

Analyse

Materialien verstehen mit XRD

Die Röntgendiffraktometrie, kurz XRD, ist ein Analyseverfahren zur Untersuchung kristalliner Materialien. Dabei wird die Probe mit Röntgenstrahlung bestrahlt, die an den regelmäßig angeordneten Gitterebenen der Kristallstruktur gebeugt wird. Aus den gemessenen Beugungswinkeln und Intensitäten entsteht ein charakteristisches Diffraktogramm. Dieses ermöglicht Rückschlüsse auf die vorhandenen kristallinen Phasen, die Kristallstruktur sowie weitere Materialeigenschaften.

Was kann untersucht werden?

Pulver, Partikel, kompakte Probenstücke oder beschichtete Substrate

Phasenanalyse: Identifikation kristalliner Phasen in Proben

Quantitative Phasenbestimmung: Bestimmung von Phasenanteilen in Mischungen

Kristallstrukturaufklärung: Analyse von Gitterstruktur und Kristallsystemen

Bestimmung von Gitterparametern: Nachweis von Strukturänderungen oder Dotierungen

Kristallinitätsgrad: Unterscheidung zwischen amorphen und kristallinen Anteilen

Korngrößenabschätzung: Bestimmung sehr kleiner Kristallitgrößen über Peakverbreiterung

Texturanalyse: Bestimmung bevorzugter Kristallorientierungen

Dünnschichtanalyse: Untersuchung von Schichtdicke, Orientierung und Qualität

In-situ-Messungen: Untersuchung struktureller Veränderungen direkt während eines Prozesses, z. B. beim Erhitzen, unter Druck oder während chemischer Reaktionen

Typische Anwendungsfelder

Katalysatoren: Identifikation aktiver Phasen und Strukturveränderungen während einer Reaktion nachvollziehen

Batteriematerialien: Vorhandene Phasen und strukturelle Veränderungen in Elektrodenmaterialien analysieren

Wasserstofftechnologien: Stabilität von Materialien unter Wasserstoffeinfluss bewerten

Materialentwicklung: Charakterisierung neuer Werkstoffe, Legierungen oder Keramiken

Recycling: Rückstände, Schlacken, Aschen oder Sekundärrohstoffe hinsichtlich ihrer Zusammensetzung charakterisieren

Qualitätskontrolle: Gewünschte Materialzusammensetzung prüfen und Abweichungen erkennen

Geologie und Mineralogie: Identifikation von Mineralphasen in Gesteinen, Böden und Erzen

Messbedingungen und Anlagenoptionen

- Verwendung verschiedener Röntgenquellen (Cu, Mo)
- Messungen in Reflektions- und Transmissionsgeometrie
- Messungen mit geringer Probenmenge
- In-situ-Messungen unter realitätsnahen Bedingungen
- Einsatz unterschiedlicher Gase (H_2 , N_2 , Luft etc.)
- Untersuchungen bei Temperaturen bis zu 900 °C und Druck bis zu 10 bar(g)
- Flexible Bettkonfigurationen, etwa Umströmen oder Durchströmen der Probe

Nutzen für Forschung und Industrie

- Materialien besser verstehen und gezielt weiterentwickeln
- Prozesse unter praxisnahen Bedingungen nachvollziehen
- Qualität und Stabilität von Materialien zuverlässig bewerten
- Fehlerquellen und unerwünschte Phasen frühzeitig erkennen
- Versuche können gezielter geplant und Entwicklungsaufwand reduziert werden.

Kontakt

Dr. Jonas Schulwitz
Heterogeneous Catalysis
Tel. +49 1629739327
jonas.schulwitz@umsicht.fraunhofer.de

Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik UMSICHT
Osterfelder Str. 3
46047 Oberhausen
www.umsicht.fraunhofer.de