders, adjustment point, and adjustment spanner.
- 360 degree rotation base: 80mm diameter with goniometer head support and hand knob: 0.002 degree accuracy.
- Pre alignment of the source / Laue detector / goniometer onto a rail / breadboard

3. Acquisition / Laue image processing & orientation

Crystal orientation software

- Imports BMP / JPEG format, allows crystal orientation down to 0.2 degree accuracy from known crystal structures and sample distance, and 0.02 degree accuracy using L alpha W lines

PSL pre configured data acquisition system with PSL software for Windows 7 64-bit OS giving end user control of:

- Exposure from 1ms to minutes
- On-chip pixel addition from 1 x 1 to 8 x 8 for the CCD read out User selectable automatic background subtraction mode.
- 16-bit acquisition mode with user selectable noise quality level Fast 12-bit readout mode allowing live exposure with pixel addition mode for quick alignment.
- Intel® I5® 2400 Processor (3.1GHz, 1333MHz, 6MB cache)
- 20inch monitor
- 4096MB 1333MHz Dual Channel DDR2 SDRAM
- 500GB (7200rpm) Serial ATA3 Hard Drive
- 16x DVD +/- RW Drive
- Gigabyte Ethernet interface, 4.5 meters cable

COMMERCIAL IN CONFIDENCE

Photonic Science

Millham, Mountfield, Robertsbridge, E.Sussex, TN32 5LA
Email: daniel@photonic-science.com

Tel.: +44 (0)1580 881199 Fax: +44 (0)1580 880910
Web site: www.photonic-science.co.uk

LAUE PROPOSAL

Photonic Science Proposal N°: 21/10/13/1205/DB/Fr_rev2

14 November 2013

To the attention of Prof. Dr. Rüdiger Klingeler
Kirchhoff Institute for Physics
Im Neuenheimer Feld 227, D-69120 Heidelberg

4. **System pre configuration / packing & shipping**
5. **Onsite installation and training**
 - 1 and ½ day onsite installation, ½ day training.

TOTAL Price for items 1 to 5: for Kirchoff Institute : 34,110.00 EUR

Sales conditions

Validity: Valid 3 months
Delivery: Typical current lead time 6 - 8 weeks ARO.
Price: **Includes shipping and transportation cost, onsite installation and training, excludes VAT.**
Payment Terms: 30 days
Documentation: electronic copy for the hardware and software installation and operation, pre installation.
Warranty: 12 months parts and labour from date of delivery.

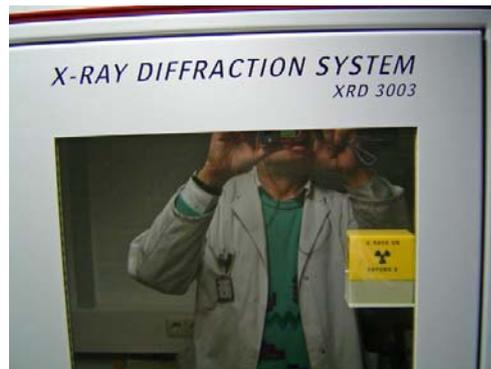
Daniel BRAU

Authorised By _____
Daniel BRAU – Sales & Marketing Director,
On behalf of Photonic Science Ltd

Anlage 2: Abbildungen bereitgestellter Apparaturen für das neue Experiment



Vorhandener Generator Siemens KRISTALLOFLEX 710 (links) und Cu-Röntgenröhre (rechts), die zu einem Laue-Diffraktometer aufgerüstet werden sollen. Ohne Detektor sind die Geräte nicht nutzbar.



Röntgenschrank XRD 3003A der Fa. Seifert (neuwertig).



Vorhandene Goniometerköpfe zur Verwendung durch die Studierenden (Beitrag durch Chemie).