

BEREICH: MATERIALFORSCHUNG

RÖNTGENPULVERDIFFRAKTOMETRIE

ANALYSE VON PHASENBESTAND UND ATOMARER STRUKTUR

Die Röntgenpulverdiffraktometrie ist die Standardmethode zur qualitativen und quantitativen Bestimmung des Phasenbestandes von pulverförmigen Proben. Sie ist eine vielseitige, zerstörungsfreie Methode, die auch detaillierte Informationen über den atomaren Aufbau (Kristallstruktur) sowohl von natürlich vorkommenden, als auch synthetisch hergestellten Materialien liefern kann. Die Universität verfügt über ein hochleistungsfähiges **Bruker D8 Advanced DaVinci-Design** Pulverdiffraktometer mit schnellem Detektionssystem, sowie ein **Philips X'Pert Pro** und ein **Siemens D500** Diffraktometer.

ANWENDUNGEN:

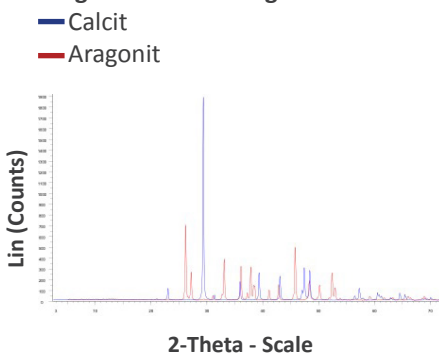
Die Pulverdiffraktometrie wird erfolgreich verwendet für:

- Phasenidentifikation, z.B. Rauchgasreinigungs- und Filterrückstände, Keramiken, Farben, Gesteine, antike Fundstücke, Sedimente
- Tonmineralanalyse
- quantitative Phasenbestimmung, z.B. Zementklinker, Erze, Phasenumsatz bei chemischen Reaktionen
- Struktur und Textur von Materialien

METHODE:

Jedes kristalline Material zeigt bei Beleuchtung mit Röntgenstrahlung ein einzigartiges, charakteristisches Beugungsmuster, das durch Größe, Symmetrie und atomaren Aufbau gegeben ist und das – einem „Fingerabdruck“ gleich – zur Identifikation herangezogen werden kann.

Vergleich Calcit - Aragonit



Mit Hilfe von Röntgenbeugung können auch chemisch idente, jedoch strukturell unterschiedliche Phasen (z. B. die CaCO_3 -Phasen Calcit und Aragonit) unterschieden werden.



VOORTEILE:

Schon eine sehr geringe Materialmenge (mg Bereich) einer pulverförmigen Probe ist ausreichend für beste Messergebnisse. Mit hoher Genauigkeit können auch verschiedene Formen (Modifikationen) ein und derselben chemischen Substanz (z.B. C, SiO_2) oder Phasen ähnlicher Zusammensetzung (FeO , Fe_2O_3 , Fe_3O_4) unterschieden werden, was bei einer (nass-)chemischen Analytik nicht möglich ist.

ANGEBOT:

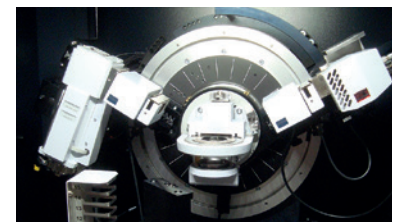
Proben können innerhalb weniger Stunden gemessen werden, die Auswertung der Daten kann auf Wunsch von einfach (qualitativ) bis komplex (quantitativer Phasenbestand, atomare Struktur) durchgeführt werden.

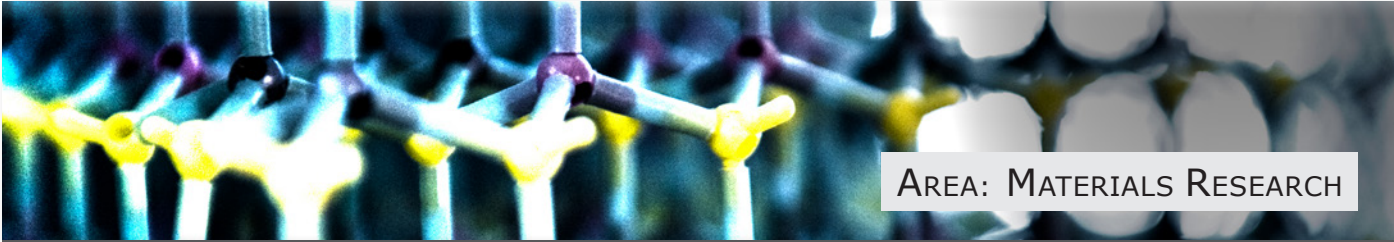
KONTAKT:

Technologietransfer
 Dr. Erika Hebenstreit LL.M.
 Forschungsservice
 Kapitelgasse 4-6
 5020 Salzburg
 Tel.: +43-(0)662-8044 2451
 Erika.Hebenstreit@sbg.ac.at
 www.uni-salzburg.at/forschungsservice/techtransfer

RÖNTGENPULVERDIFFRAKTOMETRIE:

Assoz.Prof. PD. Dr. Mag.
 Günther Redhammer
 Fachbereich Materialforschung
 und Physik
 Mineralogie
 Hellbrunnerstraße 34
 5020 Salzburg
 Tel.: +43 (0)662-8044 5423
 Guenther.Redhammer@sbg.ac.at
 www.uni-salzburg.at/mw




 AREA: MATERIALS RESEARCH

X-RAY POWDER DIFFRACTION

ANALYSIS OF PHASE CONTENT AND ATOMIC STRUCTURE

X-ray powder diffraction is a standard technique used to determine the qualitative and the quantitative phase content of polycrystalline powdered samples. It is a versatile, non-destructive method, which can also provide detailed information about the atomic architecture (crystal structure) of natural as well as synthetic compounds. The University of Salzburg owns a high-duty **Bruker D8 Advanced DaVinci-Design** with fast detection system, a **Philips X'Pert Pro** for in-situ high temperature measurements and a **Siemens D500** Defractometer.

APPLICATIONS:

Powder diffraction is successfully used at our laboratory for:

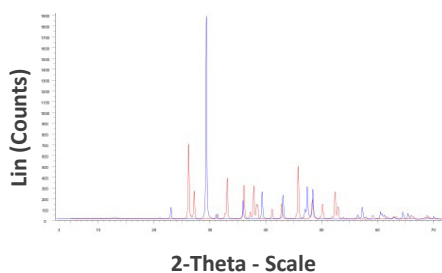
- phase identification, for example filter and flue-gas residues, ceramics, colours, pigments, rocks, ancient findings, sediments
- clay mineral analysis
- quantitative phase determination, for example cement clinkers, ores, reaction yield at chemical reactions
- structure and texture of materials

METHOD:

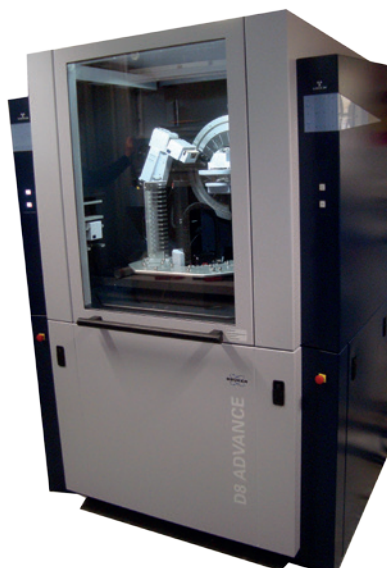
Each crystalline solid has its unique characteristic X-ray diffraction pattern which may be used as a 'fingerprint' for its identification. Once the material has been identified, X-ray crystallography may be used to determine its structure, for example how the atoms pack together in the crystalline state and what are the interatomic distance and angle.

Comparison Calcite - Aragonite

- Calcite
- Aragonite



Using X-ray diffraction methods allows to distinguish different polymorphs of the same chemical composition (e.g. CaCO_3 -phase calcite and aragonite).



BENEFITS:

Even small quantities (mg range) are measurable, yielding best results. It is possible to discern with high accuracy different forms (modifications) of one and the same chemical material (e.g. C, SiO_2) or phases with similar composition (FeO , Fe_2O_3 , Fe_3O_4). The information here provided is not accessible by using conventional (wet) chemical analysis.

SERVICE:

Powder samples can be measured within a few hours. Data evaluation is available upon request at different levels, from simple qualitative phase determination to quantitative phase analysis and atomic structure refinement.

CONTACT:

Technology Transfer
Dr. Erika Hebenstreit LL.M.
Forschungsservice
Kapitelgasse 4-6
5020 Salzburg

Tel.: +43-(0)662-8044 2451
Erika.Hebenstreit@sbg.ac.at
www.uni-salzburg.at/forschungsservice/techtransfer

X-RAY POWDER Diffraction:

Assoc.Prof. PD. Dr. Mag.
Günther Redhammer
Department of Materials
Science and Physics
Division of Mineralogy
Hellbrunnerstraße 34,
5020 Salzburg

Tel.: +43 (0)662-8044 5423
Guenther.Redhammer@sbg.ac.at
www.uni-salzburg.at/mw

