

## XRD AI Measurement

XRD AI based Measurement

<b>Programm / Ausschreibung</b>	IWI 24/26, IWI 24/26, Basisprogramm Ausschreibung 2024	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.07.2024	<b>Projektende</b>	30.09.2025
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2025	<b>Projektlaufzeit</b>	15 Monate
<b>Keywords</b>			

### 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.

### Endberichtkurzfassung

Im Projekt XRD AI Measurement wurde eine neuartige, KI-gestützte Methode zur autonomen Steuerung von Pulver-Röntgendiffraktionsmessungen (XRD) entwickelt und unter realen Messbedingungen experimentell validiert. Dabei kommen selbstlernende Algorithmen zum Einsatz, die Messdaten während der laufenden Datenerfassung analysieren und die Messstrategie adaptiv optimieren. XRD ist eine zentrale Analysetechnik zur Untersuchung atomarer Strukturen und wird unter anderem zur Detektion von Verunreinigungen in Materialproben sowie zur Charakterisierung kristalliner pharmazeutischer Wirkstoffe eingesetzt. Ziel des Projekts war es, die Messdauer signifikant zu reduzieren, ohne Einbußen

bei der Genauigkeit der quantitativen Phasenanalyse hinnehmen zu müssen, und dadurch den Probendurchsatz deutlich zu erhöhen.

Kern des Projekts ist ein adaptiver Smart-Scan-Ansatz, bei dem ein mit Reinforcement Learning trainierter KI-Agent während der Messung selbstständig entscheidet, welche Winkelbereiche den höchsten Informationsgewinn liefern. Anstelle vollständiger, gleichmäßig abgetasteter Diffraktogramme werden gezielt nur jene Messpunkte erfasst, die für die quantitative Phasenbestimmung entscheidend sind. Die KI kombiniert physikalisches Vorwissen mit der kontinuierlichen Auswertung bereits gemessener Daten und reduziert dadurch sowohl die Messzeit als auch den Bedarf an manueller Expertenintervention bei Messplanung und Auswertung.

Die entwickelte Methode wurde auf mehreren Labordiffraktometern unter realen Gerätebedingungen getestet. Es konnte gezeigt werden, dass mit weniger als zehn Prozent der üblichen Messpunkte eine gleichwertige, teilweise sogar verbesserte Genauigkeit der Phasenanalyse erreicht wird. Unter den gegebenen Randbedingungen wurde eine etwa vierfache Reduktion der Messzeit erzielt. Darüber hinaus wurde ein deutliches weiteres Beschleunigungspotenzial identifiziert, das bei optimierter Geräteansteuerung in zukünftigen Anwendungen realisierbar ist.

Begleitend wurden umfangreiche Trainings- und Validierungsdatensätze aufgebaut, bestehend aus realen und synthetisch generierten XRD-Spektren. Diese bilden die Grundlage für robuste und übertragbare KI-Modelle. Der entwickelte Prototyp wurde im Rahmen der Zusammenarbeit zwischen Wissenschaft und Industrie erfolgreich getestet und demonstriert das hohe Innovations- und Verwertungspotenzial des Ansatzes.

Die Projektergebnisse leisten einen Beitrag zu effizienteren und ressourcenschonenderen XRD-Messungen. Verkürzte Messzeiten führen zu geringerem Energieverbrauch, höherer Geräteauslastung und reduzierter Strahlenbelastung der Proben. Damit eröffnet die KI-gestützte Smart-Scan-Technologie neue Anwendungsmöglichkeiten für industrielle Routinemessungen, Qualitätskontrolle sowie zukünftige zeitaufgelöste und in-situ-Analysen und stärkt die Wettbewerbsfähigkeit datengetriebener Messtechnologien am Standort Österreich.

## **Projektkoordinator**

- goodguys gmbh

## **Projektpartner**

- Universität Graz