

XRD AI Measurement

XRD AI based Measurement

Programm / Ausschreibung	FinVn 22/23, IWI, Basisprogramm Ausschreibung 2022	Status	laufend
Projektstart	01.01.2023	Projektende	30.06.2024
Zeitraum	2023 - 2024	Projektlaufzeit	18 Monate
Keywords			

Projektbeschreibung

Ziel des Projektes ist die Entwicklung einer Software, welche KI-gesteuerte, autonome Röntgenmessungen und die quantitative Phasenanalyse kristalliner Festkörper durchführt. Die Röntgendiffraktion (X-ray diffraction, XRD; Als-Nielsen, 2011, Greismann, 2021) ist eine weit verbreitete Technik zur Aufklärung der atomaren Anordnung in Kristallen. XRD wird z.B. zur Bestimmung von Material-gemischen im Bergbau, zur Strukturaufklärung pharmazeutischer Wirkstoffe in der Medizin oder in der Materialforschung eingesetzt (Bernstein, 2020). Bei XRD wird mit einem Diffraktometer. Probe und Detektor gleichzeitig gedreht und bestimmt unter welchen Winkeln die oft pulverförmige Probe den einfallenden Röntgenstrahl stark reflektiert. Aus diesen sogenannten Bragg-Reflektionen kann auf die Anordnung der Atome im Kristall rückgeschlossen werden (Als-Nielsen, 2011). Durch die KI soll nun eine Echtzeit-Auswertung der Kristallstruktur(en) von partiellen XRD-Messungen durchführt werden, aber vor allem der Messprozess direkt live gesteuert und optimiert werden. Optimalität der Messung zusammen mit physikbasierten Modellen in der KI, durch die auch Vorwissen in die Messung einfließt, werden eine 10-fach schnellere KI-gesteuerte ‚smart-scan‘ Messung erlauben im Vergleich zu manuellen oder äquidistanten Scans. Durch die Software wird weiterhin Fachwissen durch die KI ersetzen beim Durchführen und Auswerten von XRD-Messungen. Damit wird XRD leichter einsetzbar, was die Technik einem noch weiteren Nutzer:innenkreis z.B. in der Umweltanalytik, Materialforschung oder in der Industrie eröffnet. Durch den Geschwindigkeitszuwachs der Messungen ergeben sich weiterhin Vorteile durch höheren Probendurchsatz für in-line Messungen z.B. der Wafer-Qualitätskontrolle in der Halbleiterindustrie oder der Qualitätssicherung von Rohmaterialien wie z.B. Asbest-Kontamination. Weiterhin wird durch die signifikant höhere Geräteauslastung eine Kostenreduktion pro Messung möglich.

Projektkoordinator

- goodguys gmbh

Projektpartner

- Universität Graz Institut für Chemie