

Masterarbeit

ANFORDERUNGEN AN ANTRIEBE BEI GERÄTEN ZUR RÖNTGENSTRUKTURANALYSE

ausgeführt am



FACHHOCHSCHULE DER WIRTSCHAFT

Fachhochschul-Masterstudiengang
Automatisierungstechnik-Wirtschaft

von

Ing. Roman Prischnegg BSc.

1510322017

betreut und begutachtet von

DI Karl Hartinger

Graz, im Dezember 2016

.....
Unterschrift

EHRENWÖRTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre ehrenwörtlich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, andere als die angegebenen Quellen nicht benützt und die benutzten Quellen wörtlich zitiert sowie inhaltlich entnommene Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

.....

Unterschrift

DANKSAGUNG

Meiner Lebensgefährtin, meiner Familie, Herrn DI Josef Gautsch, Frau Dr. Barbara Puhr, Herrn Dr. Andreas Pein und meinem Betreuer möchte ich für die moralische Unterstützung und für Rat und Tat danken.

KURZFASSUNG

Die Röntgenstrukturanalyse ist ein Messverfahren, welches zur Charakterisierung von Materialparametern, wie zum Beispiel Kristallstruktur und Kristallgröße, eingesetzt wird. Derzeit bietet die Anton Paar GmbH, mit Sitz in Graz Straßgang, verschiedene Geräte und Zusätze für die Röntgenstrukturanalyse an. Um das Produktportfolio zu erweitern, soll ein neues Gerät entwickelt werden.

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines Konzepts für den Antrieb des neuen Röntgenstrukturanalysegeräts. Des Weiteren sollte sie als Basis für den Aufbau eines Prototyps dienen. Zusätzlich erfolgte noch eine Analyse von bereits am Markt etablierten Geräten der Mitbewerber, um damit die Anforderungen an den Antrieb, wie auch an das Gesamtgerät, definieren zu können.

Nach einigen theoretischen Grundlagen der Röntgenstrukturanalyse erfolgte der Vergleich von Geräten der Mitbewerber. Aus den Ergebnissen der Analyse wurden die Anforderungen an das Gerät und den Antrieb abgeleitet. Im Anschluss daran wurde ein Konzept für den Antrieb erarbeitet. Dabei wurden mehrere mögliche Varianten aufgezeigt und miteinander verglichen, um die beste Variante zu ermitteln. Danach wurden die einzelnen Komponenten der ausgewählten Variante bestimmt und entsprechend der angreifenden Kräfte und Momente ausgelegt. Am Schluss erfolgte auf Basis der vorangegangenen Erkenntnisse die Konstruktion eines 3D-Modells.

Die Zielvorgaben an den Antrieb im Bereich der Genauigkeit und Auflösung konnten erfüllt werden. Auch wurde eine kompakte Bauweise mit niedrigen Herstellkosten realisiert. Es wurden bereits zwei Prototypen in Fertigung gegeben, welche auf den 3D-Modellen dieser Arbeit basieren.

Abschließend lässt sich sagen, dass die in dieser Arbeit gestellten Anforderungen erfüllt werden konnten und ein umsetzungsfähiges Konzept entstanden ist. Dieses zeigt, dass auch mit geringen Herstellkosten die hohen Anforderungen an den Antrieb realisiert werden konnten.

ABSTRACT

The X-ray analysis of crystals is a method of measuring material parameters, for instance crystal structure and the size of crystals. The Anton Paar GmbH, which is currently located in Graz Straßgang, presently provides several devices and options for the X-ray analysis of crystals. To expand the product portfolio in this field, a new measuring instrument should be developed.

The aim of this study was to develop a concept for the drivetrain of such a new measuring instrument, to be the basis for building a prototype. Another aim was to analyse the well-established devices on the marketplace, to determine the requirements for the drivetrain and the measuring device as a whole.

Initially, the basics for the X-ray analysis of crystals were explained. A comparison of the competitor devices followed. The requirements for the measuring device and the drivetrain were derived from the results of the comparison. Following this, a concept for the drivetrain was acquired. Therefore several opportunities were elaborated and compared with each other, to find the best concept for the drivetrain. After that, the components of the drivetrain were chosen and designed for the forces and torques which would bear upon the system. Finally a 3D-model was designed on the basis of the previous perceptions.

The objectives for the drivetrain regarding accuracy and resolution could be fulfilled. Moreover a compact design with low construction costs was realised. Two prototypes have already been produced. They are based on the 3D-models of this study.

In conclusion, the desired requirements could be fulfilled and a useful concept was developed. It shows that the high requirements of the drivetrain could be realised with low production costs.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung.....	1
1.1	Anton Paar GmbH	1
1.2	Aufgabenstellung	2
1.3	Zielsetzung und geplante Ergebnisse	2
2	Röntgendiffraktion	3
2.1	Röntgenstrahlung	3
2.1.1	Entstehung von Röntgenstrahlung	4
2.1.2	Röntgenspektrum	6
2.1.3	Proben im Röntgenstrahl	9
2.1.4	Gefahren	11
2.2	Röntgendetektion.....	13
2.2.1	Verfahren	13
2.2.2	Grundtypen von Röntgendetektoren	15
2.3	Kristallographische Grundlagen.....	16
2.3.1	Kristall und Kristallstruktur	16
2.3.2	Elementarzelle	17
2.3.3	Kristallaufbau	18
2.3.4	Reziprokes Gitter	19
2.4	Beugung und ihre Darstellung	20
2.4.1	Streuung und Beugung	20
2.4.2	Bragg'sches Gesetz.....	21
2.4.3	Ewald Sphäre.....	22
3	Aufbau eines Diffraktometers.....	23
3.1	Schematische Darstellung	23
3.2	Goniometer	24
3.2.1	Aufbau.....	24
3.2.2	Bauformen	24
3.3	Messgeometrien	26
3.4	Röntgenquelle.....	29
3.4.1	Aufbau.....	29
3.4.2	Arten	30
3.5	Optische Komponenten	31
3.5.1	Monochromator und Röntgenspiegel	31
3.5.2	Divergenzspalt und Antistreuspalt	31
3.5.3	Sollerspalt	32
3.6	Probenträger.....	32
3.7	Detektoren	33
3.7.1	Punkt-detektoren.....	34
3.7.2	Liniendetektoren	34

3.7.3	Flächendetektoren	35
4	Grundlagen Schrittmotoren	36
5	Analyse des Marktes	39
5.1	Mitbewerber	39
5.2	Bruker D8 Advance	39
5.3	PANalytical Empyrean	45
5.4	Rigaku SmartLab	48
5.5	Vergleich und Erkenntnisse	51
6	Definition der Anforderungen	55
6.1	Grundgerät	55
6.2	Goniometer	56
6.3	Zubehör	56
7	Konzept Antrieb eines Zwei-Kreis-Goniometers	58
7.1	Prinzipskizze	58
7.2	Wirkende Kräfte und Momente	59
7.3	Antriebskonzept	60
7.3.1	Ermittlung der Varianten und Beurteilungskriterien	60
7.3.2	Vergleich	64
7.3.3	Auswahl	68
7.4	Umsetzungsvariante	68
7.4.1	Probleme	68
7.4.2	Anpassungen	69
7.4.3	Skizze	70
7.5	Auswahl und Auslegung der Zukaufkomponenten	72
7.5.1	Getriebe	72
7.5.2	Zahnriementrieb	80
7.5.3	Schrittmotor	82
7.5.4	Winkelmesssystem	84
7.5.5	Daten des Antriebes	87
8	Umsetzungsvariante für Prototypenaufbau	89
8.1	Optimierungen und Anpassungen	89
8.2	3D-Konstruktion	91
8.2.1	Antrieb	92
8.2.2	Gesamtsystem	94
8.3	Betrachtung der erreichbaren Genauigkeit	95
8.3.1	Bauteilverformung	95
8.3.2	Messsystem	96
8.4	Kostenabschätzung	97
9	Ergebnisse	98
10	Ausblick	99
	Literaturverzeichnis	100
	Abbildungsverzeichnis	103

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis.....	107
Abkürzungsverzeichnis.....	108
Anhang 1: Bravais Gitter	109
Anhang 2 Auslegung Zahnriemen.....	110

1 EINLEITUNG

In dieser Arbeit wird die Erstellung eines Antriebskonzepts, welches in einem neu zu entwickelnden Röntgenstrukturmessgerät zum Einsatz kommen soll, sowie die Analyse der bereits am Markt etablierten Konkurrenzgeräte behandelt. Dieses Messgerät dient unter anderem der Analyse der Kristallstruktur, der Phasenzusammensetzung sowie der Untersuchung der Gitterparameter und wird von der Anton Paar GmbH in Straßgang entwickelt. Der Antrieb umfasst zwei Schwenkarme, welche um einen gemeinsamen Drehpunkt, an dem sich auch die Probe befindet, schwenken und mit Hilfe einer Röntgenquelle und einem Detektor die Materialparameter charakterisieren. Diese Art von Antrieb wird auch als Goniometer bezeichnet. Um diese Parameter untersuchen zu können, muss die Antriebseinheit hochpräzise Messpositionen anfahren können und des Weiteren eine sehr hohe Auflösung bieten. Zur Festlegung dieser Kenngrößen hat im Vorhinein eine Analyse der Konkurrenzgeräte zu erfolgen.

1.1 Anton Paar GmbH¹

Anton Paar entwickelt und produziert Präzisionslabormessgeräte sowie hochgenaue Prozessmesstechnik und liefert auch maßgeschneiderte Automations- und Robotik-Lösungen. In den Bereichen Dichte- und Konzentrationsmessung sowie in der Rheometrie und in der CO₂-Messung ist man mit den Messgeräten Weltmarktführer. Seit 2003 ist der Eigentümer der Anton Paar GmbH die gemeinnützige Santner Privatstiftung.

Gegründet wurde das Unternehmen 1922 von Anton Paar als Einmann-Reparaturwerkstatt. Innerhalb kürzester Zeit konnten schon erste Kontakte zu Universitäten und Forschungseinrichtungen geknüpft werden. In den 1920er Jahren bildete er seine Tochter, Margarete Platzer, zur Facharbeiterin aus und diese wurde zur ersten Schlossermeisterin der Steiermark. Zusammen mit dem Wissen von Prof. Otto



Kratky wurde die Basis für das erste wissenschaftlich analytische Instrument von Anton Paar, die Kratky-Röntgen-Kleinwinkelkamera, geschaffen. Ab 1963 übernahm Ulrich Santner, der Schwiegersohn von Margarete Platzer, die Geschäftsführung. Durch seine Innovationsgedanken legte er das Fundament für die Expansion des Unternehmens auf dem Gebiet der Messtechnik durch den intensivierten Austausch und Kontakt mit Universitäten.

Abbildung 1: CEO Friedrich Santner, Quelle: Anton Paar GmbH (2016), Online-Quelle [21.05.2016].

¹ Vgl. Anton Paar GmbH (2016), Online-Quelle [21.05.2016].

Ab 1986 übernahm Friedrich Santner, der Schwiegersohn von Ulrich Santner, gemeinsam mit ihm das Unternehmen. Seit 2002 ist Friedrich Santner als Alleingeschäftsführer tätig.

Derzeit beschäftigt die Anton Paar GmbH ca. 2300 Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen weltweit, davon sind im Hauptfirmensitz in Graz rund 1000 tätig. Man ist in 110 Ländern aktiv und besitzt weltweit 25 Tochterunternehmen. Die Kernkompetenzen von Anton Paar sind die Präzisionsfertigung und der traditionell enge Kontakt zur Wissenschaft. Diese bilden dadurch auch die Grundlage für die Qualität der Präzisionsmessgeräte. Ein weiterer wichtiger Punkt sind die hohen Investitionen, mehr als 20% des jährlichen Umsatzes gehen, in die Forschungs- und Entwicklungsabteilung. Dort werden neue Messprinzipien, Sensorgenerationen und Technologiekonzepte entwickelt, um langfristig dazu beizutragen, die bereits bestehende Marktführerschaft auszubauen und sie in anderen Bereichen zu gewinnen. In Einklang mit modernsten Fertigungstechnologien werden bei Anton Paar hochpräzise Messinstrumente gefertigt, die sich genau an den Bedürfnissen der Kunden orientieren.

1.2 Aufgabenstellung

Die Fragestellung lautet, wie müssen der Antrieb und die beweglichen Achsen eines Röntgenstrukturanalysegeräts aufgebaut sein, damit es gegenüber dem Markt möglichst viele Alleinstellungsmerkmale aufweist und dadurch einen großen Wettbewerbsvorteil bietet. Besonderes Augenmerk soll dabei verstärkt auf Genauigkeit, Gewicht, Bauweise, Stabilität und modularen Aufbau gelegt werden. Es sollen die derzeit am Markt befindlichen Geräte ermittelt sowie verglichen werden und dadurch der aktuelle Gerätestandard (Umfang, Grad der Automatisierung, Genauigkeit,...) gezeigt werden. Die Software zur Auswertung sowie zur Ansteuerung der Geräte soll dabei nicht betrachtet werden.

1.3 Zielsetzung und geplante Ergebnisse

Ziel der Arbeit ist eine Analyse der am Markt befindlichen Geräte und aus den daraus gewonnenen Erkenntnissen möglichst viele Alleinstellungsmerkmale sowie die Mindestanforderungen für das Goniometer abzuleiten. Konkrete Ziele sind die Erreichung eines Zwei-Theta-Winkels von mindestens 165° , Erhöhung der Flexibilität und Modularität im Vergleich zur Konkurrenz, Herstellkosten der Antriebseinheit von maximal 7000 € sowie eine kompakte Bauweise, um die Abmessungen um mindestens 10% zu verringern. Des Weiteren soll eine Systemgenauigkeit von kleiner gleich $\pm 0,01^\circ$ und eine Auflösung von kleiner gleich $0,001^\circ$, entspricht 3,6 Winkelsekunden, erreicht werden. Diese Arbeit soll die Basis für den Aufbau eines funktionsfähigen Prototyps der Antriebseinheit darstellen.

2 RÖNTGENDIFFRAKTION

In diesem Kapitel werden die Grundlagen für das zu entwickelnde Strukturanalysenmessgerät erarbeitet, welche die Basis für den elektromechanischen Aufbau und die Auswahl der Komponenten bilden.

Die Röntgendiffraktion, auch Röntgenbeugung, ist ein vielseitig einsetzbares, zerstörungsfreies Materialanalyseverfahren, bei dem Flüssigkeiten, Pulver oder Feststoffe untersucht werden können. Die bei diesem Verfahren betrachteten Parameter sind Gitterkonstanten, Kristallgröße und Kristallform sowie die Phasenzusammensetzung, sowohl qualitativ als auch quantitativ. Des Weiteren können die Einflüsse von Temperatur, Druck und Feuchtigkeit mit speziellen Zusätzen untersucht werden.²

2.1 Röntgenstrahlung

Als Röntgenstrahlen werden elektromagnetische Wellen, mit einer Wellenlänge von 10nm bis 0,01nm und einer Energie von 100eV bis 100MeV, bezeichnet. Andere elektromagnetische Wellen wie zum Beispiel Radiowellen, Lichtstrahlen und Gammastrahlung unterscheiden sich nur durch die Wellenlänge und Energie von der Röntgenstrahlung.³

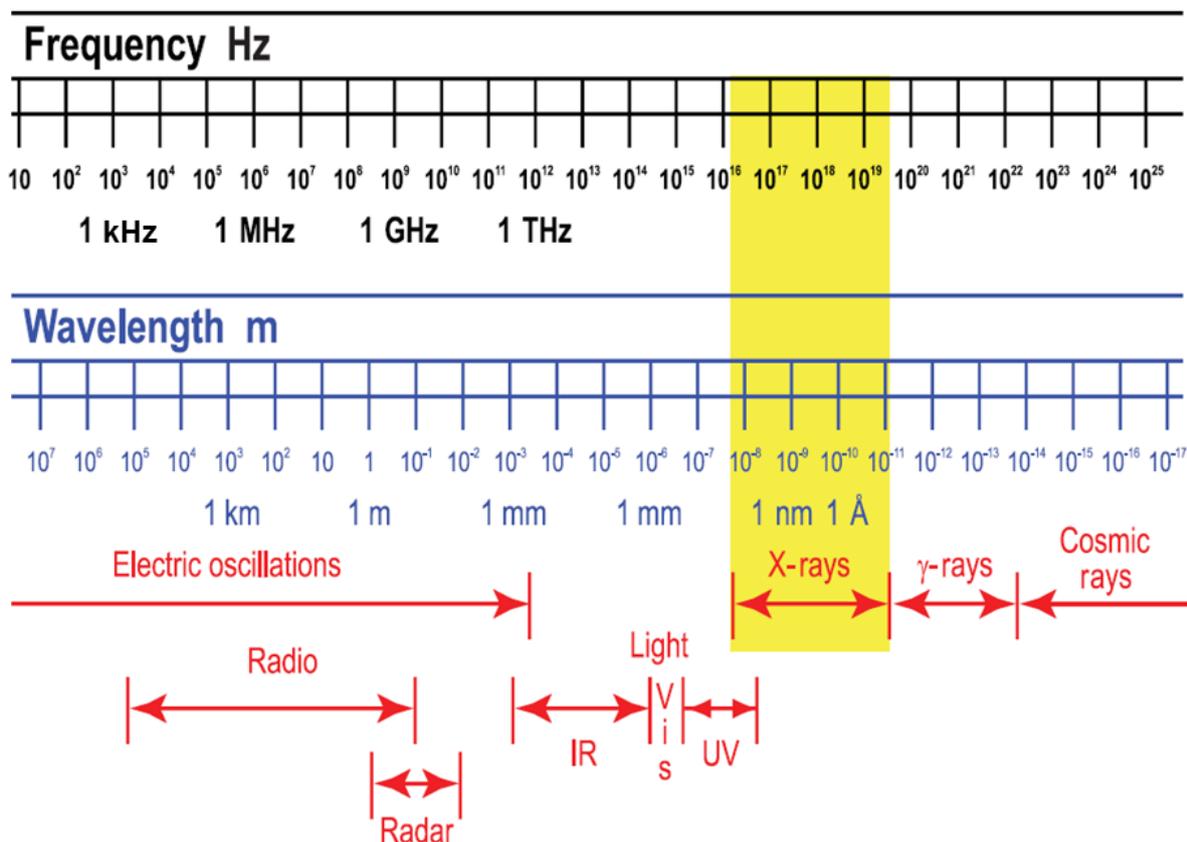


Abbildung 2: Frequenz und Wellenlänge von elektromagnetischen Strahlen, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S.10 (leicht modifiziert).

² Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 8.

³ Vgl. Waseda/Matsuraba/Shinoda (2011), S. 1.

Mit Hilfe der Energiebilanz und der Planck'schen Konstante kann nun aus der Wellenlänge auf die Energie geschlossen werden und umgekehrt.

$$E = h \frac{c}{\lambda} \quad (1.1)$$

E/eV	Energie
h/Js	Planck'sche Konstante
c/ms^{-1}	Lichtgeschwindigkeit
λ/m	Wellenlänge

$c=299\,792\,458\text{ ms}^{-1}$
 $h=6,626 \cdot 10^{-34}\text{ Js}$

2.1.1 Entstehung von Röntgenstrahlung

Generell werden zwei Arten der Erzeugung von Röntgenstrahlen bei technischen Anwendungen unterschieden. Diese sind:

- **Erzeugung mittels Röntgenröhre**

Dies ist das am häufigsten eingesetzte Verfahren, um elektromagnetische Wellen zu erzeugen. Dabei werden Elektronen hoher Energie auf ein metallisches Ziel (Anode), zum Beispiel Kupfer oder Molybdän, geschossen.⁴ Zur Erzeugung der Elektronen wird eine Drahtwendel von einem Strom durchflossen und dadurch erhitzt. Mit Hilfe einer Hochspannung erfolgt die Beschleunigung der so erzeugten Elektronen auf das Ziel (siehe Abbildung 3). Bei der Kollision mit dem Ziel bremsen die Elektronen schlagartig ab und verlieren dabei kinetische Energie. Wenn das Elektron beim Zusammenstoß seine gesamte Energie verliert, erzeugt dies Röntgenstrahlen mit maximaler Energie beziehungsweise kürzester Wellenlänge (siehe Planck'sche Konstante).⁵ Da dies eine sehr einfache Methode ist, Röntgenstrahlung zu erzeugen, werden Röntgenröhren gerne in verschiedensten Größen in Labors eingesetzt. Der Nachteil ist die geringe Effizienz, da die meiste Energie beim Aufprall der Elektronen auf das metallische Ziel in Wärme umgewandelt wird, weshalb Röntgenröhren zwingend gekühlt werden müssen.⁶ Auch in dem zu entwickelnden Messgerät wird eine Röntgenröhre zum Einsatz kommen.

⁴ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 110 f.

⁵ Vgl. Waseda/Matsuraba/Shinoda (2011), S. 3.

⁶ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 110 f.

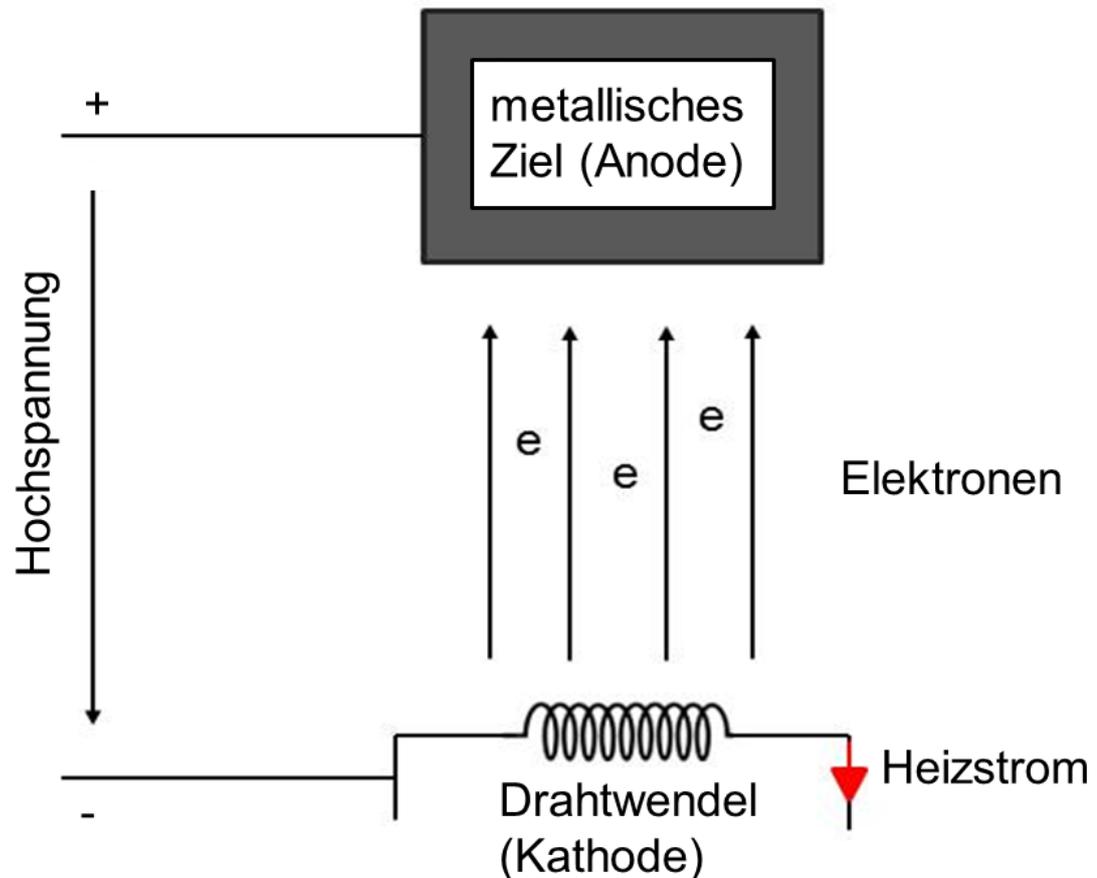


Abbildung 3: Vereinfachte Darstellung der Erzeugung von Röntgenstrahlung in Röntgenröhren, Quelle: Eigene Darstellung.

- **Synchrotron**

Das Synchrotron ist ein Ringbeschleuniger, bei dem Elektronen hoher Energie durch ein magnetisches Feld abgelenkt werden. Die dabei entstehende sogenannte Synchrotronstrahlung ist eigentlich ein Nebenprodukt eines Ringbeschleunigers, da dieser hauptsächlich für die Untersuchung von Elementarteilchenreaktionen eingesetzt wird. Aufgrund der hohen Intensität des Strahls und der geringen thermischen Verluste werden Synchrotrone mittlerweile vermehrt zur Materialforschung eingesetzt. Aufgrund der Größe und der hohen Betriebskosten kommen Synchrotrone nur in großen Forschungszentren zum Einsatz.⁷

⁷ Vgl. Krieger (2005), S 13, S 288 ff.

2.1.2 Röntgenspektrum

Bei einer Röntgenröhre werden Elektronen auf ein metallisches Ziel beschleunigt und in dessen Brennfleck wird die eigentliche Röntgenstrahlung erzeugt. Man unterscheidet dabei zwei Strahlungen, die Bremsstrahlung und die charakteristische Strahlung (siehe Abbildung 4).

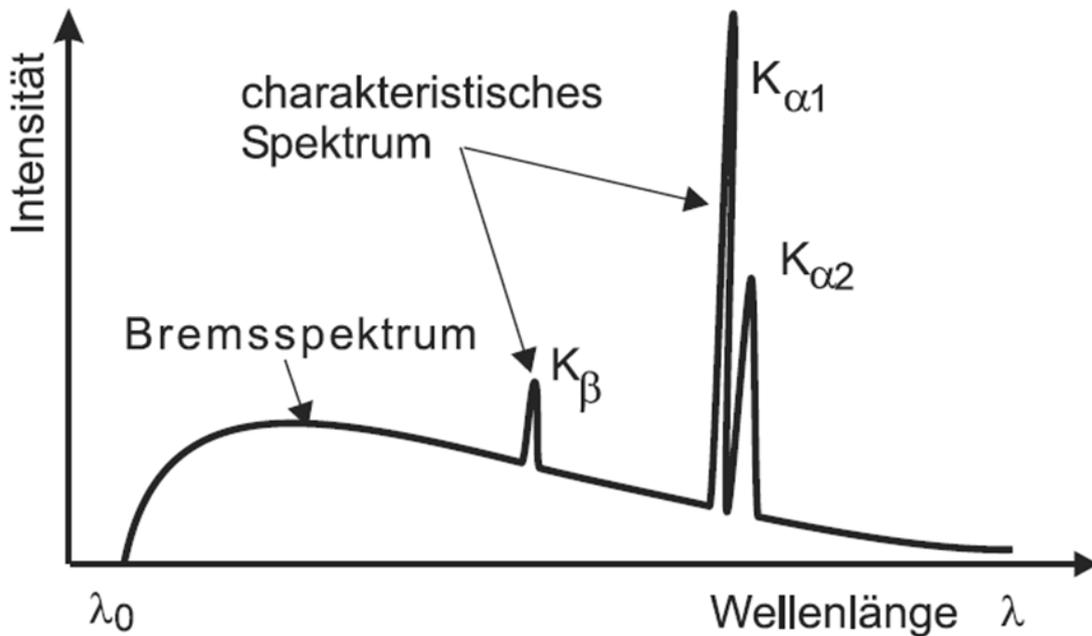


Abbildung 4: Röntgenspektrum, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 8.

- **Bremsstrahlung**

Die Bremsstrahlung, auch weiße Strahlung genannt, entsteht durch das schlagartige Abbremsen der Elektronen an der Oberfläche der Anode, wodurch die kinetische Energie des Elektrons in Röntgenstrahlung umgewandelt wird. Die Bremsstrahlung besitzt ein kontinuierliches Spektrum und eine Grenzwellenlänge λ_0 . Diese Wellenlänge entsteht, wenn ein Elektron von seiner Maximalgeschwindigkeit beim Auftreffen auf die Anode vollständig abgebremst wird. Aus der Energiebilanz (Gleichung 1.1) kann die Grenzwellenlänge λ_0 wie folgt berechnet werden:

$$\lambda_0 = \frac{hc}{E} = \frac{hc}{eU} \quad (1.2)$$

λ_0/m	Grenzwellenlänge
U/V	Hochspannung
e/As	Elementarladung

Daraus wird ersichtlich, dass die Grenzwellenlänge nur von der Hochspannung zur Beschleunigung der Elektronen abhängig ist. Sie ist ein Maß für die Durchdringungsfähigkeit der Röntgenstrahlung: je höher die Energie und dadurch je kleiner die Wellenlänge desto größer ist die Durchdringung.⁸

⁸ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 7 ff.

- **Charakteristische Strahlung**

Für das Verständnis der Entstehung der charakteristischen Strahlung ist es am Sinnvollsten, dies anhand des Bohr-Sommerfeld'schen Atommodells zu beschreiben.

Nach diesem Modell besteht ein Atom aus einem Kern, mit Protonen und Neutronen, und den umgebenden Schalen, welche die Elektronen beinhalten. Vom Kern nach außen gibt es die K-, L-, M-Schale und so weiter, für die Erklärung reichen hier die ersten drei Schalen aus. Die L-Schale wird noch dreifach und die M-Schale noch fünffach in Unterschalen aufgespalten. Jedes Element besitzt eine natürliche Anzahl an Hauptschalen oder auch Hauptquanten n , pro Hauptschale können sich dann $2n^2$ Elektronen aufhalten. Daraus folgt, dass sich in der Schale mit der niedrigsten Energie, der K-Schale, 2 Elektronen aufhalten, der L-Schale maximal 8 und in der M-Schale maximal 18 Elektronen. Dabei ist noch entscheidend, dass die Energie der Elektronen von der innersten Schale, der K-Schale, nach außen hin zunimmt. Da die Energien der Elektronen negative Werte aufweisen (siehe Abbildung 6), ist der größte Betrag der energieärmste Zustand.⁹

Die Erzeugung der charakteristischen Strahlung erfolgt dadurch, dass ein anderes Elektron, ein Elektron des Atoms aus seiner Schale herauslöst. Die Energie des Teilchens muss dabei größer sein als die Bindungsenergie des Elektrons, um es herauszulösen. In Abbildung 5 wird das Elektron des Atoms mit Hilfe eines anderen Elektrons (abgebremstes Elektron) aus seiner Bindung gelöst. Nach dem Herauslösen des Elektrons befindet sich das Atom in einem instabilen Zustand und will sich wieder in einen stabilen Zustand begeben. Dies wird erreicht, indem ein Elektron einer Schale mit höherer Energie sich auf eine Schale niedrigerer Energie begibt. Die Energiedifferenz wird dabei als Röntgenphoton abgegeben (siehe Abbildung 5). Aufgrund der atomspezifischen Energiestufen ist die abgegebene Strahlung charakteristisch für das Anodenmaterial.¹⁰

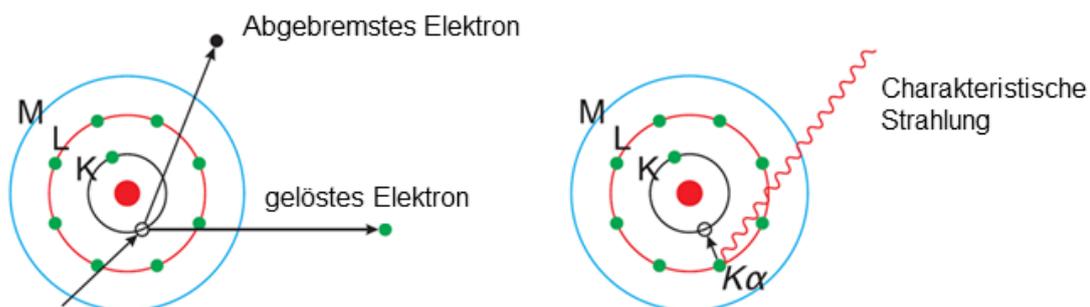


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Erzeugung charakteristischer Röntgenstrahlung, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S14 (leicht modifiziert).

⁹ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 10 ff.

¹⁰ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S 14 ff.

Durch diesen Transfer der Elektronen aus verschiedenen Energieniveaus entstehen die charakteristischen Strahlungen $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$, und so weiter. Die griechischen Buchstaben α und β , nach dem Buchstaben der Schale, in die das Elektron tritt, beschreiben die Differenz der Hauptquantenzahl. Das heißt ist $\Delta n=1$ wird der Buchstabe α verwendet ist die Differenz größer als eins wird β verwendet. Die Ziffern nach dem griechischen Buchstaben beschreiben die Unterschalen, aus welchen das Elektron transferiert wird. Dies wird allerdings nur bei der K-Strahlung konsequent durchgeführt.¹¹ Anschaulich dargestellt wird dies in Abbildung 6.

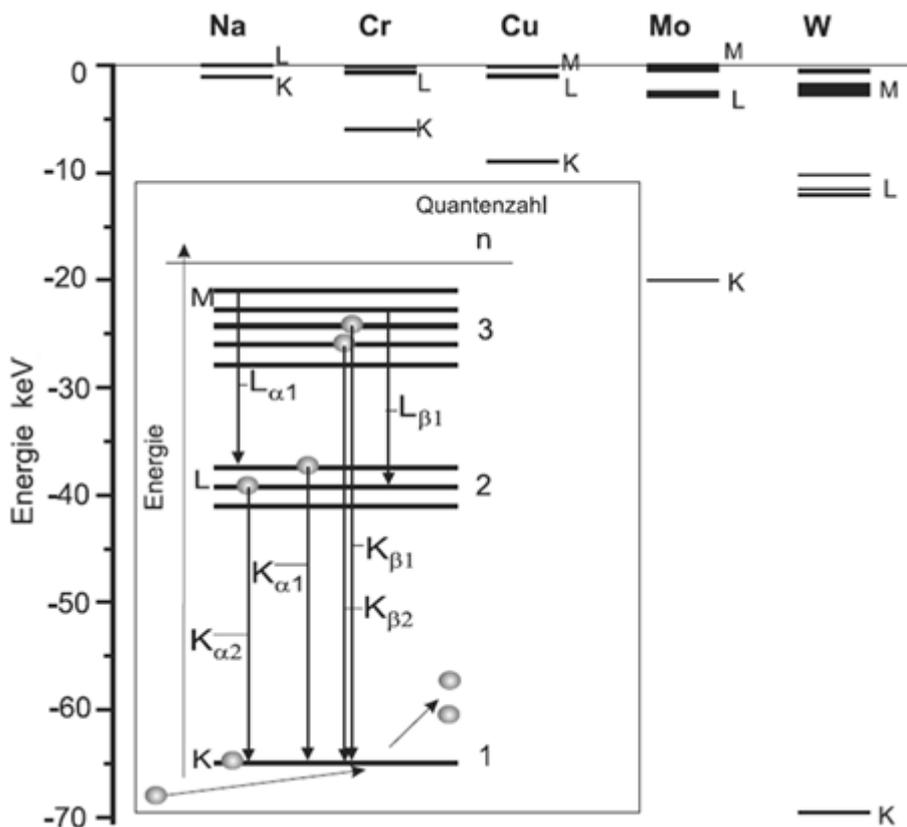


Abbildung 6: Energieniveaus charakteristischer Röntgenstrahlung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 13 (leicht modifiziert).

Die K-Strahlung, also der Übergang eines Elektrons in die K-Schale, ist diejenige Strahlung, welche für die Röntgenbeugung eingesetzt wird, da sie die energiereichste Strahlung darstellt. Um die K-Strahlung zu erreichen, muss die Röntgenröhre mit einer bestimmten Spannung betrieben werden, welche aus nachfolgender Formel berechnet wird.¹²

$$U_{ch} = \frac{1,2398}{\lambda_K} \quad (1.3) \quad \begin{matrix} U_{ch}/V & \text{Anregespannung} \\ \lambda_K/m & \text{Absorptionskante} \end{matrix}$$

Die Absorptionskante bezieht sich auf die Wellenlänge beziehungsweise Energie, die notwendig ist, um ein Elektron aus der K-Schale zu lösen. Dieser Wert ist abhängig vom Anodenmaterial.

¹¹ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 10 ff.

¹² Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 14.

2.1.3 Proben im Röntgenstrahl

Trifft der Röntgenstrahl auf Materie, so entstehen verschiedenste Effekte, welche die Intensität und Energie der Strahlung beeinflussen. Zu diesen Effekten zählen die Abschwächung, die sogenannte Absorption, die Streuung und das Durchdringen des Materials. Diese Effekte sind in Abbildung 7 ersichtlich. Der eintretende Röntgenstrahl mit der Eingangsintensität I_0 wird abgeschwächt zu einer Strahlung mit der Intensität I , welche die Materie durchdringt. Des Weiteren wird die Eingangsintensität teilweise in Streustrahlung, welche sich in alle Richtungen ausbreitet, mit der Intensität I_s umgewandelt. Eine wichtige Rolle bei diesen Effekten spielen die Dicke, die Dichte sowie der Massenabsorptionskoeffizient der Probe.¹³

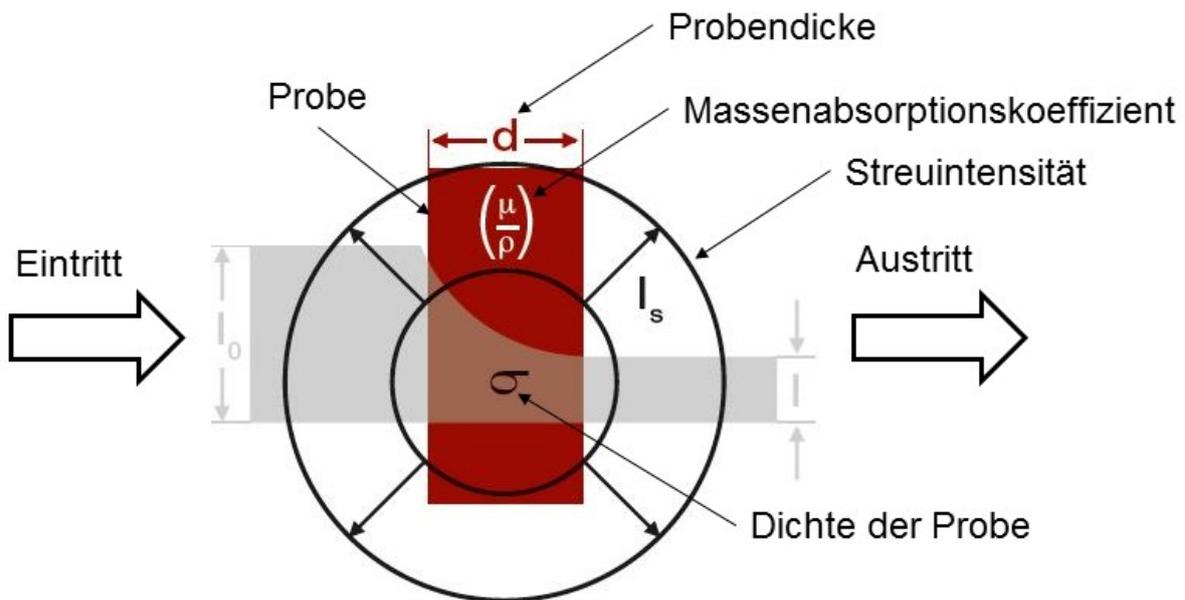


Abbildung 7: Verhalten von Röntgenstrahlung bei Auftreffen auf Materie, Quelle: Schnablegger/Singh (2013), S 17 (leicht modifiziert).

Die Ausgangsintensität I kann aufgrund folgender Formel berechnet werden:

$$I = I_0 e^{-\mu d} \quad (1.4)$$

I	I_0	μ	d	//	Impulse pro Sekunde	Ausgangsintensität
d/m	d/m	μ/m^{-1}	d/m	/	Impulse pro Sekunde	Eingangsintensität
					Absorptionskoeffizient	Probendicke

Die Intensität ist definiert als Anzahl der Photonen, welche während einer bestimmten Zeit auf die Detektorfläche treffen. Da die Fläche des Detektors, während der Messung, eine Konstante ist wird diese vernachlässigt, somit ergibt sich die Einheit Photonen pro Zeiteinheit. Im Detektor erzeugt jedes Photon einen Impuls dadurch ergibt sich die Einheit Impulse pro Sekunde oder auch cps (counts per second), dabei wird mit einer monochromatischen Strahlung gearbeitet.

Absorption und Streuung sind die beiden bedeutendsten Effekte und werden im Folgenden näher behandelt.

¹³ Vgl. Schnablegger/Singh (2013), S. 16 ff.

- **Absorption**

Beim Absorptionsvorgang wird durch die Bestrahlung eines Atoms mit Röntgenphotonen ein Elektron herausgelöst, dabei wird das Photon absorbiert. Aufgrund dessen befindet sich das Atom in einer unstabilen Lage, da ein Elektron fehlt, und will zurück zu einem stabilen Zustand. Um dies zu erreichen, erfolgt eine Neuausrichtung der verbliebenen Elektronen, um den Verlust zu kompensieren. Bei diesem Vorgang wird Röntgenstrahlung abgegeben, welche eine andere Wellenlänge als die eintretende Strahlung besitzt. Der Massenabsorptionskoeffizient (μ/ρ) klassifiziert für das jeweilige Material die Absorptionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Wellenlänge der Röntgenstrahlung und dem Material der Probe, wobei μ der Absorptionskoeffizient und ρ die Dichte des Materials sind. Bei Messungen in Transmission, das heißt, der Röntgenstrahl geht durch die Probe, sollte die Absorption so gering wie möglich gehalten werden, um eine gute Datenqualität der gestreuten Strahlung zu erreichen. Deshalb wird aufgrund des Absorptionskoeffizienten die optimale Probendicke d_{opt} laut Formel 1.3 bestimmt.¹⁴

$$d_{opt} = \frac{1}{\mu} \quad (1.5) \quad d_{opt}/m \quad \text{optimale Probendicke}$$

- **Streuung**

Unter Streuung versteht man das Ablenken des Röntgenstrahls bei Auftreffen auf Materie. Die Streuung erfolgt immer an den Elektronen des Atoms. Es kann zwischen zwei Streueffekten unterschieden werden, der Compton Streuung oder inelastischen Streuung und die Rayleigh- und Thompson-Streuung oder elastischen Streuung.¹⁵

Bei der Compton Streuung besitzt die gestreute Welle, auch Sekundärwelle genannt, eine andere Wellenlänge als die einfallende Welle, auch Primärwelle. Das einfallende Photon gibt einen Teil der Energie an das Elektron ab. Aufgrund der unterschiedlichen Wellenlängen kann aus dieser Streuung keine Strukturinformation über die Probe gewonnen werden, deshalb trägt sie nur zur hier nutzlosen Hintergrundstrahlung bei.¹⁶

¹⁴ Vgl. Schnablegger/Singh (2013), S 17 f.

¹⁵ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 19 ff.

¹⁶ Vgl. Schnablegger/Singh (2013), S. 18 f.

In Abbildung 7 ist der Massenabschwächungskoeffizient, eine materialabhängige Größe, als Funktion der Photonenenergie aufgetragen. Es lässt sich erkennen, dass bei niedrigeren Energien die Abschwächungskoeffizienten sehr unterschiedlich sind, bei großen Energien sich in ihrem Absorptionsverhalten allerdings angleichen. Daraus lässt sich erkennen, dass niederenergetische Strahlung stärkere Auswirkung auf den Körper hat.

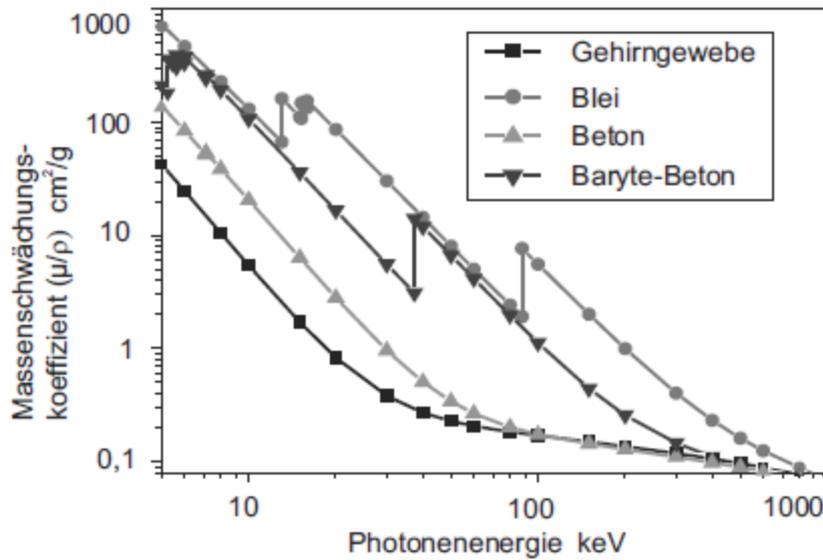


Abbildung 9: Massenabschwächungskoeffizient als Funktion der Photonenenergie, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 32 (leicht modifiziert).

Grenzwerte für Strahlung sind im Atomenergiewgesetz sowie in der Röntgen- und Strahlenschutzverordnung enthalten. Unterhalb dieser Grenzwerte treten keine deterministischen Schäden auf. Für Personen, welche beruflich mit Strahlung arbeiten, gilt deshalb ein maximaler Schwellwert von 20 mSv/Jahr.

2.2 Röntgendetektion

Um Röntgenstrahlung zu detektieren beziehungsweise die Ergebnisse der Röntgenstrukturanalyse auszuwerten, stehen verschiedene Verfahren zur Auswahl, welche in diesem Kapitel näher erläutert werden. Alle Verfahren nutzen das Auftreten freier Elektronen aufgrund der Kollision mit einem Röntgenphoton, welches absorbiert wird¹⁹.

2.2.1 Verfahren

- **Chemische Prozesse**

Zur Detektion werden Röntgenfilme benutzt, welche in ihrer Filmschicht Silberbromidkristalle besitzen. Trifft Röntgenstrahlung auf die Filmschicht, wird aufgrund der Umwandlung des Bromids ein Elektron frei, welches mit dem Silberion reagiert. Dadurch tritt im Röntgenfilm eine Störung auf, die sogenannte latente Schwärzung. Die Auswertung erfolgt durch den fotochemischen Prozess, das heißt, durch die Entwicklung der Röntgenfilme. Durch verschiedene Schichten und Dicken des Röntgenfilms können die Empfindlichkeit und die Auflösung angepasst werden. Als Beispiel hierfür ist die Körnung der Silberbromid Kristalle zu nennen, welche einen wesentlichen Einfluss auf die Auflösung hat. Ein Röntgenfilm besteht aus einer Trägerschicht, meist eine Kunststoffschicht, darauf wird eine Haftschrift aufgebracht und darüber befindet sich die röntgenempfindliche Schicht, auch Emulsionsschicht, welche die Kristalle beinhaltet. Als Schutz ist darüber noch eine Schicht aus gehärteter Gelatine aufgebracht. Die Filme werden für Röntgenstrahlung doppelt ausgeführt, da diese die Materialien stärker durchdringt, was zusätzlich die Empfindlichkeit verdoppelt (siehe Abbildung 10).²⁰



Abbildung 10: Aufbau eines Röntgenfilms, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 28.

¹⁹ Vgl. Schnablegger/Singh (2013), S. 19.

²⁰ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009) S. 27 f.

• **Ionisation von Gasen**

Um eine Ionisation von Gasatomen zu ermöglichen, sind Energien zwischen 3eV bis 40eV nötig, abhängig vom Gas. Trifft die Röntgenstrahlung auf ein definiertes Gasvolumen werden eine bestimmte Anzahl n von Gasatomen ionisiert. Dies kann durch folgende Gleichung angenähert werden:

$$n \approx \frac{hf}{E_i} \quad (1.6)$$

f/Hz Frequenz der Röntgenstrahlung
E_i/eV Ionisationsenergie
n Anzahl ionisierter Gasatome

Aufgrund des Fotoeffekts erfolgt die Bildung der Gasionen, dadurch entstehen Elektronen-Ionen-Paare. Das Elektron nimmt dabei die Energiedifferenz zwischen Strahlungsenergie und Ionisationsenergie als kinetische Energie auf. Es ermöglicht dem Elektron damit weitere Elektronen-Ionen-Paare zu bilden, und aufgrund der so entstehenden Wechselwirkung kommt es zu einer großen Anzahl von Elektronen-Ionen-Paaren, deren Anzahl proportional der absorbierten Strahlungsenergie ist. Durch Anlegen einer Hochspannung kommt es zur Trennung der Ionen und Elektronen und es beginnt ein Strom zu fließen, von dessen Stärke auf die Anzahl der ionisierten Atome rückgeschlossen werden kann.²¹

• **Lumineszenz**

Bei diesem Verfahren wird ein Szintillationszähler genutzt, hierbei werden Lichtblitze erzeugt und der fotoelektrische Effekt genutzt. Er besteht aus bestimmten Kristallen, wie zum Beispiel Natriumjodidkristallen, welche die hochenergetische Röntgenstrahlung in sichtbares Licht, das heißt, in niedrig energetische Strahlung, umwandeln können. In Abbildung 11 ist der schematische Aufbau eines Szintillationsdetektors mit Fotoelektronenvervielfacher dargestellt. Das abgegebene sichtbare Licht wird über einen Lichtleiter auf eine Fotokathode weitergeleitet, dabei werden Fotoelektronen generiert. Im Elektronenvervielfacher wird dieses Signal verstärkt und an der letzten Verstärkungsstufe wird der Spannungsimpuls abgenommen, von dem man auf Wellenlänge und Energie der Eingangsstrahlung schließen kann.²²

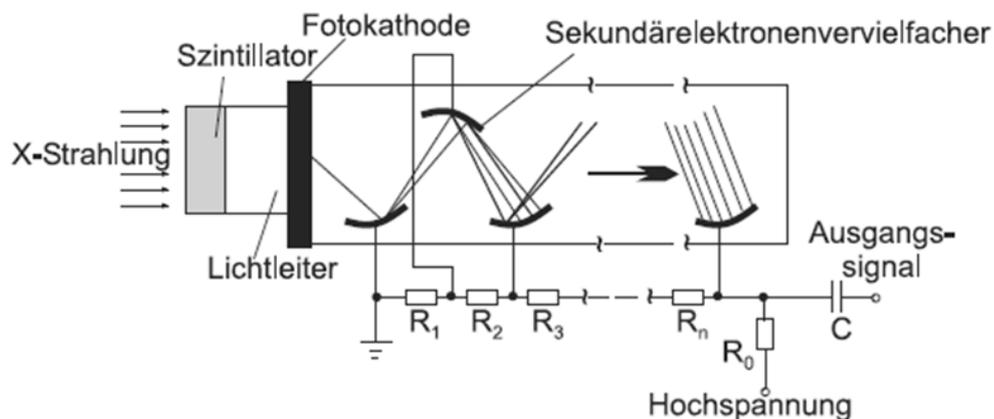


Abbildung 11: Aufbau eines Szintillationsdetektors mit Auswerteeinheit, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 131.

²¹ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 29.

²² Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 130 f.

- **Halbleiterdetektoren**

Dabei werden große Halbleiterdioden, Querschnittsflächen mit mehreren Quadratcentimetern, in Sperrichtung mit einer Spannung von bis zu 5000V betrieben. Wichtig bei diesem Verfahren ist eine gute Kühlung, da ansonsten starkes Rauschen auftritt. Das Prinzip beruht darauf, dass der Halbleiter die Röntgenstrahlung absorbiert und Ladungsträgerpaare erzeugt. Die dabei benötigte Energie der Strahlung liegt bei nur 3eV und damit unter den meisten der anderen Verfahren, und zusätzlich werden hier noch die meisten Ladungsträger erzeugt. Diese fließen aufgrund der angelegten Gleichspannung an die jeweiligen Elektroden und es wird ein Stromimpuls erzeugt, welcher zur Strahlungsenergie proportional ist. Das Verfahren, mit Halbleitern Ladungsträger zu erzeugen und somit Röntgenstrahlung zu detektieren, bietet erhebliche Vorteile gegenüber den bereits aufgezählten Möglichkeiten, hat aber den großen Nachteil des Kühlens, welches am besten mittels flüssigem Stickstoff erfolgt.²³

2.2.2 Grundtypen von Röntgendetektoren

Man unterscheidet bei Röntgendetektoren 3 Grundtypen, das sind Punktdetektoren, Liniendetektoren und Flächendetektoren. Punktdetektoren können nur einen begrenzten Bereich gleichzeitig auswerten, das heißt, sie messen nur die Intensität eines der gestreuten Strahlen in Abhängigkeit des Beugungswinkels. Um gleichzeitig einen ganzen Winkelbereich analysieren zu können, werden Liniendetektoren verwendet. Bei diesen wird eine Lokalisierung des Strahls ermöglicht, da die Detektorfläche entlang einer Linie erweitert wird. Die dritte Art ist der Flächendetektor, als Beispiel wäre hier der einfache Röntgenfilm zu nennen. In elektronischer Form ist er meist aus einem Array von Halbleitern oder Zählröhren aufgebaut.²⁴ Die Detektorarten, welche in einem Röntgenstrukturanalysegerät eingesetzt werden, werden nachfolgend im Kapitel 3.7 ausführlicher betrachtet.

²³ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 132 f.

²⁴ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 128.

2.3 Kristallographische Grundlagen

Mit Hilfe der Röntgenbeugung werden Parameter wie zum Beispiel Kristallgröße, Gitterparameter und Zusammensetzung analysiert, deshalb ist es wichtig, einige grundlegende Begriffe und Zusammenhänge der Kristallographie zu kennen, um das Messprinzip besser zu verstehen.

2.3.1 Kristall und Kristallstruktur

Grundsätzlich versteht man unter einem Kristall einen kristallinen Festkörper, allerdings ist nicht jeder Festkörper kristallin. Das entscheidende Kriterium ist die periodische Anordnung von Molekülen oder Atomen im Raum. Diese Periodizität ist theoretisch gesehen unendlich, in der Praxis besteht diese aus $\sim 10^3$ bis $\sim 10^{20}$ im dreidimensionalen Raum periodisch angeordneten Molekülen, aufgrund von Defekten oder Verunreinigungen im Gitter. Als Beispiel für einen nicht kristallinen Festkörper wäre Glas zu nennen, welches keine weitreichende periodische Anordnung seiner Moleküle besitzt und somit einen amorphen Festkörper darstellt.²⁵

Als Kristallstruktur wird die regelmäßige Verteilung der Moleküle und Atome bezeichnet, diese wird durch ein Kristallgitter beschrieben. Dieses dient dem Zweck, die Darstellung des Aufbaus eines Kristalls zu vereinfachen. Um ein Kristallgitter zu erhalten, wird im Kristall nach der periodischen sich wiederholenden Struktur, auch Basis genannt, gesucht und diese durch einen Punkt ersetzt. Verbindet man diese Punkte miteinander erhält man das Kristallgitter eines kristallinen Festkörpers.²⁶ In Abbildung 12 ist dies als zweidimensionaler Vorgang abgebildet. Es wird auch gezeigt, dass es verschiedene Möglichkeiten gibt, das Kristallgitter zu platzieren.

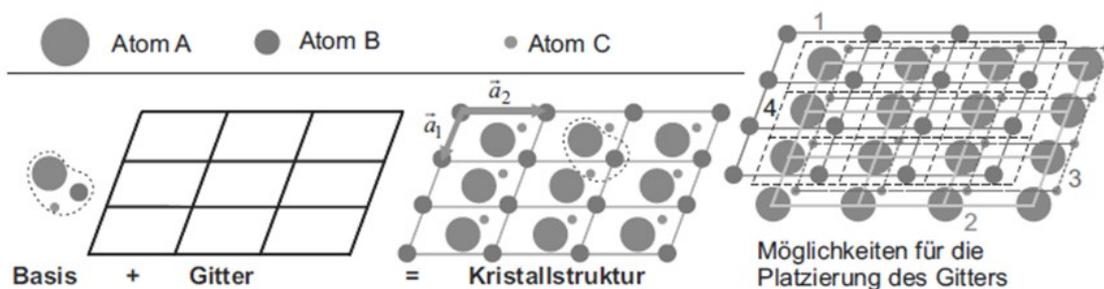


Abbildung 12: Aufbau eines Kristallgitters und dessen Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 42.

²⁵ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 1 ff.

²⁶ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 41.

2.3.2 Elementarzelle

Aus Abbildung 13 lässt sich nun auch erkennen, dass das Gitter einzelne Flächen mit den Vektoren a und b aufspannt. Diese Flächen bilden die Grundstruktur des Kristallgitters und wiederholen sich immer wieder. Im dreidimensionalen Raum wird noch ein dritter Vektor c benötigt, um ein sich wiederholendes Element aufspannen zu können. Diese Grundelemente, welche sich im Kristall periodisch wiederholen, werden Elementarzellen genannt (siehe Abbildung 13). Als primitive Elementarzelle wird sie bezeichnet, wenn sie nur an ihren Eckpunkten Gitterpunkte besitzt. Neben den Längenvektoren a beschreiben noch die drei Winkel zwischen den Vektoren die Elementarzelle, welche zusammen genommen als Gitterparameter bezeichnet werden. Die Positionen q der in der Elementarzelle befindlichen Moleküle oder Atome kann nun mit Hilfe der folgenden Gleichung bestimmt werden, wobei u , v und w ganzzahlig sind:²⁷

$$q = ua + vb + wc \quad (1.7) \quad q \quad \text{Positionsvektor}$$

Sind die drei ganzzahligen Konstanten u , v und w null befindet man sich im Ursprung des Koordinatensystems a , b und c . Anstatt dieser Kennzeichnung ist auch oft die Form a_1 , a_2 und a_3 für die Gittervektoren zu finden.

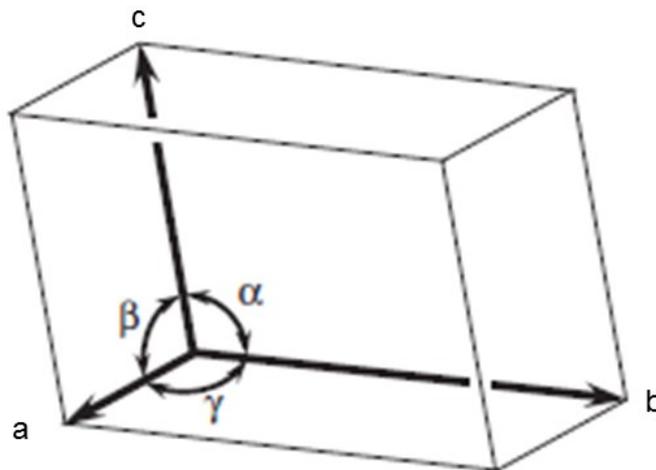


Abbildung 13: Aufbau einer Elementarzelle, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 7.

Alle sinnvoll möglichen Elementarzellen und damit Kristallgitter wurden von Bravais dargestellt, diese werden als Bravais-Gitter bezeichnet. Mit Hilfe dieser 14 Gitter können alle Kristallstrukturen beschrieben werden (siehe Anhang 1).

²⁷ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 7.

2.3.3 Kristallaufbau

Unter dem Begriff Kristallaufbau sollen nun die Begriffe Kristallebene, Ausrichtung der Ebene und die Miller-Indizes näher betrachtet werden.

Kristallebenen dienen der vereinfachten Visualisierung und zum Verständnis der Beugung an Kristallgittern, sie existieren in Wirklichkeit allerdings nicht. Meist werden nur ein bis zwei Kristallebenen in einem idealen Kristall betrachtet, es sind aber theoretisch unendlich viele parallele Ebenen vorhanden aufgrund der Vervielfachung der Elementarzelle. Definiert sind die Kristallebenen so, dass sie den Kristall an den Gitterpunkten aufteilen. Eine Gruppe von Kristallebenen ist parallel zueinander und in gleichmäßigem Abstand verteilt, dieser Ebenenabstand wird als d -Abstand bezeichnet. Bestimmt werden die Ebenen durch den Miller-Index, welcher besagt, dass die Gittervektoren a , b und c in gleichmäßig verteilte Abstände h , k und l unterteilt werden. Die Miller-Indizes h , k und l , mit der Schreibweise $(h\ k\ l)$, sind ganzzahlige Konstanten, welche die Lage der Kristallebenen zum Koordinatensystem der Elementarzelle beschreiben. Sind Kristallebenen mit negativem Abstand zu dem Koordinatensystem vorhanden, so wird über dem jeweiligen Miller-Index ein Querstrich gesetzt. Ist die Lage parallel zu einem Gittervektor so wird der Index gleich null gesetzt. Dies lässt sich in Abbildung 14 erkennen, die Ebene ist parallel zu b und c , daraus folgt das k und l gleich null sind. Wird der Gittervektor a halbiert, wie in der linken Ansicht zu erkennen, so wird der Wert für h auf 2 gesetzt.²⁸

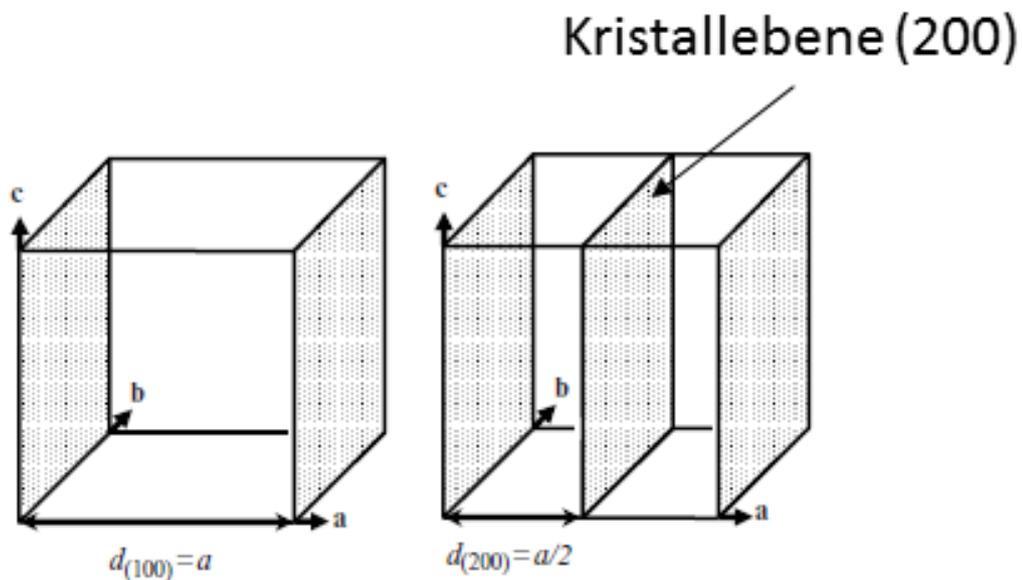


Abbildung 14: Anwendung des Miller-Index, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 8 (leicht modifiziert).

²⁸ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 8 ff.

Sind alle Winkel der Elementarzelle gleich 90° , so kann die Abhängigkeit des Abstands zwischen den Ebenen vom Miller-Index mit folgender Gleichung berechnet werden:

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}} \quad (1.8) \quad d_{hkl}/m \quad \text{Kristallebenenabstand}$$

Beträgt der Winkel ungleich 90° so muss dies in die Gleichung mit einfließen. Ist γ gleich 120° , so muss ein vierter Index eingeführt werden, aufgrund der Möglichkeiten des Aufbaus der Einheitszelle.²⁹

Richtungen im Kristallgitter werden mit einer Linie vom Ursprung gekennzeichnet, die durch einen Eckpunkt der Elementarzelle verlaufen. Durch die theoretische unendliche periodische Wiederholung der Elementarzelle, wird die Linie immer wieder durch dieselben Punkte gehen (siehe Abbildung 15). Um zwischen Richtungen und Abstand unterscheiden zu können werden die Richtungsinformationen in eckige Klammern gesetzt.³⁰

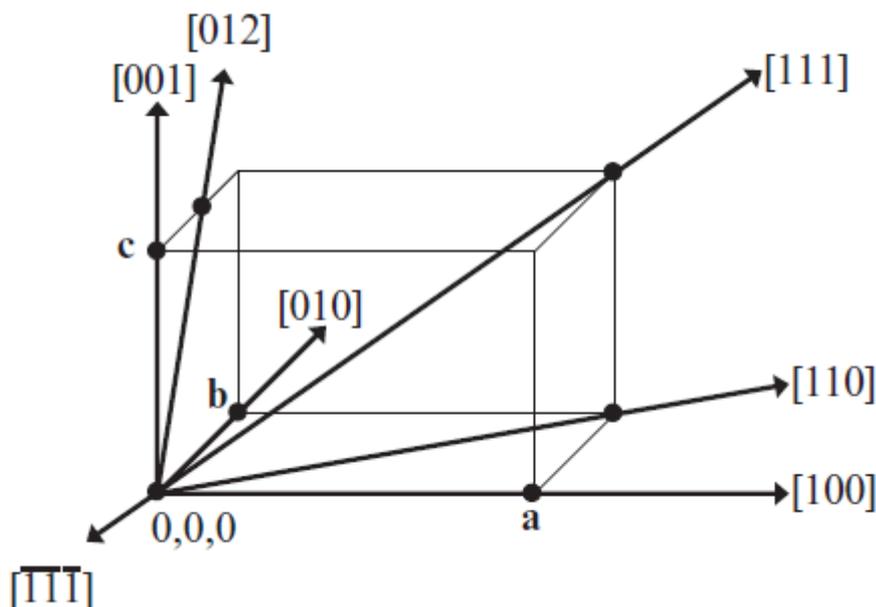


Abbildung 15: Darstellung der Richtungen in einem Kristallgitter, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 11.

2.3.4 Reziprokes Gitter

Darunter wird ein zweites Gitter verstanden, welches reziprok zum ursprünglichen Gitter der Elementarzelle ist. Aufgebaut wird das reziproke Gitter, in dem ein Vektorprodukt aus a und b , b und c sowie aus c und a gebildet wird. Der dabei berechnete Vektor steht senkrecht auf die Fläche den die beiden Grundvektoren aufspannen und seine Länge entspricht der aufgespannten Fläche. Daraus folgt, dass Kristallebenen im realen Gitter als Punkte am Ende eines Vektors im reziproken Gitter dargestellt werden. Das heißt, im realen Raum können sich die Atome in einer beliebigen Position in der

²⁹ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 10.

³⁰ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 11.

Elementarzelle befinden, in einem Diffraktogramm werden diese durch Punkte im reziproken Gitter repräsentiert und die Elementarzelle an sich ist leer (siehe Abbildung 16).³¹

Die Umrechnung der Vektoren in das reziproke Gitter erfolgt laut folgenden Gleichungen:

$$a^* = \frac{b \times c}{V}, \quad b^* = \frac{a \times c}{V}, \quad c^* = \frac{a \times b}{V} \quad (1.9) \quad V/m^3 \text{ Elementarzellenvolumen}$$

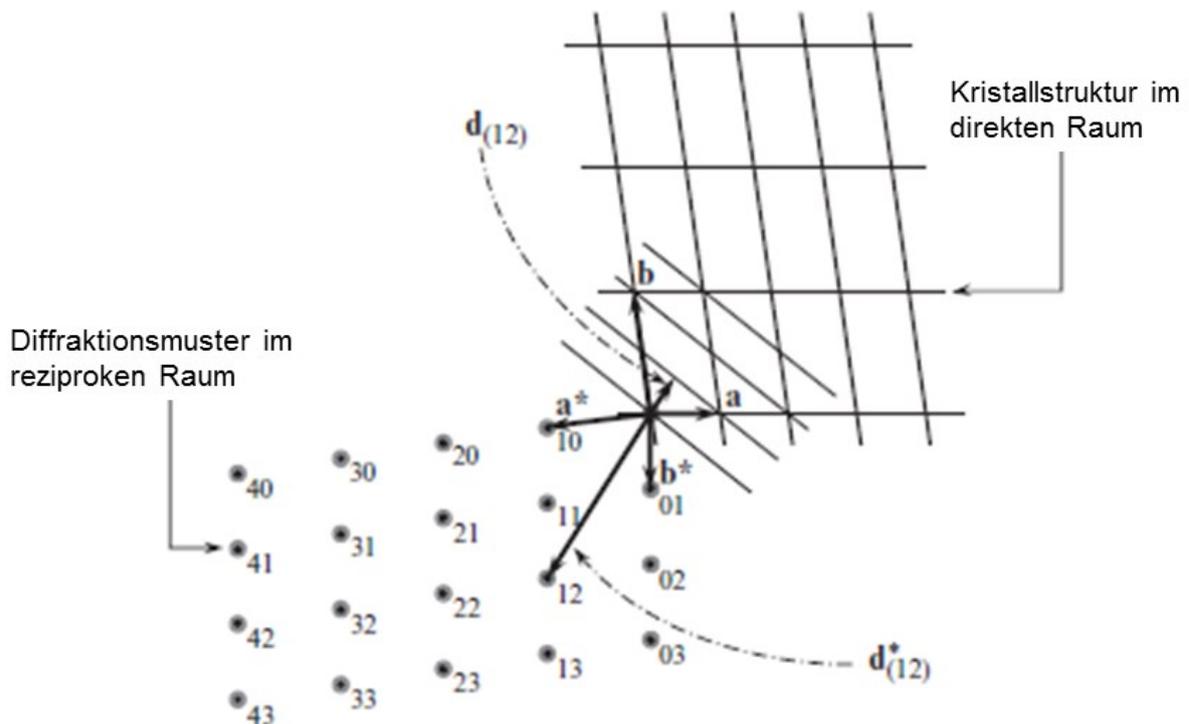


Abbildung 16: Konvertierung eines realen Gitters in ein reziprokes Gitter, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 13 (leicht modifiziert).

Daraus folgt, dass der Punkt am Ende des Vektors a^* die Kristallebene (100) im dreidimensionalen Raum repräsentiert und jeder Punkt im reziproken Gitter den Abstand und die Richtung der Kristallebene beschreiben kann³². Vereinfacht lässt sich zum reziproken Gitter sagen, dass es sich hierbei um eine mathematische Vereinfachung zur besseren Visualisierung und Beschreibung von Kristallen in einem Diffraktogramm handelt.

2.4 Beugung und ihre Darstellung

2.4.1 Streuung und Beugung

Die Differenzierung zwischen Beugung und Streuung ist jene, dass es sich bei der Beugung um Streuung an periodischen Strukturen handelt. Das heißt, die Streuung an den periodischen Strukturen des Kristalls wird vereinfacht als Beugung bezeichnet.³³

³¹ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 11 ff.

³² Vgl. Waseda/Matsuraba/Shinoda (2011), S. 169 ff.

³³ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 73 f.

2.4.2 Bragg'sches Gesetz

Aufgrund des periodischen Aufbaus eines Kristalls und der kohärenten Röntgenstrahlung entstehen konstruktive Interferenzen nur bei bestimmten Winkeln, welche durch das Bragg'sche Gesetz beschrieben werden. Der Kristall kann als ein dreidimensionales Gitter betrachtet werden, welches einen Gitterabstand von wenigen Nanometern besitzt. Beim Bestrahlen mit einem Röntgenstrahl einer bestimmten Wellenlänge λ treten nur dann Beugungseffekte auf, wenn Wellenlänge und Glanzwinkel mit dem Abstand der Kristallebenen laut Bragg'schem Gesetz übereinstimmen.³⁴

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1.10)$$

d/m	Kristallebenenabstand
$\theta/^\circ$	Glanzwinkel
n	Ordnung der Interferenz

In der folgenden Abbildung werden die Zusammenhänge des Bragg'schen Gesetzes erläutert. Besitzt der Kristall eine Vielzahl parallel zur Oberfläche angeordnete Ebenen im Abstand d_{hkl} kommt es bei einem Röntgenstrahl mit bestimmter Wellenlänge λ und Glanzwinkel θ zu einer Reflexion. Aus der Abbildung lässt sich erkennen, dass der Teilstrahl 2 gleich reflektiert wird wie der erste, jedoch einen weiteren Weg zurücklegen muss. Der Unterschied der Weglänge ist entscheidend, ob am Detektor eine Verstärkung der Wellen eintritt oder eine Auslöschung. Ist die längere Wegstrecke ein Vielfaches n der Wellenlänge, so tritt eine Verstärkung am Detektor auf, andernfalls kommt es nur zu einer schwachen Verstärkung oder zu einer Auslöschung. Konstruktive Interferenzen führen allerdings nur dann zu einer Verstärkung, wenn der Glanzwinkel laut Bragg'schem Gesetz eingehalten wird.³⁵

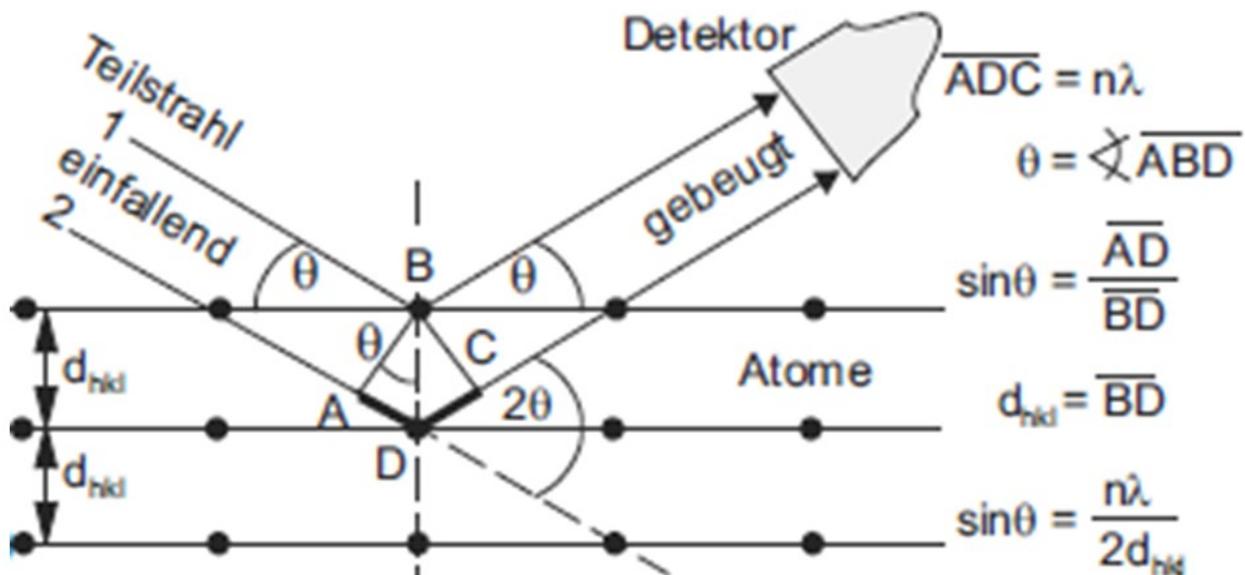


Abbildung 17: Grafische Veranschaulichung des Bragg'schen Gesetzes, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 90.

³⁴ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 22 f.

³⁵ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 90 f.

2.4.3 Ewald Sphäre

Die Ewald Sphäre ist eine weitere visuelle Darstellung der Beugungsbedingung und wird auch Ewald Konstruktion genannt. Dabei wird der einfallende Strahl durch den Vektor k_0 repräsentiert dessen Länge die inverse Wellenlänge beträgt und der als Wellenvektor bezeichnet wird. Geht man davon aus, dass es sich um elastische Streuung handelt, besitzt der gestreute Strahl dieselbe Wellenlänge und kann deshalb durch einen Vektor k_1 mit derselben Länge wie k_0 gezeichnet werden. Der Winkel zwischen den beiden beträgt laut Bragg'schem Gesetz 2θ . Diese beiden Vektoren werden nun in das reziproke Gitter gelegt, wobei das Ende von k_0 in den Ursprung des Gitters gelegt wird. Ewald leitet daraus ab, dass es nur zu einer Beugung kommen kann, wenn sich dabei das Ende des Vektors k_1 auf einem Gitterpunkt des reziproken Gitters befindet. Der Begriff Ewald Sphäre kommt dadurch zustande, dass beide Vektoren dieselbe Länge und den gleichen Ursprung haben. Diese Vektoren, k_0 und k_1 , beschreiben den Radius eines Kreises, beziehungsweise im dreidimensionalen Raum den Radius einer Kugel. Daraus folgt, wenn sich ein Punkt des reziproken Gitters auf der Ewald Sphäre befindet, ist die Beugungsbedingung erfüllt (siehe Abbildung 18).³⁶

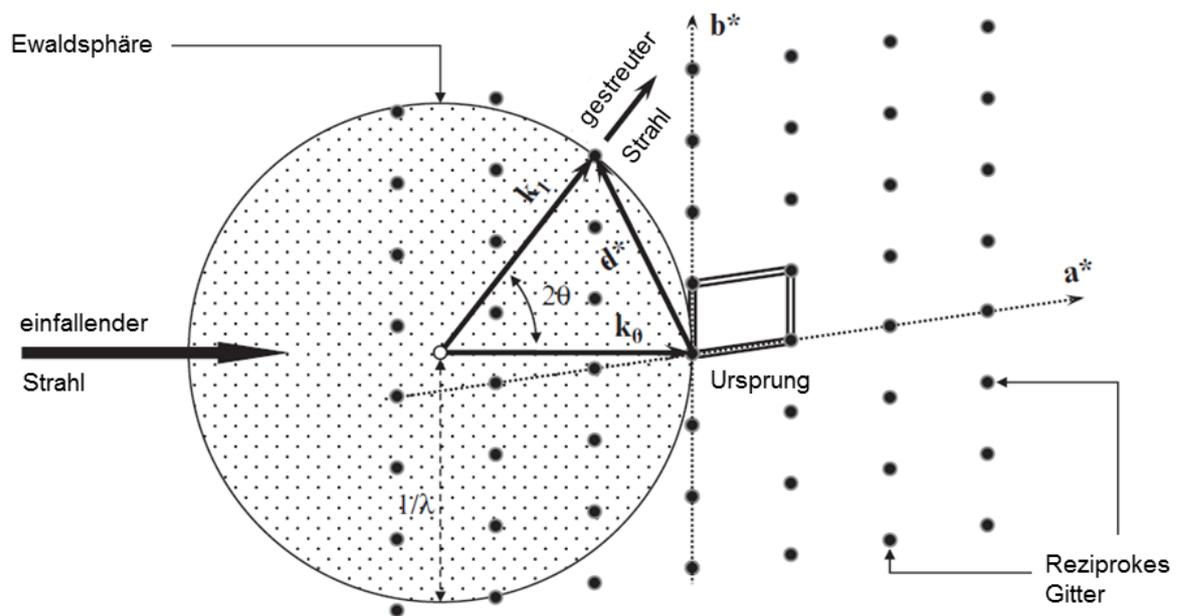


Abbildung 18: Aufbau der Ewald Sphäre, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 145 (leicht modifiziert).

³⁶ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 144 ff.

3 AUFBAU EINES DIFFRAKTOMETERS

3.1 Schematische Darstellung

Im folgenden Kapitel soll der mechanische Aufbau eines Diffraktometers mit all seinen Komponenten näher erörtert werden. Die folgende Abbildung zeigt den schematischen Gesamtaufbau und bezeichnet die Hauptkomponenten. Röntgenquelle und Detektor werden zueinander justiert, um den Glanzwinkel einzustellen. Die beiden Diffraktometerkreise, welche Quelle und Detektor tragen, können unabhängig voneinander bewegt werden.

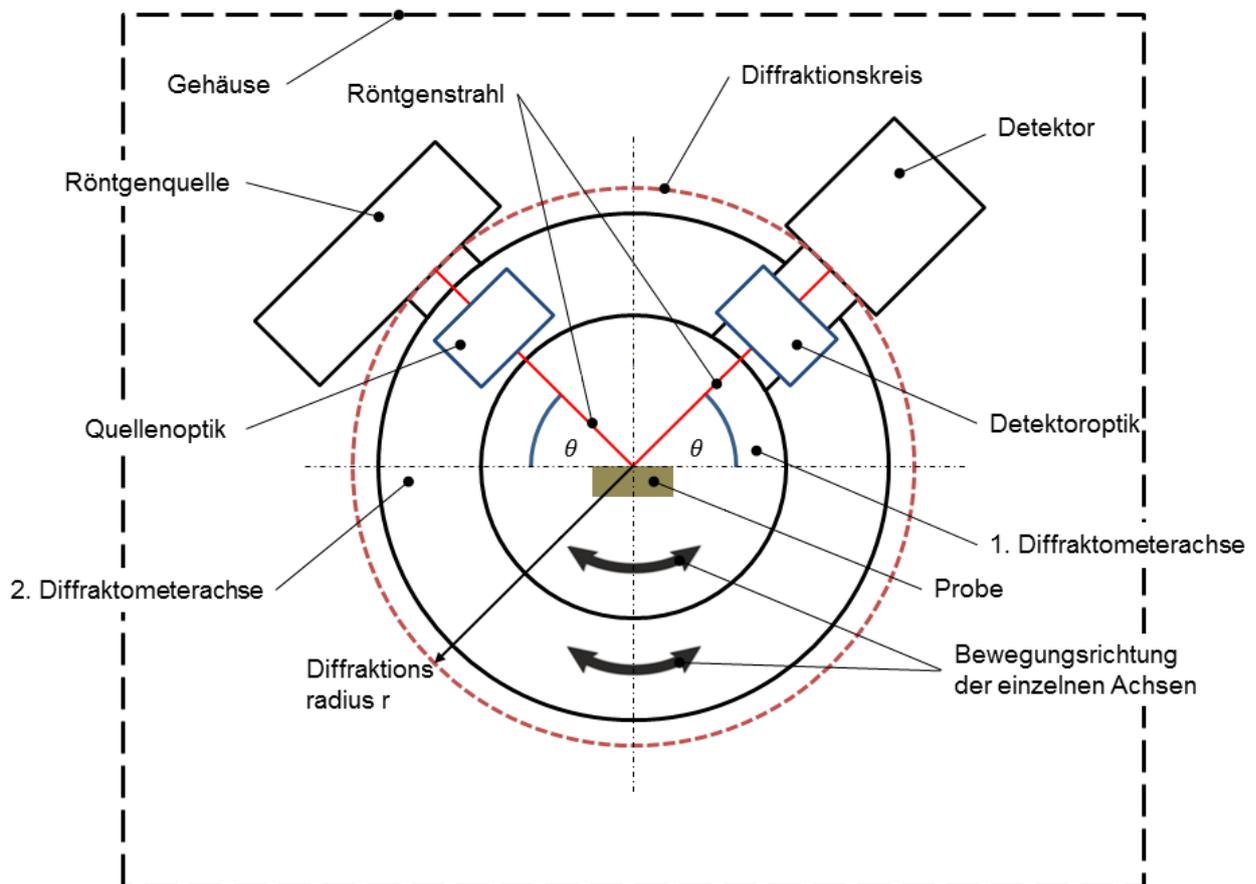


Abbildung 19: Schematische Darstellung eines Diffraktometers, Quelle: Eigene Darstellung.

3.2 Goniometer

Allgemein versteht man unter einem Goniometer eine Kinematik bei der man geometrischen Zugang zum Schnittpunkt der Rotationsachsen hat. In einem Diffraktometer ist die Aufgabe des Goniometers die beiden Diffraktometerachsen, das heißt Röntgenquelle und Detektor, zueinander auszurichten. Grundsätzlich wird zwischen einem Zwei-Kreis-Goniometer und einem Vier-Kreis-Goniometer unterschieden, wobei für den Namen die beweglichen Achsen in Bezug auf die Probe bestimmend sind. Diese Baugruppe bildet das Kernstück jedes Diffraktometers, da es für die genaue Verstellung der Röntgenquelle und des Detektors mit Bezug auf die Probe zuständig ist und somit direkt die Messung beeinflusst. Hier soll im Weiteren ein Zwei-Kreis-Goniometer näher betrachtet.

Die Hauptanforderungen an die Antriebseinheit sind ein möglichst großer Winkelbereich von 2θ ($\sim 170^\circ$), eine hohe Auflösung (kleiner gleich $0,001^\circ$), eine sehr gute Wiederholgenauigkeit, eine gute Langzeitstabilität und konstant niedrige Winkelgeschwindigkeiten von einigen Graden pro Minute über den gesamten Winkelbereich.³⁷

3.2.1 Aufbau

Ein Standard Diffraktometer besitzt ein Zwei-Kreis-Goniometer, mit zwei beweglichen Diffraktometerachsen (siehe Abbildung 19), welche die Röntgenquelle und den Detektor in einem bestimmten Abstand, dem Diffraktionsradius, um die Probe bewegen. Die Drehachse befindet sich dabei auf der Probenoberfläche, die Ausrichtung der Drehachse kann sowohl horizontal als auch vertikal sein, wobei hier besonders auf die Probenpräparierung zu achten ist. Eine horizontale Probe, zum Beispiel Pulver, kann einfacher aufgebracht werden als vertikal. Allerdings sind bei horizontaler Probe die Quelle und der Detektor vertikal was zumeist höhere Antriebsmomente benötigt.³⁸ In den meisten Diffraktometern ist die Anordnung der Probe horizontal, da dies vor allem im Bereich der Probenmanipulation, vor allem bei Pulvern, größere Vorteile bietet. Beide Drehachsen können sich unabhängig voneinander bewegen, um verschiedenste Messgeometrien zu realisieren. Der Antrieb jeder Achse erfolgt meist über Zahnräder oder Schneckengetriebe, welche eine enorm hohe Präzision aufweisen müssen, um die verschiedenen Anforderungen an Genauigkeit und Auflösung zu erfüllen. Ein besonderes Augenmerk ist auch auf die Messung des Winkels zu legen, da eine hohe Positionier- und Wiederholgenauigkeit erreicht werden müssen. Dabei sollte auch auf eine Langzeitstabilität geachtet werden und der Verschleiß von Bauteilen, welche die Genauigkeiten direkt beeinflussen, sollte vermieden beziehungsweise minimiert werden.

3.2.2 Bauformen

Man unterscheidet grundsätzlich zwei verschiedene Bauformen, die Theta-Theta Bauform und die Theta-Zwei-Theta Bauform, welche sich durch eine stillstehende beziehungsweise bewegliche Probe unterscheiden.

³⁷ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 148 ff.

³⁸ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 280 ff.

- **Theta-Theta-Goniometer**

Bei dieser Art ist die Probe feststehend und Detektor und Röntgenquelle bewegen sich um die Probe (Abbildung 20). Diese Bauform hat den Nachteil, dass die Röntgenquelle inklusiver aller Anschlusskabel und Kühlleitungen hoch präzise bewegt werden muss und dadurch vom Antrieb ein höheres Moment aufzubringen ist. Dies beeinflusst natürlich auch weitere Komponenten wie zum Beispiel die Lager des Goniometers und macht diese Konstruktion somit teuer. Der große Vorteil ist allerdings die Probenmanipulation. Wie schon im Vergleich der Ausrichtung der Drehachsen, kann auch hier die Probe einfacher aufgebracht werden.³⁹

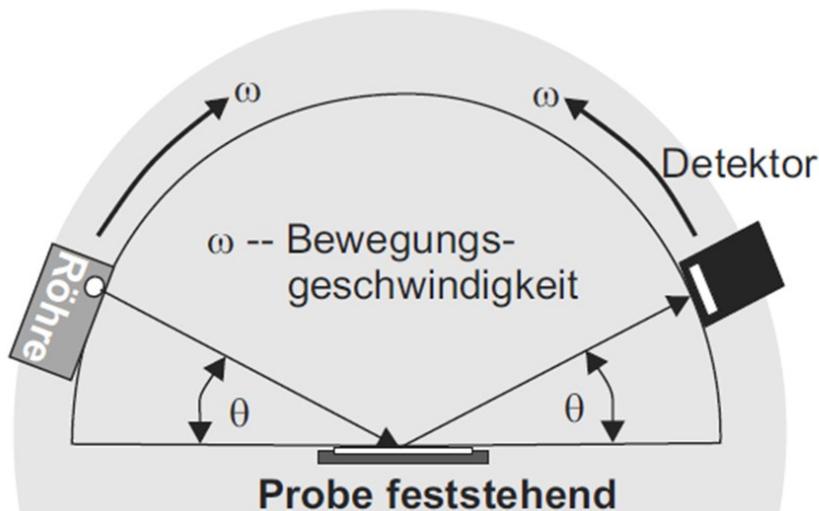


Abbildung 20: Theta-Theta-Goniometer, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 149.

- **Theta-Zwei-Theta-Goniometer**

In dieser Anordnung ist die Röntgenquelle fixiert. Um trotzdem in Reflexion verschiedene Winkel messen zu können, müssen sich hier die Probe und der Detektor bezüglich der Quelle bewegen (Abbildung 21).

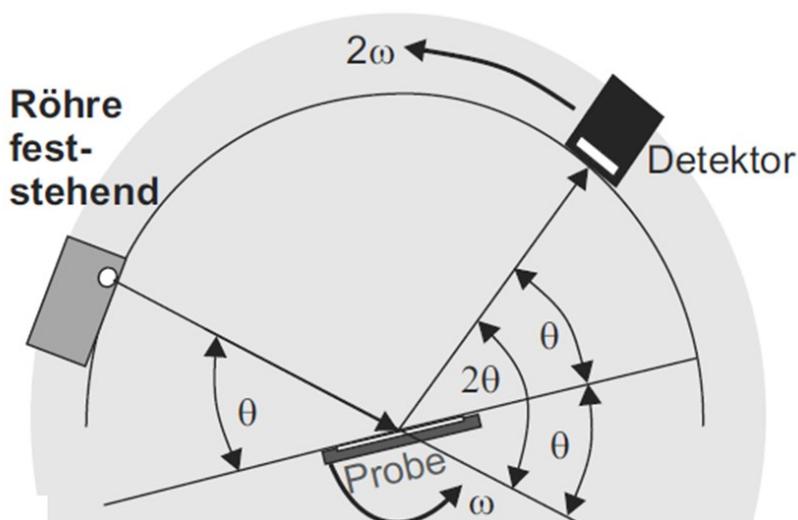


Abbildung 21: Theta-Zwei-Theta-Goniometer, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 149.

³⁹ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 148 ff.

3.3 Messgeometrien

Es werden drei Hauptmessgeometrien unterschieden, welche vor allem bei der Untersuchung von Pulverproben zur Anwendung kommen. Diese beiden Messgeometrien müssen von einem Standard-Diffraktometer in Bezug auf den Verfahrenweg der Achsen realisiert werden.

- **Reflexionsgeometrie**

Die Reflexionsgeometrie wird auch Bragg-Brentano-Geometrie genannt und findet am häufigsten bei Phasenanalysen Anwendung⁴⁰. Abbildung 22 zeigt eine typische Bragg-Brentano-Anordnung mit verschiedenen Blenden. Es ist erkennbar, dass man mit einem divergenten Röntgenstrahl arbeitet, der eine große Fläche der Probe beleuchtet. Eine flächenmäßig große Ausleuchtung der Probe ist auch nötig um bei polykristallinen Proben möglichst viele Kristalle anzustrahlen und damit genug Daten am Detektor zu erhalten. Die Eintrittsblende EB begrenzt den divergenten Strahl, um einen für die Probengröße optimalen Divergenzwinkel γ zu erhalten. Bei sehr kleinen Glanzwinkeln kann es hilfreich sein, eine weitere Blende (Probendivergenzblende PDB) nahe der Probe zu positionieren, um die bestrahlte Fläche möglichst auf die Probe zu begrenzen. Die Divergenz am Detektor wird durch die Divergenzblende DB bestimmt, die Streustrahlblende SB auf der Detektorseite hat die gleiche Funktion wie die Probendivergenzblende PDB.⁴¹

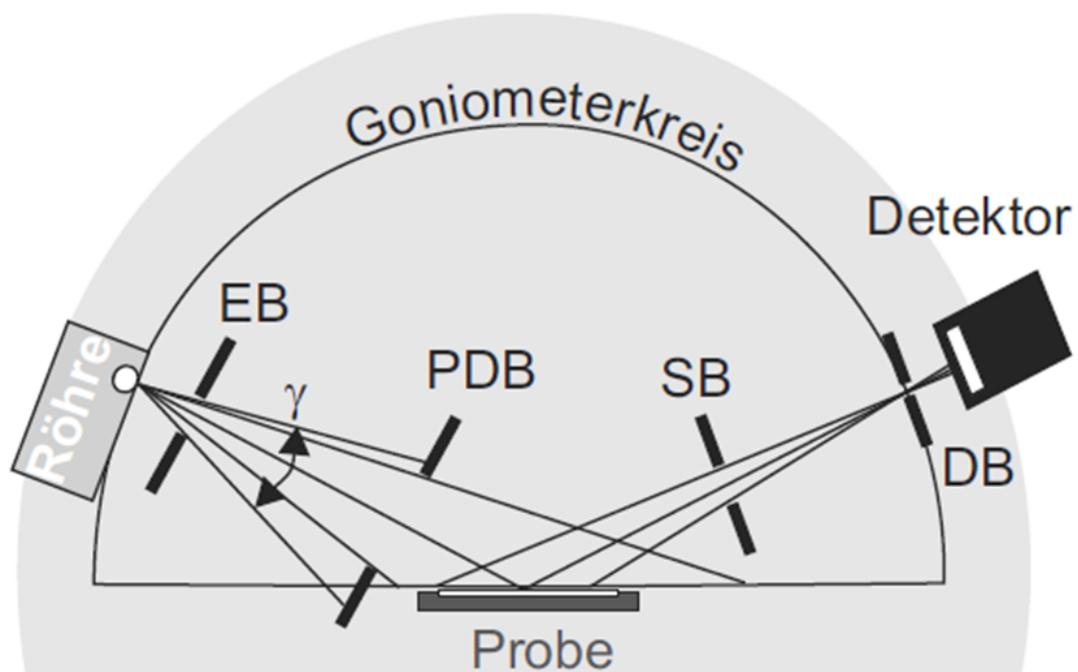


Abbildung 22: Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 159

Wie schon im Kapitel 2.4.2 beschrieben, erfolgt eine Reflexion nur, wenn das Bragg'sche Gesetz erfüllt ist, das heißt, die Kristallebenenormalen der Kristalle müssen normal zur Probenoberfläche stehen. Da bei einer polykristallinen Probe nur ein Teil der darin enthaltenen Kristalle zur Reflexion beiträgt, wird die

⁴⁰ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 30.

⁴¹ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 157 ff.

Probe möglichst komplett ausgeleuchtet. Dadurch gibt es beim auftreffenden, divergenten Strahl aber verschiedene Reflexionswinkel auf Grund der Ausdehnung des Strahls (siehe Abbildung 23). Durch diesen Effekt werden mehr Daten am Detektor generiert, da mehrere Kristalle mit ihren Kristallebenen zur Reflexion beitragen.⁴²

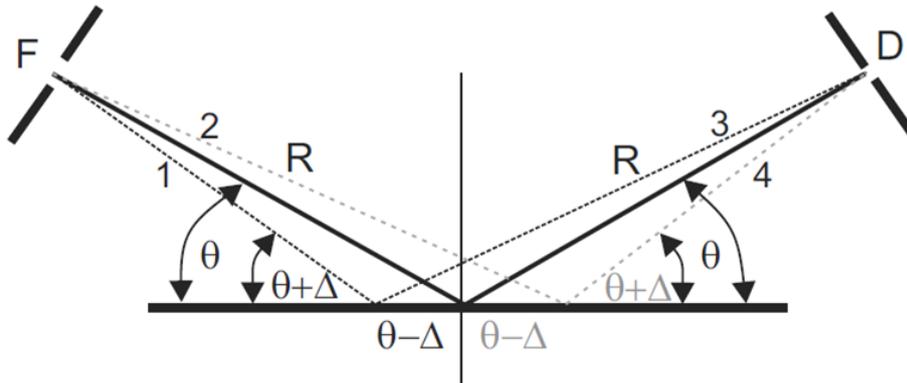


Abbildung 23: Glanzwinkel bei Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 157.

- **Transmissionsgeometrie**

Im Gegensatz zur Reflexionsgeometrie wird bei der Transmission ein fokussierter Strahl benötigt, dieser wird mittels eines fokussierenden Röntgenspiegels erreicht. Das Ziel der Transmission ist, die Probe mit dem Röntgenstrahl zu durchdringen, das heißt, die Probe muss durchlässig für Röntgenstrahlung sein. Beispiele dafür sind Pulver zwischen Folien, eine dünne Feststoffprobe oder eine flüssige Probe in einer Glaskapillare.⁴³

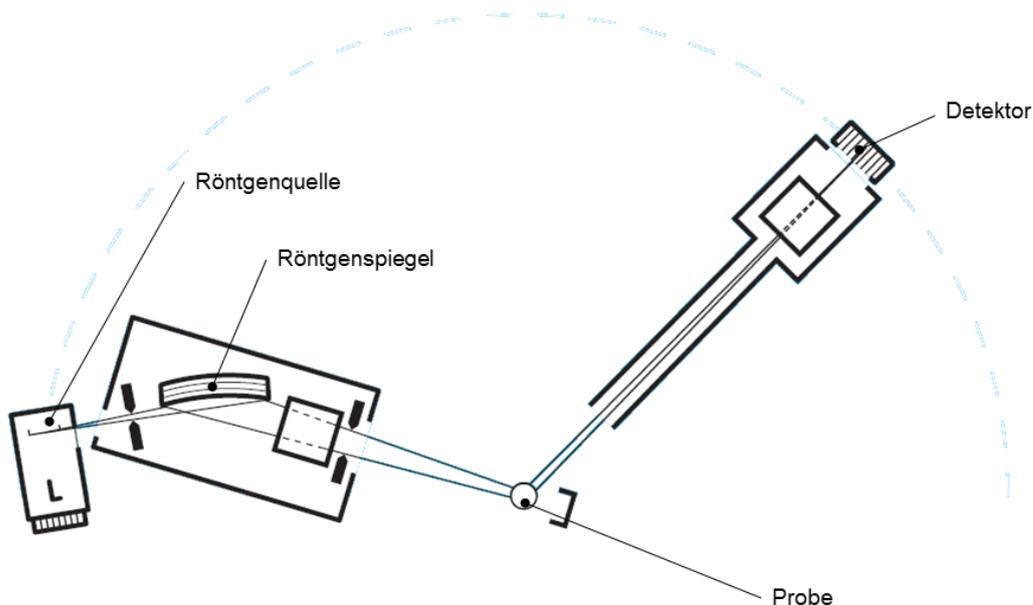


Abbildung 24: Transmissionsgeometrie mit Glaskapillare als Probe, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 32 (leicht modifiziert).

⁴² Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 157 ff.

⁴³ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 30 ff.

- **Parallelstrahlgeometrie**

Der parallele Strahl wird durch die Reflexion an einem Röntgenspiegel auf der einfallenden Seite erzeugt. Mit Hilfe eines Plattenkollimators vor dem Detektor werden alle divergenten Anteile, die durch Streuung an der Luft oder Fluoreszenz entstanden sind, entfernt. Der Vorteil dieser Methode ist, dass sich Fehler der Probenhöhe nicht mehr auf den Detektor auswirken.⁴⁴

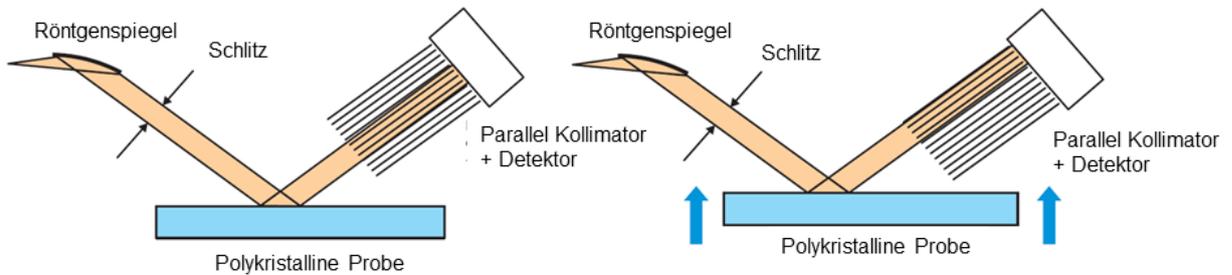


Abbildung 25: Einfluss der Probenhöhe (blaue Pfeile) bei Parallelstrahlgeometrie, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 32 (leicht modifiziert).

⁴⁴ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 32.

3.4 Röntgenquelle

Für die Diffraktion ist die Erzeugung der benötigten Röntgenstrahlung ein entscheidendes Kriterium. Dabei werden fast ausschließlich Röntgenröhren verwendet, diese bieten verschiedene Strahlgeometrien und können unterschiedlich aufgebaut sein. Die beiden Strahlgeometrien sind ein punktförmiger beziehungsweise eine linienförmiger Röntgenstrahl.

3.4.1 Aufbau

Hier soll anhand der folgenden Abbildung einer Stehanodenröntgenröhre der grundlegende Aufbau näher erklärt werden. Diese bestehen aus einem evakuierten Glaskörper und zwei Elektroden, der Anode und der Kathode. Die Kathode dient der Erzeugung der Elektronen und besteht wiederum aus einer Glühwendel und elektronenoptischen Komponenten zur Fokussierung der erzeugten Elektronen. Der Außenkörper muss den Elektroden mechanischen Halt bieten, geeignete, vakuumdichte aber für Röntgenstrahlung gut durchlässige Fenster bieten und zusätzlich noch die Anschlüsse für Hochspannung und Kühlwasser enthalten. Des Weiteren muss er eine hohe Hitzebeständigkeit aufweisen, weshalb er meist aus Glas oder Keramik gefertigt ist. Das Material des Kühlteils ist meist Kupfer oder Messing aufgrund der besseren Wärmeleitfähigkeit. Die Röntgenröhre muss für den Einsatz in einem Diffraktometer zusätzlich noch in ein strahlendichtes Gehäuse eingebaut werden, welches nur an den Austrittsfenstern strahlungsdurchlässige Öffnungen besitzt.⁴⁵

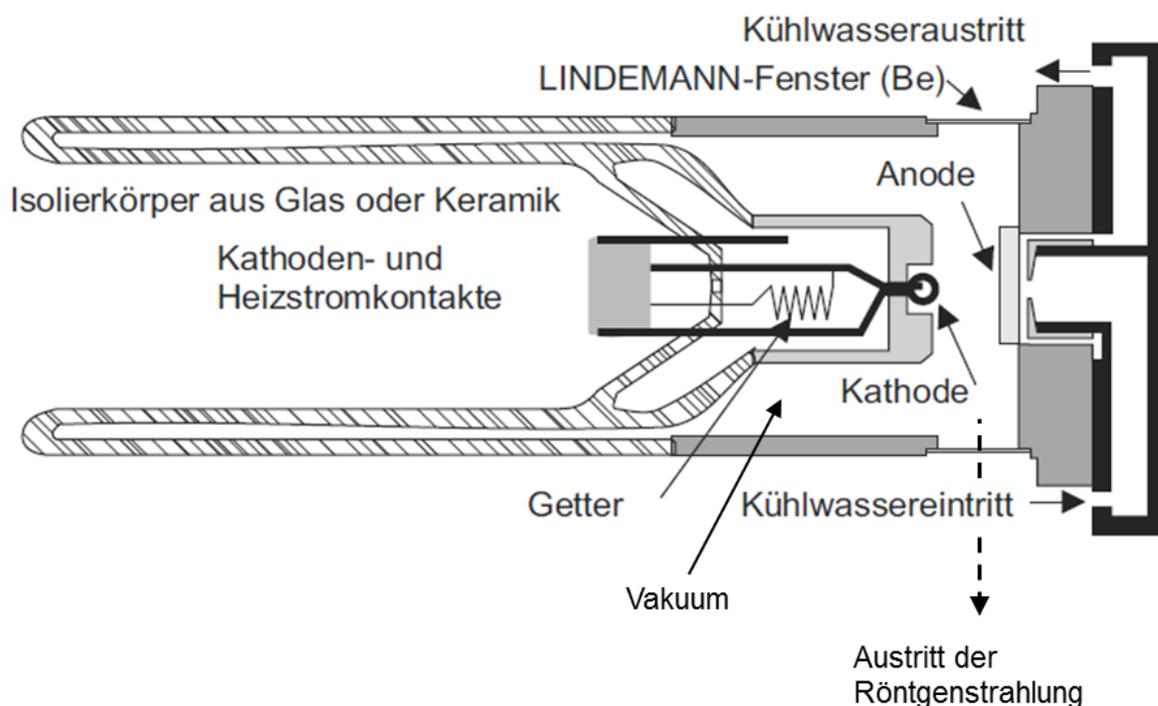


Abbildung 26: Aufbau einer Stehanodenröntgenröhre, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 96 (leicht modifiziert).

⁴⁵ Vgl. Krieger (2005), S. 122 f.

3.4.2 Arten

Die im Folgenden aufgeführten Arten sind die kommerziell am stärksten eingesetzten Bauformen von Röntgenröhren.

- **Stehnodenröntgenröhre**

Werden auch als Sealed-Tubes bezeichnet, da sich die beiden Elektroden in einem evakuierten Rohr befinden. Das Anodenmaterial ist meist Kupfer, Molybdän oder Wolfram und ist in einen Kühlkörper eingelassen, um die entstehende Wärme im Brennfleck abzuführen⁴⁶. Die dabei entstehende Verlustleistung beträgt ungefähr 1500W und mehr, da nur ein bis maximal zwei Prozent der Energie in Röntgenstrahlung umgewandelt werden. Da dies auch die am häufigsten eingesetzte Röhrenbauform ist, darf sich die Strahlqualität über die Zeit nicht stark verändern, weshalb die Röhrenhochspannung möglichst konstant gehalten werden muss. Die Abweichung vom Soll liegt durch den Einsatz moderner Schalttechnik im Bereich von kleiner 0,1%. Durch eine rechteckige Kathode mit den Abmessungen a und b können verschiedene Strahlgeometrien, nämlich Punkt- und Strichfokus, mit einer Röntgenröhre realisiert werden. Wie aus Abbildung 27 zu erkennen ist stehen diese beiden Fokusarten im 90° Winkel zueinander. Das Maximum der Intensität erhält man bei einem Abstrahlwinkel von circa 6°.⁴⁷

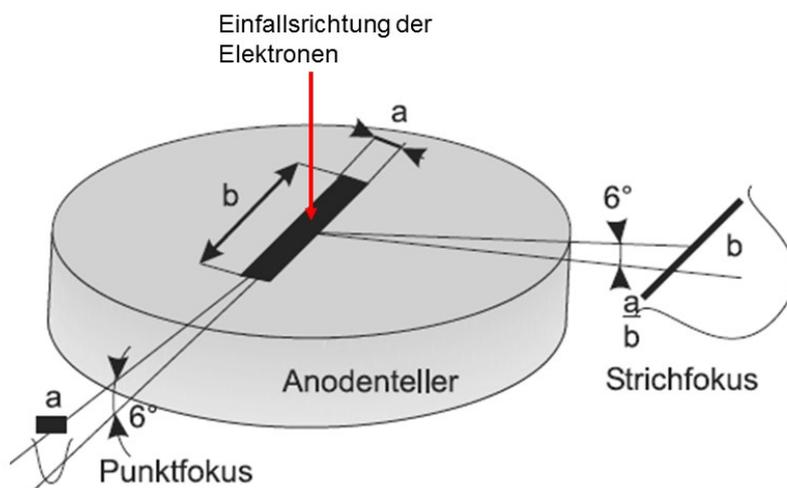


Abbildung 27: Fokusarten bei einer Sealed-Tube Röhre, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 98 (leicht modifiziert).

- **Mikrofokusröhren**

Eine weitere Art sind die Mikrofokusröhren, welche punktförmige Strahlung mit hoher Intensität erzeugen. Diese sind ähnlich aufgebaut wie Stehnoden und erzeugen durch eine punktförmige Kathode auf der Anode Spots in der Größe von 10µm bis 100µm. Aufgrund der hohen Intensität konzentriert auf einen Punkt entsteht eine hohe Verlustleistungsdichte von bis zu 200kWmm⁻². Deshalb kommt es bei Mikrofokusröhren zu einem Verschleiß von Anode und Kathode, wodurch diese in regelmäßigen Abständen ausgetauscht werden müssen.⁴⁸

⁴⁶ Vgl. Krieger (2005), S. 123 f.

⁴⁷ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 96 ff.

⁴⁸ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 100 f.

3.5 Optische Komponenten

In Abbildung 28 sind die optischen Komponenten einer Bragg-Brentano-Anordnung dargestellt. In dieser Anordnung wird mit einem divergenten Strahl gearbeitet, welcher die Probenoberfläche ausleuchtet.

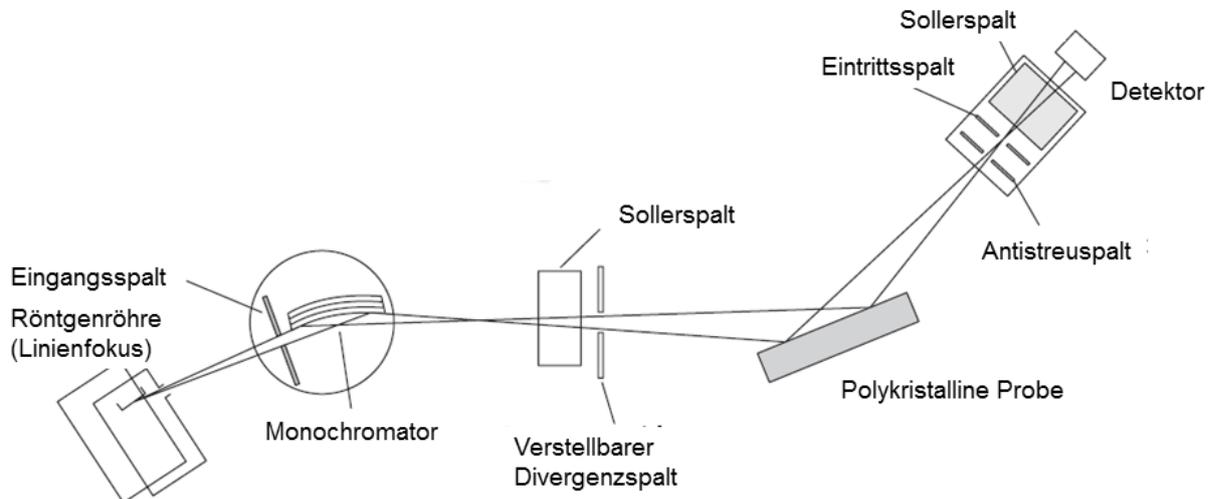


Abbildung 28: Strahlengang mit optischen Komponenten in Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 31.

3.5.1 Monochromator und Röntgenspiegel

Diese Komponente dient zur Reduktion beziehungsweise zur Elimination der K_{β} , $K_{\alpha 2}$ Strahlung und der Bremsstrahlung. Um nur die K_{β} Strahlung zu unterdrücken, werden auch sogenannte K_{β} Filter verwendet. Diese sind dünne Metallfolien aus Nickel, welche durch ihr Absorptionsverhalten die unerwünschte Strahlung minimieren. Allerdings ist zu beachten, dass dabei auch die gewünschte $K_{\alpha 1}$ Strahlung geschwächt wird. Bei Einsatz eines Monochromators wird kein K_{β} Filter benötigt, da die unerwünschte Strahlung schon vom Monochromator unterdrückt wird. Monochromatoren bestehen aus Einkristallen, welche im Strahlengang so platziert sind, dass das Bragg'sche Gesetz erfüllt ist. Aufgrund dieses Gesetzes ist eine Reflexion nur dann möglich, wenn der einfallende Strahl mit einer bestimmten Wellenlänge und unter einem bestimmten Winkel auftrifft. Der vom Monochromator reflektierte Strahl kann als hoch monochromatisch betrachtet werden, das heißt, es wird aus dem Spektrum die benötigte $K_{\alpha 1}$ Strahlung herausgefiltert.⁴⁹ Im Unterschied zum Monochromator entfernt der Röntgenspiegel nicht nur die unerwünschte Strahlung, sondern wird auch zur Strahlformung verwendet, zum Beispiel um einen fokussierenden oder parallelen Röntgenstrahl zu erhalten (siehe dazu Kapitel 3.3 Messgeometrien).

3.5.2 Divergenzspalt und Antistreuspalt

Der Divergenzspalt hat beim einfallenden Strahl die Aufgabe, die Probenoberfläche möglichst gut auszuleuchten. Die Einstellung der Größe des Spalts hat auch Auswirkungen auf die Intensität, ein zu schmal eingestellter Spalt reduziert die Intensität stark, erhöht aber die Auflösung. Die Aufgabe des Antistreuspalts ist es, nur den reflektierten Strahl zum Detektor durchzulassen und andere Streuung, zum

⁴⁹ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 36 ff.

Beispiel durch Luft, zu eliminieren. Die Spaltgröße ist gleich der des Divergenzspaltes. Auf den Antistreuspalt folgt der Eintrittsspalt, er bestimmt die Auflösung und die Intensität des am Detektor ankommenden Strahls. Seine Spaltgröße muss auf die Bedürfnisse der Messung abgestimmt werden, das heißt, ob entweder eine hohe Auflösung oder eine große Intensität benötigt wird. Die Einstellung der Spaltgröße kann auch automatisiert und somit während der Messung angepasst werden.⁵⁰

3.5.3 Sollerspalt

Die Aufgabe eines Sollerspalt ist es, die axiale Divergenz des Strahls zu begrenzen, sie kommen deshalb im einfallenden und reflektierten Strahl zum Einsatz. Der Aufbau besteht aus vielen dünnen Metallfolien die in einem bestimmten Abstand exakt parallel zueinander liegen. Auch die Länge des Sollerspalt spielt eine entscheidende Rolle, da typischerweise Öffnungswinkel von ungefähr $2,3^\circ$ erreicht werden sollen. Daraus folgt, dass nur Strahlen, die parallel oder annähernd parallel zur Diffraktionsebene sind, durch den Spalt kommen. Hier gilt auch wieder: je kleiner der Öffnungswinkel desto höher ist die Auflösung und desto kleiner die Intensität.⁵¹

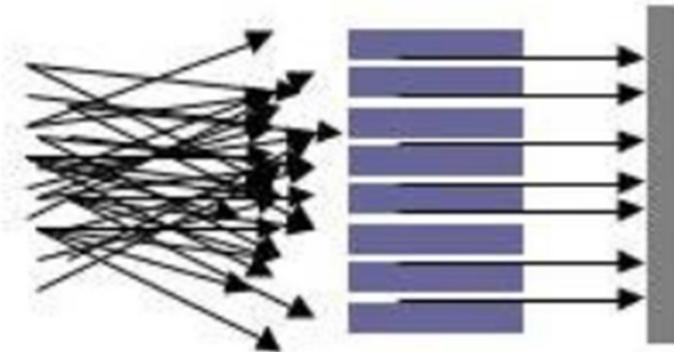


Abbildung 29: Funktionsweise Sollerspalt, Quelle: Speakman (o.J.), Online-Quelle [21.Mai.2016].

3.6 Probenträger

Der Probenträger ist ein sehr wichtiges Bauteil in der Röntgenstrukturanalyse, er muss die Probe in der Fokusebene fixieren ohne sie jedoch zu verspannen. Die Proben können pulverförmig, fest oder flüssig sein, deshalb sind auch verschiedenen Arten von Probenträgern nötig, welche ein Einrichten der Probe in die Fokusebene ermöglichen. Um bei einer zu großen Ausleuchtung der Probe nicht den Probenträger zu messen, werden für Pulver und Feststoffe oft topfförmige Probenträger verwendet, in denen die feste Probe mittels Knetmasse zur oberen Fläche des Topfes ausgerichtet wird (siehe Abbildung 30). Bei Pulvern werden diese in den Topf gefüllt und auf die Höhe des Topfrandes abgezogen. Materialien, aus denen diese einfachen Probenträger bestehen, sind meist amorphe Kunststoffe oder Glas. Pulver und Flüssigkeiten können für die Messung auch in Glaskapillaren gefüllt werden. Die Wandstärke der

⁵⁰ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 34 f.

⁵¹ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 35 f.

Glaskapillare sollte dabei 20µm nicht überschreiten, um die Röntgenstrahlung nicht zu stark abzuschwächen.⁵²

Des Weiteren sollen Proben auch oft verschiedener Temperatur, Druck oder relativen Luftfeuchtigkeit ausgesetzt werden, was spezielle Probenzusätze erfordert.

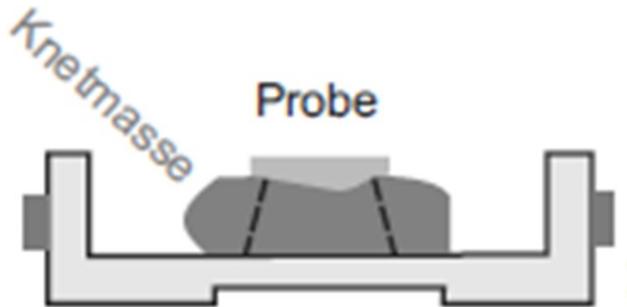


Abbildung 30: Einfacher Probenträger für Festkörper, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 152 (leicht modifiziert).

3.7 Detektoren⁵³

Röntgendetektoren lassen sich generell in drei Arten unterteilen, diese sind Punkt-, Linien- und Flächendetektoren. Es gibt bei Detektoren, welche bei Röntgenstrahlung eingesetzt werden, verschiedene Kriterien, die einen großen Einfluss auf die Ergebnisse der Messung haben. Als erstes wäre hier die Winkelauflösung zu nennen. Dies betrifft die Fähigkeit, zwischen unterschiedlichen Gitterabständen unterscheiden zu können, das heißt, zwischen benachbarten Reflexionen unterscheiden zu können. Das nächste Kriterium ist die Energieauflösung, dies bedeutet der Detektor unterscheidet zwischen K_{α} und $K_{\alpha 1}$ Strahlung und kann unerwünschte Strahlung unterdrücken. Ein weiteres Kriterium ist die Linearität, sie beschreibt den Unterschied zwischen den ausgelösten Spannungsimpulsen und den auftreffenden Röntgenphotonen. Auch das Rauschen, normalerweise kleiner 1cps (counts per second) und der dynamische Bereich, welcher die Differenz zwischen Rauschen und größtmöglicher Intensität ohne Sättigung am Detektor angibt, sind weitere wichtige Merkmale eines Röntgendetektors.

Um zu verstehen, wie der Röntgenstrahl auf den Detektor auftrifft, ist die Veranschaulichung mit Hilfe der Deybe-Scherrer-Anordnung hilfreich. Der gestreute Strahl strahlt in alle Richtungen und bildet dadurch einen Kegel (siehe Abbildung 31). Bei einer polykristallinen Probe entstehen bei Auftreffen des Röntgenstrahls, je nach Lage der Kristallebenen, viele dieser Kegel. Je nachdem, welche Art von Detektor verwendet wird, wird nur ein Teil oder der gesamte Ring des Kegels vom Detektor aufgenommen. In der Abbildung dick markiert sind die Bereiche, welche durch Liniendetektoren abgedeckt werden.

⁵² Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 151 ff.

⁵³ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 38 f.

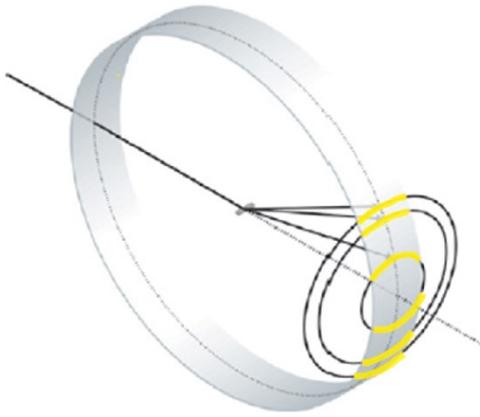


Abbildung 31: Deybe-Scherrer Anordnung mit Streukegeln, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 40.

Im Folgenden werden nun die drei Detektorarten näher betrachtet.

3.7.1 Punktdetektoren

Punktdetektoren auch 0D-Detektoren genannt, zählen alle einfallenden Röntgenphotonen, unabhängig von ihrer Position. Diese Detektorart lässt sich in drei Unterarten unterteilen: Gasproportionaldetektoren, Szintillationsdetektoren und Halbleiterdetektoren, deren prinzipielle Funktionsweise in Kapitel 2.2.1 erläutert wurde. Der Gasproportionaldetektor eignet sich sehr gut für Cu K_{α} -, Cr K_{α} - und Co K_{α} -Strahlung und besitzt eine gute Energieauflösung. Der Szintillationsdetektor wird im Gegensatz dazu vorzugsweise für Strahlung kürzerer Wellenlänge (Mo K_{α}) verwendet.⁵⁴

3.7.2 Liniendetektoren

Der Liniendetektor besteht aus mehreren Einzeldetektoren, angeordnet entlang einer Linie. Dadurch kann der Detektor die Punkte vieler gestreuter Strahlen gleichzeitig aufzeichnen. Daraus ergibt sich eine viel kürzere Messzeit als bei Punktdetektoren. Es gibt Linien- oder 1D-Detektoren in verschiedenen Größen. Kurze gerade Detektoren decken 5° bis 10° von Zwei-Theta ab, während gewölbte Liniendetektoren einen Bereich von bis zu 140° Zwei-Theta abdecken können. Nachteilig bei dieser großen Art ist ein Auftreten von Schwankungen bei der Photonenzählung über die Länge. Die Liniendetektoren bestehen oft aus einzelnen Halbleiterdetektoren, sogenannten RTMS-Detektoren. Wie schon unter Kapitel 2.2.1 erwähnt, beginnt bei der Detektion ein Strom zu fließen der proportional zur Rate der Röntgenphotonen ist. Es werden auch gasgefüllte Zählrohrdetektoren verwendet, welche die durch die Gasionisation entstehenden Elektronen entlang des Zählrohres zur Anode beschleunigen, dort erfolgt das Zählen der Elektronen. Bei einem Punktdetektor wird die Amplitude dieses Pulses gemessen. Im Gegensatz dazu wird bei Liniendetektoren das Signal an beiden Enden des Drahtes gemessen und aufgrund der Zeitdifferenz auf die Position geschlossen.⁵⁵

⁵⁴ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 40 f.

⁵⁵ Vgl. Pecharsky/Zavalij (2009), S. 128 f.

Liniendetektoren kommen vor allem bei fokussierenden Geometrien zum Einsatz, aber auch bei parallelem Röntgenstrahl finden sie Verwendung. Des Weiteren bieten Liniendetektoren eine sehr gute Winkelauflösung und eine gute Linearität.⁵⁶

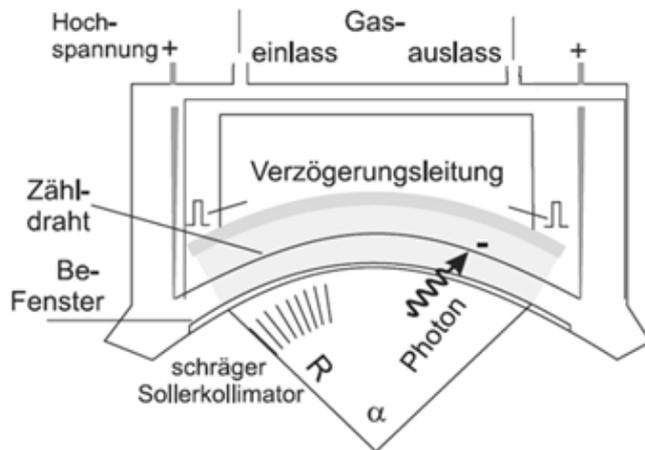


Abbildung 32: Liniendetektor in gasgefüllter Ausführung mit Zählrohr, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 135 (leicht modifiziert).

3.7.3 Flächendetektoren

Diese Detektorart scannt den gestreuten Bereich in zwei Dimensionen. Der erste Flächendetektor am Markt war der Röntgenfilm. Die heutzutage am häufigsten zum Einsatz kommenden Flächendetektoren sind Arrays einzelner Halbleiterdetektoren, GADS-Detektoren, bei denen eine Matrix von Zählrohren in einem gasgefüllten Raum als Detektor dient, eine Kombination von Szintillationszähler und Fotozellenmatrix oder CCD-Detektoren.⁵⁷ Mit Flächendetektoren ist es möglich, Teile oder komplette Ringe des Debye-Scherrer Kegels aufzunehmen, deswegen werden sie hauptsächlich für die Texturanalyse und Einkristalldiffraktion verwendet. Die Vorteile sind die kurze Messzeit, aufgrund der Aufnahme eines größeren Teils des Debye-Scherrer Rings. Dadurch erhält man mehr Daten auf einmal, wodurch die Messzeit stark verkürzt wird. Bei nicht auf Halbleitern basierenden Detektoren kann die Auflösung schlechter als die von Liniendetektoren sein.⁵⁸

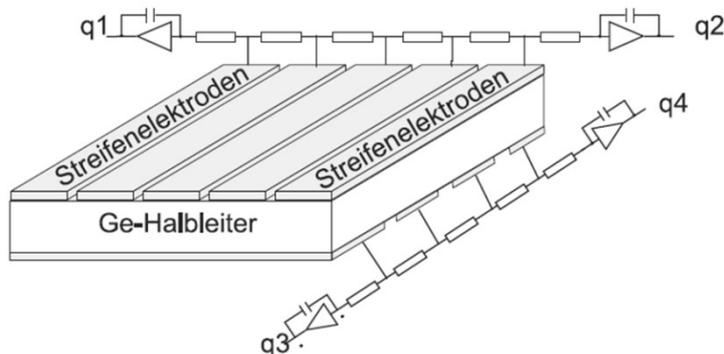


Abbildung 33: Flächendetektor mit Halbleiterstreifen, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 139.

⁵⁶ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 41 f.

⁵⁷ Vgl. Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 138 ff.

⁵⁸ Vgl. Ermrich/Opper (2013), S. 42.

4 GRUNDLAGEN SCHRITTMOTOREN

Schrittmotoren können als Sonderbauform von Synchronmaschinen betrachtet werden. Durch ein veränderliches Statormagnetfeld wird der Rotor um den Schrittwinkel α weitergedreht. Der Rotor will die Position einnehmen, bei der der magnetische Widerstand am geringsten ist. Wird nun das Magnetfeld des Stators verändert, das heißt, eine anderer Strang bestromt, so ändert sich auch die Position des Rotors, da er wieder die Position des geringsten magnetischen Widerstandes einnehmen will. Dadurch kann eine Umdrehung des Rotors, wenn von keinem Schritt winkelfehler und störungsfreiem Betrieb ausgegangen wird, in genau definierte Schritte von α aufgelöst werden.⁵⁹

Bei Schrittmotoren werden drei Typen unterschieden:

- **Reluktanz-Schrittmotoren**

Bei einem Reluktanz-Schrittmotor besteht der Rotor aus weichmagnetischem Material und die Polteilung ist ungleich der Anzahl an Strangwicklungen im Stator. In Abbildung 34 ist ein Reluktanz-Schrittmotor dargestellt. Er besitzt im Stator die Strangwicklungen A, B und C, im linken Teil der Abbildung wird die Strangwicklung A bestromt. Wird nun die Wicklung C bestromt, entsteht aufgrund des magnetischen Widerstands ein Moment, welches auf den Rotor wirkt und ihn auf die um 30° verschobene Position weiterdreht. Für eine Änderung der Drehrichtung muss er mindestens zwei Strangwicklungen besitzen. Der Vorteil dieser Schrittmotorart ist aufgrund der Verzahnung des Rotors der kleine Schrittinkel α .⁶⁰

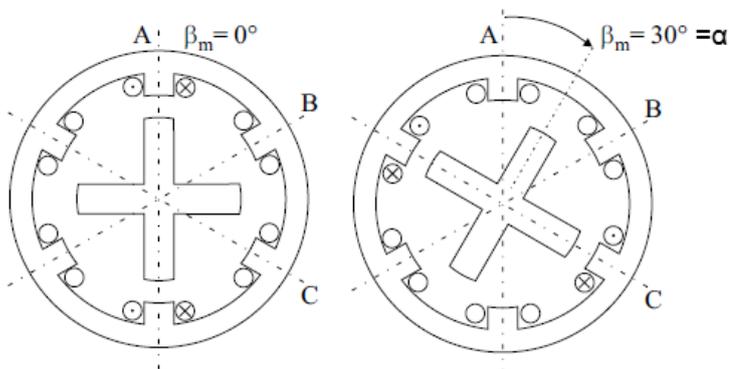


Abbildung 34: Ansteuerung eines Reluktanz-Schrittmotors mit drei Statorsträngen, Quelle: Schröder (2007), S. 484.

⁵⁹ Vgl. Schröder (2007), S. 481.

⁶⁰ Vgl. Schröder (2007), S. 483.

• **Permanentmagnet-Schrittmotoren**

Der Rotor besitzt bei diesem Schrittmotor einen Permanentmagnet, der sich gegenüber der bestromten Statorwicklung immer entsprechend seiner Pole ausrichtet. Die Drehrichtung des Rotors wird durch die Richtung des Stromes in den Statorwicklungen bestimmt. Durch den magnetischen Rotor besitzt diese Schrittmotorart ein Rastmoment im unbestromten Zustand des Stators, im Gegensatz zum Reluktanz-Schrittmotor. Neben dem Rastmoment ist auch das Drehmoment des Permanentmagnet-Schrittmotors wesentlich höher als das eines Reluktanz-Schrittmotors.⁶¹

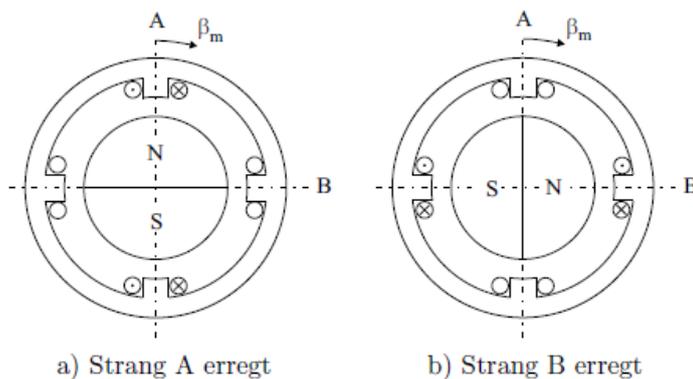


Abbildung 35: Permanentmagnet-Schrittmotor mit zwei Statorwicklungen, Quelle: Schröder (2007), S. 486.

• **Hybrid-Schrittmotoren**

Hybrid-Schrittmotoren sind eine Kombination aus Permanentmagnet- und Reluktanz-Schrittmotoren, das heißt, er vereint die Vorteile von kleinem Schrittwinkel und hohem Drehmoment. Dabei ist der Rotor so aufgebaut, dass zwischen zwei weichmagnetischen Zahnscheiben ein Permanentmagnet sitzt (siehe Abbildung 36). Dadurch bildet jede Zahnscheibe einen der Pole des Permanentmagneten aus. Um ein Ausrichten der Pole auf die Statorwicklungen zu ermöglichen, sind die Zahnscheiben um eine halbe Zahnteilung gegeneinander versetzt.⁶²

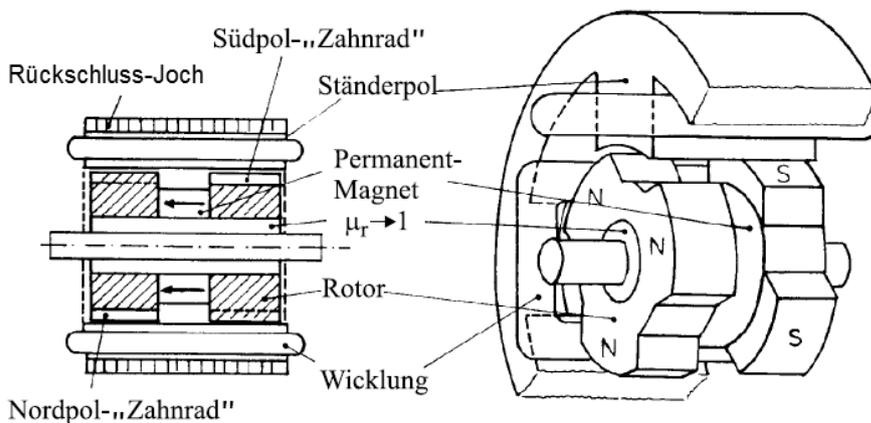


Abbildung 36: Aufbau eines Hybridschrittmotors, Quelle: Schröder (2007), S. 488 (leicht modifiziert).

⁶¹ Vgl. Schröder (2007), S. 485 f.

⁶² Vgl. Schröder (2007), S. 487.

Die Verschaltung eines Schrittmotors kann unipolar oder bipolar erfolgen. Bei unipolarem Betrieb wird die Statorwicklung nur in einer Richtung von einem Strom durchflossen, dabei wird jeder Strang parallel mit zwei Drähten gewickelt. Die beiden Drähte werden in Reihe geschaltet, und über eine Mittelanzapfung erfolgt die Versorgung mit Gleichstrom. Dieser kann über S1 oder S2 fließen, dadurch wird der Aufwand für den Schaltungsbauelemente minimiert (siehe Abbildung 37). Bei einer bipolaren Verschaltung besitzt jeder Strang eine Vollbrücke und kann von beiden Seiten mit einem Strom durchflossen werden. Der Aufwand für die Schaltung ist zwar größer, jedoch besitzt dieser Schrittmotor einen besseren Wirkungsgrad.⁶³

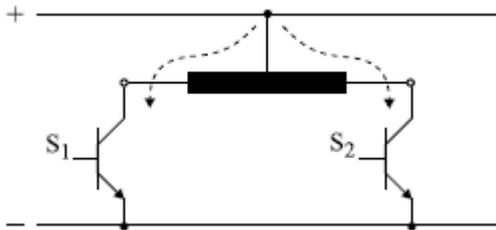


Abbildung 37: Unipolare Ansteuerung, Quelle: Schröder (2007), S. 499.

Die Drehung des Schrittmotors kann im Vollschritt, Halbschritt oder Mikroschritt erfolgen. Im Vollschrittbetrieb wird bei einer Permanentmagnetmaschine mit zwei Strängen ein elektrischer Winkel von 90° pro Schritt zurückgelegt (siehe Abbildung 35). Die Anzahl der stromdurchflossenen Stränge ist konstant. Im Halbschrittbetrieb wird der Winkel auf 45° halbiert, aufgrund der Variierung der Anzahl der stromdurchflossenen Stränge. Das bedeutet, dass zwei Stränge bestromt werden und der Magnet dadurch die Stellung in der Mitte der Stränge, 45° , einnimmt. Bei der dritten Art, dem Mikroschrittbetrieb, wird der Strom durch den Strang mittels Leistungselektronik beliebig variiert. Die Grenzen des Mikroschrittbetriebs liegen darin, dass bei vorhandener Reibung und geringem Schrittwinkel α diese nicht mehr überwunden werden kann. Zudem nimmt auch bei Erhöhung der Schrittzahl der Schrittwinkelfehler zu. Der Vorteil besteht allerdings im sehr ruhigen und gleichmäßigen Lauf bei Mikroschrittbetrieb.⁶⁴

⁶³ Vgl. Schröder (2007), S. 498 f.

⁶⁴ Vgl. Schröder (2007), S. 501 ff.

5 ANALYSE DES MARKTES

In diesem Kapitel sollen die aktuell größten Mitbewerber aufgezeigt und deren Geräte analysiert werden, um für den in dieser Arbeit behandelten Antrieb des Messgeräts die Anforderungen bestimmen zu können. Des Weiteren dient diese Analyse auch dem Aufzeigen der am Markt verbreiteten Applikationen und dem Zubehörerequipment.

5.1 Mitbewerber

Um möglichst aussagekräftige Ergebnisse der Analyse zu erhalten, werden die drei größten Hersteller am Diffraktometermarkt ausgewählt, diese sind die Firmen Bruker, PANalytical und Rigaku. In der folgenden Analyse wird nun jeweils ein Gerät der drei Hauptmitbewerber betrachtet. Die Auswahl der Diffraktometer erfolgt aufgrund des Einsatzgebietes, das heißt, es werden die jeweiligen Vielzweckgeräte ausgewählt. Diese bieten eine große Funktionalität und eine große Auswahl an Anwendungsbereichen, wie zum Beispiel Pulverdiffraktion, Messung von dünnen Filmen, Eigenspannungsanalyse und Schichtdickenbestimmung. Es werden die technischen Daten, der Verfahrenweg und die Genauigkeiten sowie das Zubehör für jedes Diffraktometer angeführt. Auch werden die Besonderheiten jedes Diffraktometers hervorgehoben sowie einige typische Einsatzgebiete aufgezählt. Am Ende erfolgt ein Vergleich, aus dem die benötigten Anforderungen des zu entwickelnden Geräts, mit besonderem Augenmerk auf den Antrieb des Goniometers, gewonnen werden.

5.2 Bruker D8 Advance⁶⁵

Das erste Gerät, welches für den Wettbewerbsvergleich betrachtet wird, ist das D8 Advance Diffraktometer der Firma Bruker. Es ist ein vielseitig einsetzbares Diffraktometer und wird für die folgenden Proben eingesetzt:

- Pulver gepresst oder lose
- Pharmazeutische Produkte
- Suspensionen
- Fasern und Kapillaren
- Filter
- Beschichtungen und Filme
- Mechanische Bauteile

Zudem können auch verschiedene Probenmengen aufgebracht werden.

⁶⁵ Vgl. Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016] S. 1 ff.



Abbildung 38: Diffraktometer D8 Advance von Bruker, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].

Das Diffraktometer bietet im Inneren ein großes Platzangebot für die Montage verschiedenster Probenhalter, Röntgenquellen und Detektoren. Durch das sogenannte DAVINCI.SNAP-LOCK, welches ein Aufnahmesystem für verschiedene Komponenten im Strahlengang darstellt, erhöht sich die Flexibilität des Geräts, da die Komponenten ohne Werkzeug einfach, schnell und präzise im Strahlengang positioniert werden können. Zu den austauschbaren Komponenten zählen verschiedene Optiken, Schlitzsysteme, Detektoren, Röntgenquellen und Probenhalter. Durch die präzise Positionierung besteht daher keine Notwendigkeit mehr nach einem Austausch von Bauteilen eine Justierung des Geräts durchzuführen. Eine weitere Besonderheit ist der DAVINCI.MODE. Dieser dient zur Überwachung des Geräts und der Komponenten, das heißt, es werden automatisch alle Komponenten, welche über den Schnellwechselmechanismus DAVINCI.SNAP-LOCK eingebaut werden, erkannt. Das Diffraktometer kennt daher zu jeder Zeit alle Komponenten, welche eingebaut sind, und justiert sich selbst passend zu den verbauten Komponenten. So können auch Bedienfehler durch fehlende oder für eine bestimmte Messung unpassende Komponenten erkannt und auch gleich an den Bediener/die Bedienerin rückgemeldet werden. Diese Rückmeldung geschieht mit Hilfe des DIFFRAC.DAVINCI Systems, welches eine aktuelle grafische Visualisierung des Diffraktometers am Computer darstellt. Es zeigt alle eingebauten Komponenten und deren Status, sowie die automatische Validierung der aufgebauten Konfiguration.

Um die Flexibilität noch weiter zu erhöhen, kann am Goniometer mit verschiedenen Diffraktionsradien gearbeitet werden. So können auch größere Proben und Probenträger einfach eingebaut werden. Dadurch lässt sich natürlich auch bei bestimmten Messungen die Auflösung verändern und somit optimal anpassen.

- **Technische Daten**

In nachfolgender Tabelle werden die wichtigsten technischen Daten des Diffraktometers angeführt. Die darin angeführte Auflösung bezieht sich auf das kleinste mögliche Inkrement des Winkelmesssystems. Maßgebend für das System ist allerdings die Genauigkeit, welche die absolute Abweichung vom Soll angibt.

Das National Institute of Standards and Technology (NIST) stellt verschiedene zertifizierte Standardreferenzmaterialien zur Verfügung, um die Entwicklung von Analysemethoden und die Kalibrierung von Messgeräten zu unterstützen. Das NIST Standard Reference Material (kurz SRM) ist ein zertifizierter Standard, welcher zur Langzeitüberprüfung der Genauigkeit von Messgeräten eingesetzt wird.⁶⁶ Der aktuelle Standard NIST SRM 1976b besteht aus einer gesinterten Tonerdescheibe mit einem Durchmesser von 25,6mm und einer Dicke von 2,2 mm⁶⁷.

Unter der Linearität, im Zusammenhang mit den technischen Daten des Diffraktometers, versteht man die Abweichung vom Sollwert über den gesamten Winkelbereich von Zwei-Theta. Das heißt beim Abfahren des gesamten Winkelbereichs liegt jeder angefahrene Wert in einer bestimmten Toleranz zum absoluten Wert (siehe Abbildung 39).

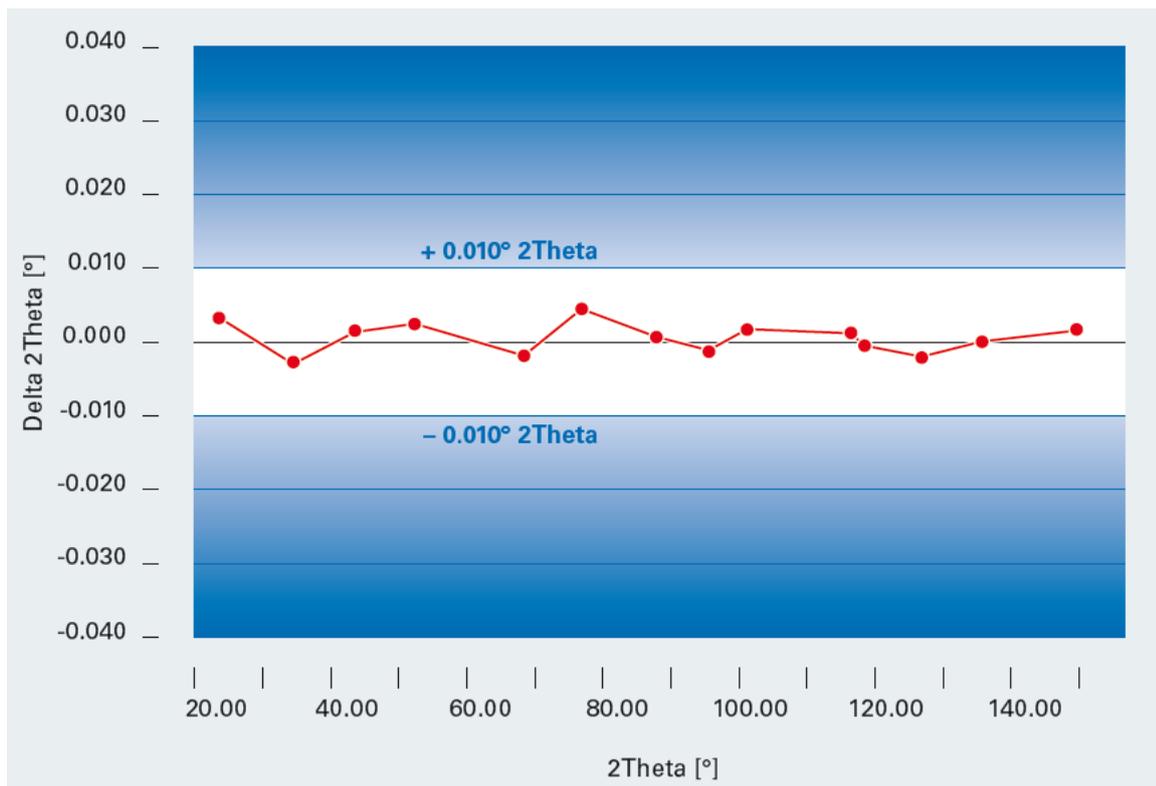


Abbildung 39: Abweichung vom Sollwert über den gesamten Bereich von Zwei-Theta bei dem D8 Advance Diffraktometer, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].

⁶⁶ Vgl. NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce (o.J.), Online-Quelle [05.09.2016].

⁶⁷ Vgl. NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce (2013), Online-Quelle [05.09.2016].

Art des Goniometers	Vertikale Goniometerachse, Theta-Theta oder Theta-Zwei-Theta Goniometer
Diffractionsradien	250mm/280mm und Positionen dazwischen einstellbar
Winkelbereich	-110° < Zwei-Theta ≤ 168° abhängig von der Konfiguration Detektor/Röntgenquelle/Optik
Maximale Winkelgeschwindigkeit	20°/s
Kleinste Auflösung	0,0001°
Linearität (bei konstanten Umweltbedingungen)	Mindestens ±0,01° über den gesamten Winkelbereich Zwei-Theta. Dies kann mittels NIST SRM 1976 überprüft werden.
Außenabmessungen	Höhe 1868mm x Breite 1300mm x Tiefe 1135mm
Gewicht	770kg

Tabelle 1: Technische Daten D8 Advance, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].

- **Zubehör**

Als zusätzliche Option können verschiedene Detektoren angebaut werden. Im 2D Bereich sind das der von Bruker selbst produzierte LYNXEYE XE/XE-T Detektor und der Pilatus3 R 100K-A der Firma Dectris. Bei den 1D Detektoren werden die LYNXEYE Detektoren sowie der VÄNTEC-1 und der SSD160 Detektor angeboten. Deren Vorteil ist die hohe Geschwindigkeit der Aufnahme, wodurch die Messzeit verringert wird. Des Weiteren werden noch zwei 0D-Detektoren, SOL-XE und Szintillations-Zähler, angeboten.

Als Röntgenquelle im D8 Advance wird die sogenannte Twist-Tube eingesetzt, dies ist eine Sealed-Tube Röntgenröhre, welche durch ein patentiertes System ein einfaches Umschalten zwischen einem punktförmigen und strichförmigen Röntgenstrahl ermöglicht. Dies geschieht mit einem Werkzeug, ohne die Kühlversorgung der Röhre zu unterbrechen oder das Hochspannungskabel abzustecken. Dadurch wird ein Wechseln zwischen den beiden Strahlgeometrien ohne ein neuerliches Einjustieren ermöglicht. Zusätzlich können auch noch die Metaljetquelle, welche als Anode flüssiges Metall nutzt, eine Mikrofokusröntgenquelle, Keramikröhren oder die sogenannte Turbo X-Ray Source eingesetzt werden. Letztere ist eine Drehanodenröntgenröhre, welche bei allen Strahlgeometrien maximale Intensität liefert.⁶⁸

Bei Drehanodenröntgenröhren handelt es sich um Röntgenröhren, bei denen die Anode rotiert und dadurch Leistungen bis 100kW ermöglicht. Die Anode besteht aus einem Teller, auf dem eine Bahn aus dem jeweiligen Anodenmaterial, zum Beispiel Wolfram aufgebracht ist, auf die die Elektronen treffen.

⁶⁸ Vgl. Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

Durch die Drehung treffen die Elektronen nicht auf einen Brennfleck sondern auf eine Brennfleckbahn, wodurch die Wärme besser verteilt wird und somit höhere Leistungen ermöglicht werden (siehe Abbildung 40).⁶⁹

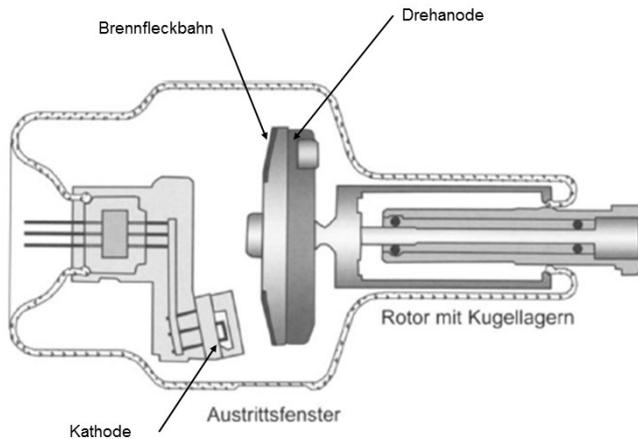


Abbildung 40: Drehanodenröntgenröhre, Quelle: Krieger (2005), S. 125 (leicht modifiziert).

Im optischen Pfad nach der Quelle und vor dem Detektor können verschiedene Divergenzspalte, Sollerblenden oder K_{β} -Filter eingebaut werden, je nach Anforderung der Messung. Die Divergenzspalte können auf einen fixen Wert eingestellt oder automatisiert einstellbar sein. Die Optik kann nicht nur aus einem Röntgenspiegel oder Monochromator bestehen, da Bruker eine TWIN-Optik sowohl für den einfallenden als auch für den austretenden Strahl anbietet. Auf der primären Seite, also quellenseitig, kann automatisch zwischen einem Röntgenspiegel und einem motorisierten Divergenzspalt umgestellt werden. Der Spiegel erzeugt einen parallelen Strahl und der Spalt einen divergenten Strahl für eine Bragg-Brentano-Anordnung. Auf der Detektorseite, sekundär, kann zwischen Sollerblenden und einem verstellbaren Divergenzspalt gewechselt werden. Der Wechsel erfolgt automatisch per Mausklick und erfordert kein Umbauen der Messanordnung (siehe Abbildung 41).

⁶⁹ Vgl. Krieger (2005), S. 125 f.



Abbildung 41: TWIN-Optik, Quelle: Bruker Corporation (2012), Online-Quelle [11.01.2017].

Bei der Probenmanipulation ist es möglich, verschiedene Probenträger einzubauen, zum Beispiel jene, die eine motorisierte Probenverstellung oder Rotation ermöglichen, die die Möglichkeit bieten die Proben zu erwärmen wie auch abzukühlen oder die Probe verschiedenen Umgebungsbedingungen auszusetzen. Um eine Drehung der Probe in alle Richtungen zu ermöglichen, kann auch eine Eulerwiege direkt auf das Goniometer montiert werden. Es besteht auch die Möglichkeit, das Diffraktometer mit einem automatisierten Probenwechsler auszustatten, welcher den Durchsatz maximiert. Ein wichtiger Punkt ist auch, dass Probenträger oft an die Kundenbedürfnisse angepasst werden und dadurch neue Applikationen für das Messgerät entstehen.

5.3 PANalytical Empyrean

Ein weiteres Wettbewerbsgerät ist das Empyrean Diffraktometer von PANalytical. Es ist genauso wie das zuvor beschriebene D8 Advance ein Vielzweck-Diffraktometer. Typische Proben sind wieder Pulver, dünne Filme, Nanomaterialien und Festkörper. Dabei werden die Inhaltsstoffe sowie Kristallstruktur von Pulvern analysiert, Schichtdicken und deren Rauheit bestimmt sowie die Größe der Nanokristalle und deren Verteilung in der Probe gemessen.⁷⁰



Abbildung 42: Diffraktometer Empyrean von PANalytical, Quelle: PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

Die Besonderheit dieses Diffraktometers ist auch hier ein Schnellwechselsystem für Optiken, Detektoren und Probenträger. Das PreFIX-System erlaubt ein genaues Positionieren, wodurch ein Justieren des Geräts nach einem Umbau nicht erforderlich ist. Für die Montage und Demontage der PreFIX-Komponenten ist ein Werkzeug erforderlich. Eine weitere Besonderheit sind die großzügig öffnenden Türen, wobei der sich ergebende Platz vor allem beim Austauschen von Komponenten oder Anschließen von Probenträgern ein Vorteil ist. Die eingebaute Kamera dient zum visuellen Ausrichten der Probe, wenn nur bestimmte oder kleine Stellen betrachtet werden sollen.⁷¹

- **Technische Daten**

Dieses Diffraktometer kann auch mit einem Alpha-1 Aufbau ausgestattet werden, was bedeutet, dass der gesamte optische Pfad darauf ausgerichtet ist, eine sehr gute K_{α} -Strahlung in Bragg-Brentano-Anordnung

⁷⁰ Vgl. PANalytical B.V. (2009), Online-Quelle [06.09.2016], S. 3 ff.

⁷¹ Vgl. PANalytical B.V. (2009), Online-Quelle [06.09.2016], S. 14 f.

zu produzieren. Als Anodenmaterial wird Kupfer oder Kobalt verwendet. Eingesetzt wird dieser Aufbau vor allem in der Strukturanalyse.⁷²

Art des Goniometers	Vertikale Goniometerachse, Theta-Theta oder Alpha-1 Goniometer
Diffractionsradien	240mm, kann reduziert werden
Winkelbereich	-111° < Zwei-Theta ≤ 168° abhängig von der Konfiguration Detektor/Röntgenquelle/Optik
Maximale Winkelgeschwindigkeit	Keine Angabe
Kleinste Auflösung	0,0001°
Linearität (bei konstanten Umweltbedingungen)	Mindestens ±0,01° über den gesamten Winkelbereich Zwei-Theta
Außenabmessungen	Höhe 1947mm x Breite 1400mm x Tiefe 1162mm
Gewicht	1150kg

Tabelle 2: Technische Daten Empyrean, Quelle: PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

- **Zubehör**

PANalytical bietet im Bereich der Detektoren eine besonders große Vielfalt an Eigenentwicklungen. Die PIXcel-Detektorreihe deckt einen Bereich von 0D bis inklusive 3D ab. Unter 3D-Detektor versteht man, dass viele zweidimensionale Bilder aufgenommen und kombiniert werden, um dadurch die Volumenelemente der Probe rekonstruieren zu können. Eingesetzt werden solche Detektoren zur Computertomografie. Die anderen Vorteile, welche die PIXcel-Detektoren bieten, sind eine kleine Pixelgröße und ein großer Winkelbereich von bis zu 28° in sehr guter Qualität.⁷³ Für hochenergetische Strahlung, wie zum Beispiel Molybdän- oder Silberstrahlung, wird der GaliPix^{3D}-Detektor angeboten, welcher den Bereich von 1D bis 3D abdecken kann. Des Weiteren wird noch ein 1D-Siliziumstreifen-detektor, der X'celerator, angeboten, welcher gegenüber anderen Detektoren die Vorteile eines kühlmittelfreien Betriebs und einer schnelleren Datenerfassung bietet.⁷⁴

Im Bereich der Quellen werden zum Standard gehörende Glas- und Keramik-Sealed-Tubes angeboten, wie auch die selbstentwickelte Empyrean Tube, welche durch eine große Anzahl an Anodenmaterialien auf die Anwendung anpassbar ist. Des Weiteren wird auch hier ein einfaches Wechseln zwischen einem punktförmigen und strichförmigen Röntgenstrahl ermöglicht. Zukünftig soll auch eine Mikrofokusröhre mit den zugehörigen Optiken angeboten werden. Über das PreFIX-System wird der Wechsel der

⁷² Vgl. PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

⁷³ Vgl. PANalytical B.V. (2009), Online-Quelle [06.09.2016], S. 16.

⁷⁴ Vgl. PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

verschiedenen optischen Komponenten, wie zum Beispiel verschiedenen Röntgenspiegel, Monochromatoren oder Schlitze, einfach ermöglicht.⁷⁵

Bei den Probenträgern gibt es auch bei diesem Diffraktometer eine große Auswahl, beginnend bei unterschiedlichen Heiz- und Kühlprobenträgern, der Möglichkeit Proben unter Druck oder unter eine andere Atmosphäre zu setzen, sowie die Probe einer bestimmten relativen Feuchtigkeit auszusetzen. Auch eine Rotation oder Translation der Probe ist möglich. Im Emyrean Diffraktometer können mit einem speziellen Probenträger auch SAXS-Messungen durchgeführt werden. SAXS Messungen werden eingesetzt, um die Partikelstruktur der Probe zu analysieren. Der dabei benötigte Winkelbereich ist $0,1^\circ$ bis 10° ⁷⁶. Dabei wird in einer Transmissionsgeometrie gemessen und somit mit dem Röntgenstrahl durch eine durchlässige Probe geschossen. Des Weiteren muss der Strahlpfad soweit wie möglich evakuiert sein und sollte möglichst keine Luftstrecken aufweisen, um die Hintergrundstreuung, welche durch die Partikel in der Luft erzeugt wird, zu minimieren. Besonders wichtig ist dies bei sehr schwach streuenden Proben. Mit dem ScatterX⁷⁸ ist diese Messung mit evakuiertem Strahlengang mit minimalen Luftstrecken auch im Emyrean möglich.⁷⁷

⁷⁵ Vgl. PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

⁷⁶ Vgl. Schnablegger/Singh (2013), S. 12.

⁷⁷ Vgl. PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].

5.4 Rigaku SmartLab⁷⁸

Das Rigaku SmartLab ist ein weiteres Mehrzweckdiffraktometer, welches zum Beispiel zur Analyse von Pulvern, dünnen Filmen, Eigenspannungsanalysen und für SAXS-Messungen eingesetzt wird.



Abbildung 43: SmartLab Diffraktometer, Quelle: Rigaku Corporation (2014), Online-Quelle [16.09.2016].

Für die vereinfachte Bedienung bietet dieses Diffraktometer eine automatische Erkennung aller eingebauten optischen Komponenten und des Weiteren auch eine Überprüfung, ob die eingesetzten Komponenten für die ausgewählte Messung auch passend sind. Beim Erkennen eines fehlerhaften Einsatzes schlägt das System vor, welche Konfiguration eingebaut werden soll. Nach erfolgtem Einbau der nötigen Komponenten justiert sich das gesamte Diffraktometer automatisch. Bei einem Umbau der optischen Komponenten ist vielfach eine Neuausrichtung dieser sowie auch der Quelle nötig, dies wird ebenso schnell und unkompliziert durch die automatische Routine erledigt.

Mit den Begriffen Smart-cable und Smart-sample beschreibt Rigaku die automatische Erkennung ihrer optischen Komponenten und Probenträger. Die optischen Komponenten besitzen ein Kabel, welches direkt auf den Diffraktometerarm gesteckt wird, wodurch unnötig lange Kabel vermieden werden. Dies ist das sogenannte Smart-cable-Prinzip. Beim Smart-sample-Prinzip sind die Probenträger mit Kontakten versehen, über die sie mit Energie und Daten versorgt werden. Gleichzeitig erfolgt auch eine Erkennung

⁷⁸ Vgl. Rigaku Corporation (2014), Online-Quelle [16.09.2016], S. 1 ff.

des Probenträgertyps. Beide Prinzipien verhindern eine Kollision von Komponenten, da diese automatisch erkannt werden und die Kabellängen minimiert sind.

Eine andere Besonderheit ist die Einführung einer weiteren Achse, der sogenannten in-plane Achse, welche es dem Detektor ermöglicht, in einer Ebene parallel zur Probe zu rotieren. Die Probe ist dabei waagrecht montiert. Dies kommt vor allem bei Messungen dünner Filme zum Einsatz, womit eine Diffraktion von Schichtdicken kleiner als 10nm ermöglicht wird. Hier müssen der Einfallswinkel und der Austrittswinkel des Röntgenstrahls sehr flach sein, da man sonst durch die sehr dünne Probe strahlt und es zu keinen Reflexionen kommt. Durch den Einsatz der in-plane Achse können spezielle Parameter aufgenommen werden, zum Beispiel die bevorzugte Kristallorientierung in Abhängigkeit von der Eindringtiefe der Röntgenstrahlen und der Probenoberfläche.

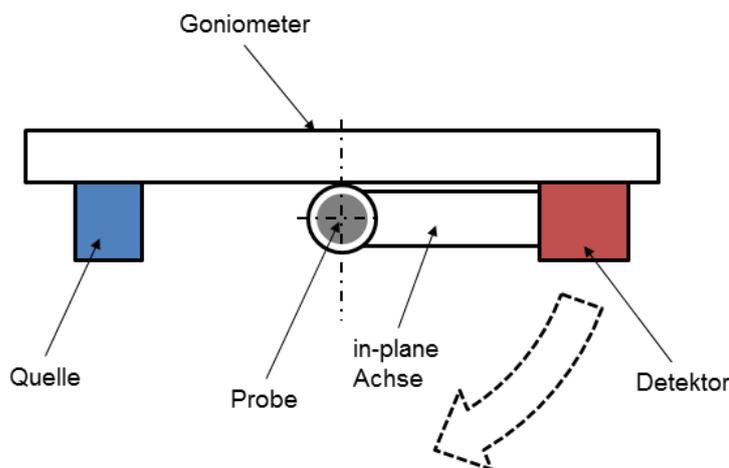


Abbildung 44: Ansicht des Goniometers von oben mit in-plane Achse, Quelle: Eigene Darstellung.

- **Technische Daten**

Bei diesem Diffraktometer wird nicht die Linearität über den gesamten Winkelbereich angegeben, sondern die Wiederholgenauigkeit des Winkels $2\theta=0^\circ$ nach Einbau der optischen Komponenten und automatischer Justierung.

Weiters wird zum Winkelbereich 2θ keine Angabe gemacht, deshalb wird in der folgenden Tabelle der Wert des Ultima IV Diffraktometers von Rigaku herangezogen, welches ein weiteres Mehrzweckdiffraktometer darstellt.

Art des Goniometers	Vertikale Goniometerachse, Theta-Theta Goniometer
Diffraktionsradien	300mm; 105-300mm einstellbar
Winkelbereich	keine Angabe (Ultima IV $-3^\circ < \text{Zwei-Theta} \leq 162^\circ$ abhängig von der Konfiguration Detektor/Röntgenquelle/Optik ⁷⁹)
Maximale Winkelgeschwindigkeit	keine Angabe
Kleinste Auflösung	0,0001°
Linearität	Keine Angabe
Wiederholgenauigkeit bei 0°	0°±0,005° (Zwei-Theta=0°)
Außenabmessungen	Höhe 1870mm x Breite 1267mm x Tiefe 850mm
Gewicht	750kg

Tabelle 3: Technische Daten SmartLab, Quelle: Rigaku Corporation (2014), Online-Quelle [16.09.2016].

- **Zubehör**

Als 2D-Detektoren kommen die von Rigaku selbst entwickelten HyPix-400 und HyPix-3000 zum Einsatz, die beide auf der Halbleitertechnik beruhen. Der HyPix-400 kann auch als 1D oder 0D-Detektor verwendet werden. Dies wird durch eine Software ermöglicht und bietet eine aktive Fläche von 400mm². Der HyPix-3000 bietet im Gegensatz dazu eine viel größere aktive Fläche von 3000mm² bei gleicher Funktionalität und Pixelgröße⁸⁰. Als 1D-Detektor wird der auch selbst entwickelte D/teX Ultra 250 angeboten, welcher ein Halbleiterstreifendetektor ist und ebenfalls mittels Software als 0D-Detektor verwendet werden kann. Der Vorteil dieses Detektors ist seine Schnelligkeit von mehr als 2×10^8 cps.

Bei den Quellen können zwei Arten in diesem Diffraktometer verwendet werden, und zwar standardmäßige Sealed-Tube Quellen und Drehanoden mit einer Leistung bis 9kW, welche automatisch im Diffraktometer justierbar sind und als Standardanodenmaterial Kupfer verwenden. Andere Materialien sind optional erhältlich.⁸¹

Das SmartLab ist mit einer Cross Beam Optics (CBO) ausgestattet. Diese Optik wird auf der primären Seite des Goniometers verwendet, also zwischen Röntgenquelle und Probe. Sie ermöglicht ein automatisches Umschalten zwischen einem Divergenzspalt und einem Röntgenspiegel. Das heißt, dass zwischen einer Bragg-Brentano-Geometrie und Parallelstrahlgeometrie gewechselt werden kann, ohne dass ein Umbau von Komponenten erforderlich ist.

⁷⁹ Vgl. Rigaku Corporation (2016), Online-Quelle [18.09.2016].

⁸⁰ Vgl. Rigaku Corporation (2016), Online-Quelle [18.09.2016].

⁸¹ Vgl. Rigaku Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].

Röntgenspiegel, Schlitze und Monochromatoren können automatisch sowohl in der Höhe wie auch im Winkel justiert werden.

Für die Probenmanipulation werden verschieden große, automatische Probenwechsler, rotierende Probenträger sowie ein Verfahren oder Verkippen in Koordinatenrichtung X und Y angeboten. Des Weiteren sind verschiedene Eulerwiegen erhältlich, um die Probe um mehrere Achsen zu drehen. Diese Probenträger werden automatisch durch das Smart sample System erkannt. Die optional erhältlichen Kammern zur Temperierung der Probe werden nicht alle automatisch erkannt, da einige auch zugekauft werden.

5.5 Vergleich und Erkenntnisse

Der Vergleich der vorgestellten Konkurrenzsysteme soll einen Überblick über die aktuellen Standards am Markt geben und zusätzlich die einzelnen Besonderheiten herausheben, welche jedes Gerät ausmachen. Die daraus folgenden Erkenntnisse sollen die Definition der Anforderungen für das Messgerät unterstützen und zeigen, wo ein Potential für Verbesserungen besteht, beziehungsweise in welchen Punkten Wettbewerbsvorteile herausgearbeitet werden können.

Im ersten Punkt sollen die Besonderheiten der Diffraktometer verglichen werden. Bei den beiden Geräten von Bruker und Rigaku werden die Komponenten der Optik und auch teilweise die Probenträger automatisch erkannt. Die automatische Erkennung stellt einen wichtigen Punkt für die komfortable Bedienung des Geräts dar, denn durch die Software erfolgt eine Rückmeldung über die Kompatibilität der eingebauten Komponenten für die vorgesehene Messung. Wird ein unpassendes Bauteil erkannt, zeigt die Software an, durch welches es zu ersetzen ist. Ein weiterer Vorteil, den die automatische Erkennung bietet, ist die dadurch ermöglichte automatische Justierung des Geräts, welche den Bedienkomfort erhöht. Das Empyrean hat keine automatische Erkennung der eingebauten Komponenten und bietet daher nur eine eingeschränkte Überprüfbarkeit. Der Austausch von Komponenten erfolgt nur bei dem D8 Advance ohne ein zusätzliches Werkzeug, bei den beiden anderen Geräten ist ein Werkzeug für den Umbau erforderlich. Das PreFIX-System von PANalytical wird konsequent für die Montage aller austauschbaren Bauteile des Diffraktometers eingesetzt. Eine zusätzliche Achse bietet als einziges Gerät nur das SmartLab, die sogenannte in-plane Achse, welche ein Verfahren parallel zur Probenoberfläche oder ein Ausschwenken in jeder beliebigen Winkelposition ermöglicht.

Im Bereich der Optiken bieten das D8 Advance und das SmartLab automatisch einstellbare Optiken an, welche es auf der primären Seite ermöglichen, ohne Umbau zwischen einer Parallelgeometrie und einer Reflexionsgeometrie zu wechseln. Nur Bruker bietet auch zwischen Probe und Detektor eine weitere automatisch einstellbare Optik an. Bei allen Geräten gibt es eine Vielzahl an Schlitzen, welche im optischen Pfad eingesetzt werden und automatisiert verstellbar sind. Auch werden überall verschiedene Monochromatoren und Röntgenspiegel angeboten.

Das D8 Advance und das Empyrean bieten Sealed-Tubes mit verschiedenen Anodenmaterialien an, welche ein einfaches Verstellen zwischen einem linienförmigen und punktförmigen Röntgenstrahl ermöglichen. Dadurch wird der Ausbau aus dem Gerät vermieden und eine Justierung kann entfallen. Auch bei dem Diffraktometer SmartLab kann zwischen verschiedenen Anodenmaterialien ausgewählt werden, jedoch ist kein vereinfachtes Wechseln zwischen den Strahlgeometrien vorgesehen. Bei Bruker

werden zusätzlich zu den Standardquellen noch Drehanoden, welche Rigaku ebenfalls anbietet, Flüssigmetallröhren und Mikrofokusröntgenquellen eingesetzt.

Bei den Detektoren bietet jeder Hersteller eine große Auswahl seiner eigens entwickelten Detektoren an, wobei PANalytical als einziger in der Lage ist auch einen 3D-Detektor, für Computertomografien, anzubieten.

Wie auch bei den Detektoren gibt es bei jedem der drei Diffraktometer eine große Auswahl an Probenträgern, welche ein Verfahren, Verkippen, Temperieren, unter Druck setzen der Probe ermöglichen und es außerdem erlauben, Proben verschiedener Luftfeuchtigkeit sowie Gasen auszusetzen. Auch werden Probenträger auf Kundenwunsch entwickelt oder angepasst. Das Emyrean bietet mit dem ScatterX⁷⁸ einen Probenträger, in dem die Probenumgebung evakuiert werden kann. Dadurch kann die durch die Luft hervorgerufene Streuung minimiert werden, wodurch er sich sehr gut für SAXS-Messungen eignet. Alle drei Wettbewerber bieten derzeit auch verschiedene Röntgenprobenträger der Firma Anton Paar an, welche in ihrem Diffraktometer sowie in der Software integriert sind.

Im nächsten Punkt werden die technischen Daten betrachtet. Alle drei Geräte haben eine vertikale Goniometerachse, meist mit einem Theta-Theta Goniometer. In den maximalen Diffraktionsradien unterscheiden sich die drei Geräte allerdings stark, dennoch können bei allen drei Geräten verschiedene Positionen, je nach Applikation, eingestellt werden. Das Emyrean hat den geringsten Diffraktionsradius mit nur 240mm, das D8 Advance und das SmartLab bieten mit maximal 280mm beziehungsweise 300mm schon bedeutend mehr Platz für die Probenmanipulation. Durch dieses vergrößerte Platzangebot wird auch der Einbau von Komponenten erleichtert und durch die Flexibilität der Einstellung der Diffraktionsradien kann auf verschiedene Proben, verschiedene Größen und verschiedene Messanwendungen reagiert werden.

Die maximalen Winkelbereiche im oberen Zwei-Theta-Bereich hängen von den eingebauten optischen Komponenten, wie zum Beispiel Röntgenspiegel, Divergenzspalte und Röntgenquelle ab. Die größten Winkelbereiche sind 162° beim SmartLab und jeweils 168° beim D8 Advance und beim Emyrean, das heißt, dass zwischen Quellenarm und Detektorarm nur 12° beziehungsweise 18° übrig bleiben, in denen die optischen Komponenten Platz finden müssen und es zu keiner Kollision kommen darf. Alle drei geben als kleinste Auflösung oder auch kleinste Schrittweite 0,0001° an. Die Linearität oder auch die Positioniergenauigkeit über den gesamten Winkelbereich wird bei zwei Geräten spezifiziert, D8 Advance und Emyrean, und liegt bei $\pm 0,01^\circ$. Diese Angabe bedeutet, dass unter konstanten Bedingungen, Temperatur und Luftfeuchte, jeder angefahrte Wert innerhalb einer bestimmten Abweichung zum absoluten Wert liegt. Beim SmartLab wird hingegen als Qualitätskriterium die Reproduzierbarkeit des direkten Strahls bei Zwei-Theta=0° angegeben, welche $0^\circ \pm 0,005^\circ$ beträgt. Dies wird mit jeder eingebauten optischen Komponente nach der automatischen Selbstjustierung garantiert.

Werden Außenabmessungen und Gewicht verglichen, lässt sich erkennen, dass die Dimensionen der drei Messgeräte ähnlich sind, jedoch das Emyrean Diffraktometer mit 1150kg mit Abstand das schwerste Gerät darstellt.

Die Erkenntnis aus diesem Vergleich ist, dass ein hoher Grad der Automatisierung erreicht werden muss, um damit auch die Bedienung des Geräts zu vereinfachen. Auch für Nicht-Spezialisten soll die Bedienung vereinfacht werden und vor allem ein geführter Umgang mit dem Messgerät möglich sein. Auch der Austausch von Komponenten sollte so einfach wie möglich, am besten ohne Werkzeug, gestaltet werden. Des Weiteren sollten die Optiken so aufgebaut sein, dass sie auch einen automatischen Wechsel der Geometrien zulassen. Es müssen verschiedene Röntgenspiegel, Monochromatoren, Divergenzspalten, Sollerspalte und Filter angeboten werden. Bei den Röntgenquellen ist, um dem Konzept einer vereinfachten Bedienung zu folgen, ein einfacher Wechsel zwischen den Strahlgeometrien vorzusehen. Es sollten auch verschiedene, wenn möglich weiterentwickelte Arten von Quellen angeboten werden. Im Bereich der Detektoren besteht sowohl die Notwendigkeit, eigene Detektoren zu entwickeln, also auch Detektoren anderer Hersteller im Gesamtsystem integrieren zu können. Auf den Kunden angepasste Probenträger zu bieten ist ein wichtiger Punkt, da alle drei Hersteller ein großes Standardsortiment besitzen.

Der Diffraktionsradius sollte so groß gewählt werden, dass eine gute Zugänglichkeit für die Probenmanipulation gewährleistet wird, wobei das Gerät nicht zusätzlich vergrößert werden soll. Des Weiteren sollten der Radius einstellbar beziehungsweise Quelle und Detektor an verschiedenen Positionen fixierbar sein. Beim Winkelbereich sollte der positive sowie der negative Zwei-Theta Winkel maximiert werden. Dabei kann man sich an den maximalen Werten der Konkurrenz orientieren. Die Positioniergenauigkeit muss über den ganzen Winkelbereich kleiner gleich $\pm 0,01^\circ$ sein, und es sollte dem Kunden auch die Möglichkeit gegeben werden, dies mit Standards zu überprüfen. Die Außenabmessungen wie auch das Gewicht sind bei allen Geräten sehr groß, daher sollte auch ein besonderes Augenmerk auf die Kompaktheit sowie das Gewicht des Geräts gelegt werden, um diese beiden Parameter ohne Auswirkung auf das Messverfahren zu optimieren.

Zur Veranschaulichung dient der in der folgenden Tabelle dargestellte Vergleich:

Kriterium	Bruker D8 Advance	PANalytical Empyrean	Rigaku SmartLab
Automatische Erkennung der austauschbaren Komponenten	+	-	+
Komponentenaustausch ohne Werkzeug	+	-	-
In-plane Achse	-	-	+
Automatisierte Optik primärseitig	+	-	+
Automatisierte Optik sekundärseitig	+	-	-
Vereinfachtes Wechseln der Strahlgeometrien bei Sealed-Tubes	+	+	-
3D-Detektor	-	+	-
SAXS-Probenräger bei dem Umgebung evakuiert ist	-	+	-
Diffractionsradien	250mm/280mm und Positionen dazwischen einstellbar	240mm, kann reduziert werden	300mm; 105-300mm einstellbar
Winkelbereich	-110°<Zwei-Theta≤168° abhängig von der Konfiguration	-111°<Zwei-Theta≤168° abhängig von der Konfiguration	Ultima IV -3°<Zwei-Theta≤162° abhängig von der Konfiguration
Auflösung	0,0001°	0,0001°	0,0001°
Genauigkeit	Mindestens ±0,01° (Linearität)	Mindestens ±0,01° (Linearität)	0°±0,005° (Zwei-Theta=0° Wiederholgenauigkeit)
Gewicht	770kg	1150kg	750kg

Tabelle 4:Vergleich der Messgeräte der drei Mitbewerber, Quelle: Eigene Darstellung.

6 DEFINITION DER ANFORDERUNGEN

Hier werden die grundlegenden Anforderungen an das Diffraktometer unter Berücksichtigung der Erkenntnisse aus Kapitel 5 definiert.

6.1 Grundgerät

- **Größe und Gewicht**

Die Anforderungen an das Grundgerät sind eine möglichst kompakte und leichte Bauform, um das Gerät ohne Transporthilfsmittel wie Gabelstapler oder Kran montieren zu können. Dabei sollte die Tiefe des Geräts 800mm und die Breite 1200mm nicht überschreiten, um auf einer Europoolpalette verschickt werden zu können. Abdeckungen und diverse Außenteile können auch abnehmbar gestaltet und erst vor Ort montiert werden, um die kompakten Abmessungen für ein Versenden einzuhalten. Das Gewicht sollte soweit wie möglich reduziert werden und 400kg nicht überschreiten, um das Gerät auch auf bereits bestehende Labortische stellen zu können.

- **Anschlüsse**

Die Anschlüsse für die Versorgung des Geräts und der eingebauten Komponenten wie Energie, Kühlflüssigkeit, Druckluft und anderen Gasen sowie Durchführungen für weitere Anschlussmöglichkeiten sollen sowohl im Inneren als auch an der Außenseite des Geräts zentral an einem Platz zusammengefasst werden. Dieser Ort ist im Inneren des Messgeräts so auszuwählen, dass ein Anschließen der Versorgungsleitungen, insbesondere jener von Probenträgern, einfach und schnell erfolgen kann.

- **Gestaltung des Innenraums**

Für eine einfache Bedienung des Geräts ist ein großzügiger und aufgeräumter Platz im Innenraum wichtig, mit weit öffnenden Türen, um den Zugang zu erleichtern.

- **Modularer Aufbau**

Des Weiteren soll die Möglichkeit des modularen Ausbaus gegeben sein, das heißt, ein Einbau mehrerer 19" Komponenten (Regler, Elektronik, ...) für die Erweiterung mit verschiedenen Probenträgern, Detektoren und Röntgenquellen muss ermöglicht werden. Das bedeutet auch, dass die Führung von Kabeln in das Gerät durch entsprechend verschließbare und strahlensichere Durchbrüche vorzusehen ist.

- **Sicherheit**

Da es sich bei dem Messgerät um eine Maschine handelt, ist für die Gewährleistung der mechanischen Sicherheit eine Risikobeurteilung nach ISO 13849-1, der Norm für die Sicherheit von Maschinen, durchzuführen. Das daraus ermittelte Performance Level und die dadurch festgelegte Architektur müssen bei der Auswahl der Bauteile als auch beim Aufbau der Sicherheitsfunktionen und deren Verschaltung berücksichtigt werden. Durch die ISO 13849-2 hat anschließend die Validierung der sicherheitsbezogenen Teile zu erfolgen. Da es sich weiters um ein Gerät handelt, welches mit Röntgenstrahlung arbeitet, sind die Bestimmungen der Österreichischen Allgemeinen

Strahlenschutzverordnung einzuhalten. Zusätzlich hat eine Strahlensicherheitsprüfung zu erfolgen, welche das Gerät als Vollschutzgerät ausweist (§83 der Österreichischen Allgemeinen Strahlenschutzverordnung).

- **Design**

Als letzter Punkt ist das Design zu erwähnen, welches nicht vernachlässigt werden darf. Es soll an die konzerninterne Designrichtlinie angepasst sein, wobei dies die Funktionalität aber auf keinen Fall einschränken darf.

6.2 Goniometer

Es ist ein vertikales Theta-Theta Zwei-Kreis-Goniometer mit einem Diffraktionsradius von mindestens 300mm zu entwickeln, welcher flexibel einstellbar auszuführen ist. Die Arme des Goniometers sollen eine Schnellwechseleinheit für den Austausch der optischen Komponenten beinhalten und die Energieversorgung ermöglichen. Auch der Datenaustausch, die Ansteuerung und die Erkennung der Komponenten haben über die Goniometerarme zu erfolgen. Des Weiteren muss ein automatisches Erkennen der austauschbaren Komponenten unbedingt vorhanden sein. Das Schnell-Wechselsystem soll mit maximal einem Werkzeug zu bedienen sein. Der Detektorarm soll modular erweiterbar sein, um je nach Ausbaustufe und Modell des Diffraktometers weitere Achsen anbieten zu können. So kann beispielsweise der gestreute Strahl der Probe in Form einer Kugel mit Längen- und Breitengraden abgetastet werden. Bei der Auswahl des Antriebs des Goniometers ist darauf zu achten, dass die eingesetzten Komponenten auch für die Antriebe von zusätzlichen Achsen einzusetzen sind, um damit ein durchgängiges Antriebskonzept zu realisieren. Dabei sind die Antriebe so auszulegen, dass diese für die aktuell angenommene maximale Last ausreichend überdimensioniert sind, das heißt erstens eine ausreichende Sicherheit von mindestens zwei zu bieten haben und zweitens, um für noch nicht definierte zukünftige Applikationen gerüstet zu sein. Bei der Genauigkeit darf, nach maximal einmaliger Kalibrierung des Winkelmesssystems auf absolute Werte, eine Abweichung von $\pm 0,01^\circ$ bei Anfahren eines beliebigen Winkels über den gesamten Winkelbereich nicht überschritten werden. Der dabei geltende maximale Winkelbereich Zwei-Theta muss im Hinblick auf die Konkurrenzgeräte mindestens -120° bis 168° betragen. Als nächster Punkt ist die Kabel- und Schlauchführung so aufzubauen, dass keine großen zusätzlichen Kräfte am Goniometer entstehen und es zu keiner Kollision beziehungsweise Abscheren von Kabeln und Schläuchen kommt. Die Kosten für die reine Antriebseinheit dürfen dabei, wie schon in der Aufgabenstellung beschrieben, 7000€ nicht überschreiten.

6.3 Zubehör

Beim Zubehör soll als Standard eine von der Anton Paar GmbH entwickelte und gebaute Sealed-Tube Röntgenquelle zum Einsatz kommen. Diese soll ein Wechseln der Strahlgeometrie ohne einen Ausbau ermöglichen. Im Verlauf der Markteinführung müssen je nach Kundenanforderungen Röntgenquellen anderer Hersteller einbaubar sein, beziehungsweise sind selbst weitere Quellen zu entwickeln. Bei den optischen Komponenten muss ein hoher Grad der Automatisierung vorhanden sein und eine große Auswahl angeboten werden. Das heißt, es muss eine Optik entwickelt werden, in der ein automatisiertes Umschalten zwischen Bragg-Brentano-Anordnung und Parallelstrahlgeometrie erfolgt. Alle Divergenz-

und Antistreuspalte müssen automatisch justierbar und einstellbar sein. Bei Sollerblenden sind auch verschiedene Arten anzubieten, das heißt, mit verschiedenen Abständen und Längen der Blenden. Bei den Detektoren sind zumindest im ersten Schritt eigene 0D- und 1D-Detektoren zu entwickeln und je nach Kundenanforderungen sind Detektoren anderer Hersteller implementierbar sein. Alle Probenträger, die derzeit am Markt verfügbar und für Standardmessungen notwendig sind, müssen auch mit dem neu entwickelten Diffraktometer angeboten werden. Daraus folgt, dass Probenträger für ein Bewegen und Verkappen der Probe in alle Koordinatenrichtungen zu entwickeln sind. Da Anton Paar selbst Röntgenkammern entwickelt, herstellt und vertreibt, müssen im Besonderen bei der Temperierung von Proben verbesserte Probenträger angeboten werden. Es ist zu erkennen, dass in vielen Fällen stark auf den Kunden angepasste Lösungen zu entwickeln sind und dadurch eine hohe Flexibilität des Gesamtsystems erforderlich ist.

7 KONZEPT ANTRIEB EINES ZWEI-KREIS-GONIOMETERS

In diesem Kapitel wird ein Konzept für den Antrieb eines Zwei-Kreis-Goniometers erarbeitet, inklusive der Auswahl der Komponenten. Es erfolgt eine grobe Skizzierung der Ausgangssituation, das heißt, es wird gezeigt, was der grundsätzliche Aufbau und die Funktionen sind, welche realisiert werden müssen und welche Komponenten dazu nötig sind. Danach erfolgt eine Berechnung der wirkenden Kräfte und Momente, nach denen der Antrieb ausgelegt werden muss. Im nächsten Schritt werden verschiedene Varianten aufgezeigt und daraus eine Umsetzungsvariante ermittelt. Im letzten Teil erfolgt die Auswahl der Komponenten, welche für die Umsetzung notwendig sind und eine Übersicht über die Kosten.

7.1 Prinzipskizze

Der Antrieb eines Zwei-Kreis-Goniometers besteht aus einem antreibenden Element, zum Beispiel einem Motor oder einem Motor mit Getriebe, inklusive einem Winkelmesssystem pro Drehachse. Dies wird in Abbildung 45 dargestellt. Die Anordnung der Antriebe kann beliebig sein und muss nicht hintereinander erfolgen. Die Winkelmessung muss am Abtrieb eines Getriebes oder sonstigem Übertragungselement erfolgen, um den Winkelfehler dieser Komponenten auszuschließen. Die Lagerung der beiden Kreise muss eine hohe Steifigkeit aufweisen und die beiden Achsen präzise zueinander führen.

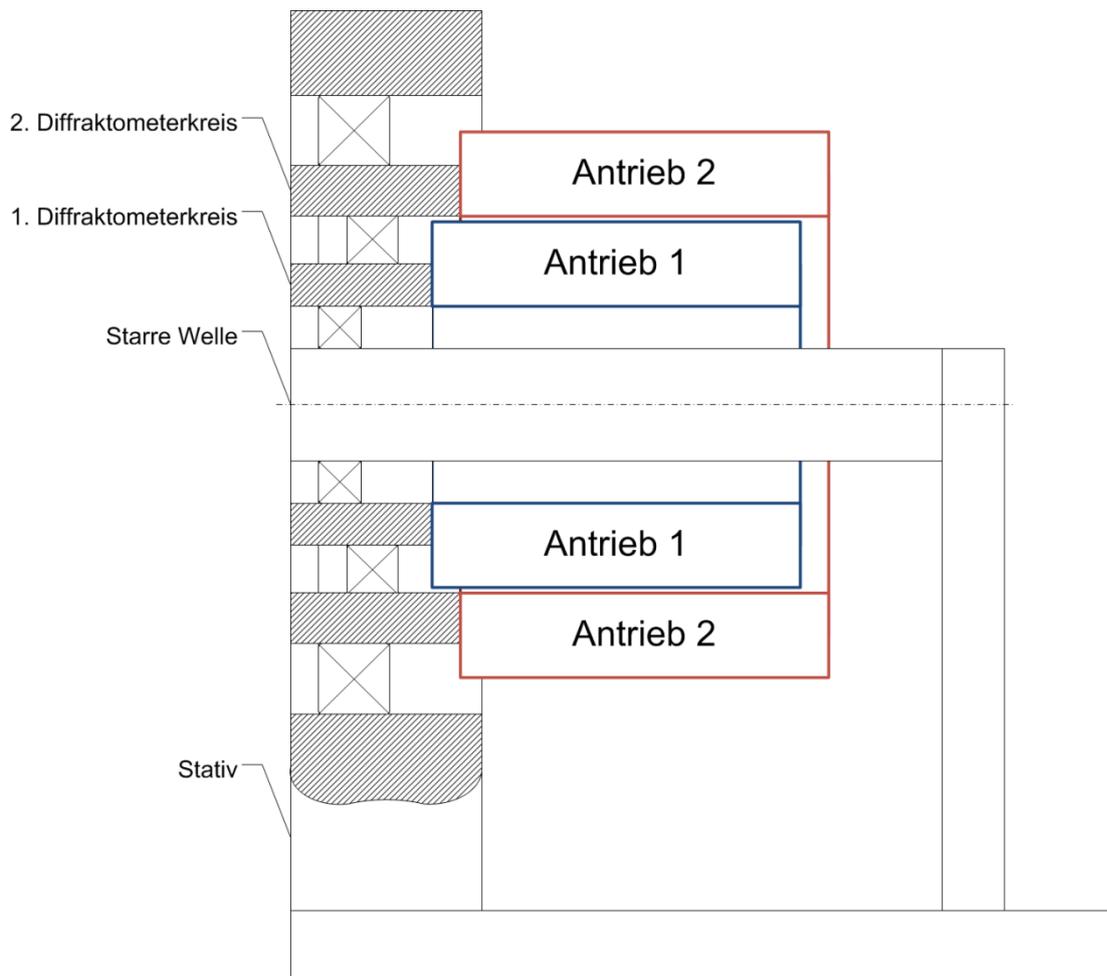


Abbildung 45: Prinzipskizze Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.

7.2 Wirkende Kräfte und Momente

Für die Auslegung des Antriebes werden die maximalen statischen Kräfte betrachtet, das heißt, es wird die Beschleunigung der Massen vernachlässigt. Da bei der Anwendung nur niedrige Beschleunigungen und Geschwindigkeiten auftreten (im Bereich von maximal 10°/s) ist damit eine sehr gute Annäherung möglich. Die maximale Belastung tritt bei horizontalen Goniometerarmen auf. Da beide Kreise des Goniometers mit demselben Antrieb bewegt werden, muss für die Auslegung der stärker belastete Arm betrachtet werden. Aufgrund der optischen Komponenten und der Röntgenquelle ist die Belastung des Quellenarmes am größten. Das Gewicht der Röntgenquelle inklusive Spiegelgehäuse wird mit 10kg festgesetzt. Das Gewicht des Arms inklusive der optischen Komponenten und der integrierten Schnellwechseleinrichtung wird mit 12kg angenommen. Die beiden Massen bewirken Kräfte welche sich an unterschiedlichen Angriffspunkten befinden, für die Dimensionierung werden die beiden Massen addiert und auf den Angriffspunkt der Röntgenquelle bezogen. Weiters wird der Abstand a von der Mitte des ersten Lagers bis zum Schwerpunkt der Röntgenquelle wird mit 200mm angenommen.

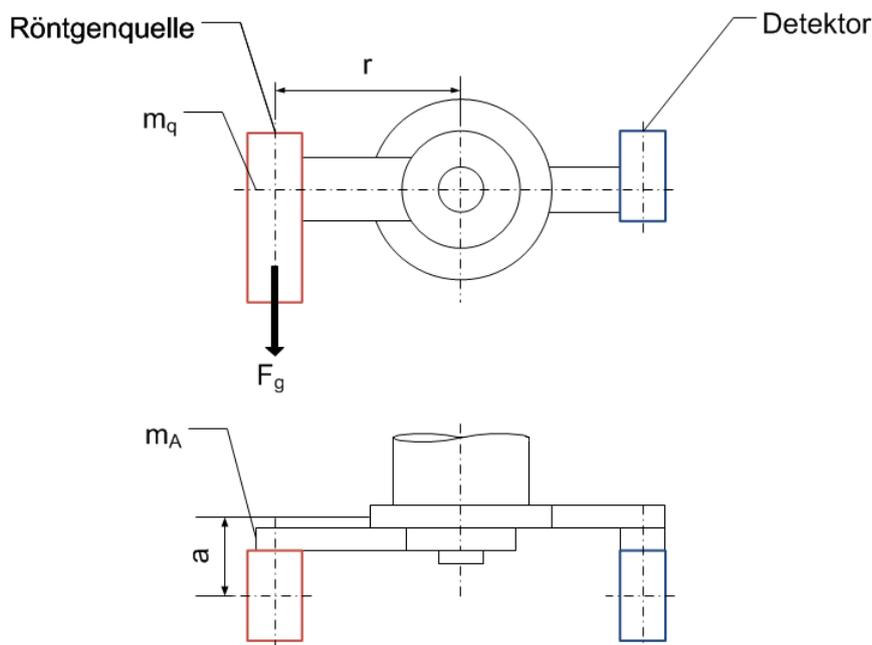


Abbildung 46: Kräfteverhältnisse am Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.

Diffractionsradius	r	350mm
Axialer Abstand vom 1. Lager	a	200mm
Gewicht der Röntgenquelle	m_q	10kg
Gewicht des Arms	m_A	12kg

$$F_G = (m_q + m_A)g = (10 + 12)9,81 = 215,82N$$

F_G/N Gewichtskraft der Komponenten
bezogen auf den Diffractionsradius

g/ms^{-2} Erdbeschleunigung

$$g=9,81m/s^2$$

$$M_A = F_G \cdot r = 215,82 \cdot 350 = 75537Nmm = 75,537Nm$$

M_A/Nm Abtriebsdrehmoment

$$M_K = F_G \cdot a = 215,82 \cdot 200 = 43164Nmm = 43,164Nm$$

M_K/Nm Kippmoment

7.3 Antriebskonzept

Zur praktischen Umsetzung des Goniometers inklusive des Antriebes werden nun verschiedene Ansätze und deren Eigenschaften näher betrachtet. Aus dem daraus folgenden Vergleich wird am Ende eine Entwurfsvariante ausgewählt, bei der die Machbarkeit aufgrund der Vorgaben und Anforderungen im Detail überprüft wird.

7.3.1 Ermittlung der Varianten und Beurteilungskriterien

In diesem Abschnitt werden mögliche Varianten aufgezeigt und die Beurteilungskriterien festgelegt, um einen Vergleich zwischen ihnen zu ermöglichen. Die Beurteilung erfolgt mittels Punktesystem und Gewichtung der einzelnen Kriterien.

- **Varianten**

Die erste in Frage kommende Variante ist ein Antrieb mittels Torquemotoren, das heißt, der Rotor des Motors wird direkt mit einem Goniometerkreis verbunden. Diese Art des Antriebs wird auch Direktantrieb genannt, da kein mechanisches Übertragungselement, wie zum Beispiel ein Getriebe, notwendig ist. Daraus folgt, dass der Antrieb, das Positionserfassungssystem und die Regelung auf die Anwendung angepasst werden. Dadurch werden ein spielfreier Lauf und eine hohe Genauigkeit erreicht. Die Vorteile, die solche Direktantriebe bringen, sind eine Verringerung des Bauraums und eine Kostenersparnis aufgrund der nicht benötigten Übertragungselemente. Als Motoren kommen heutzutage fast ausschließlich permanenterregte Synchronmaschinen zum Einsatz, welche nicht nur für rotierende Anwendungen verwendet werden, sondern auch für lineare Bewegungen. Als Beispiel dafür sind der Linearmotor und der Polysolenoidmotor zu nennen (siehe Abbildung 47). Torquemotoren finden besonders bei hohen Drehmomenten und niedrigen Drehzahlen Verwendung, zum Beispiel in Werkzeugmaschinen.⁸²

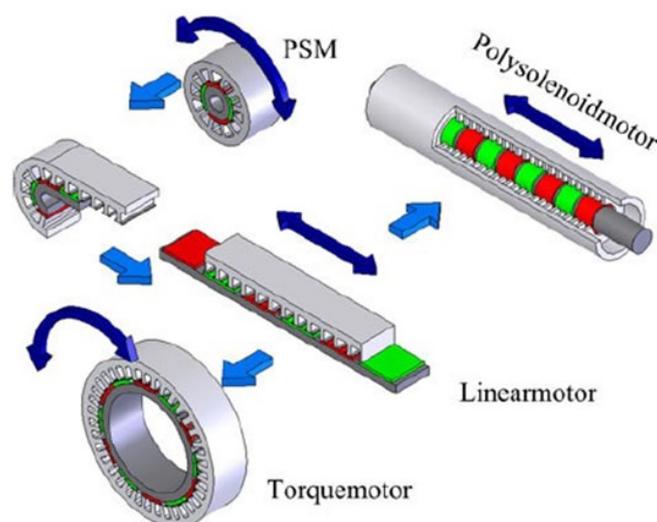


Abbildung 47: Vom permanenterregten Synchronmotor zu Direktantrieben, Quelle: Teigelkötter (2013), S. 148.

⁸² Vgl. Teigelkötter (2013), S. 147 f.

Die Bildung des Drehmoments erfolgt auf der aktiven Länge des Motors. Des Weiteren geht der Durchmesser des Rotors quadratisch in die Berechnung des Drehmoments ein. Daraus lässt sich erkennen, dass die Baugröße zum Drehmoment proportional ist.⁸³

Als weitere Möglichkeit ist ein Antrieb mit Übertragungselement, das heißt einem Getriebe, zu nennen. Es werden drei unterschiedliche Getriebe betrachtet: ein Planetengetriebe, ein Harmonic-Drive (oder auch Wellgetriebe) und ein Schneckengetriebe. Der Antrieb erfolgt bei allen drei Getrieben über einen Schrittmotor. Er wird deshalb ausgewählt, da das Gesamtsystem weder eine hohe Dynamik noch hohe Drehzahlen erfordert. Die Vorteile des Schrittmotors sind das relativ große Drehmoment bei geringen Drehzahlen und das Positionieren ohne zusätzlichen Winkelsensor. Für das Positionieren wird nur ein Referenzpunkt benötigt, von dem aus die Schritte, also der Winkel, für die Positionierung zurückgelegt werden.⁸⁴ Das Planetengetriebe wird vor allem dort eingesetzt, wo hohe Leistungen und hohe Drehzahlen benötigt werden. Der Aufbau besteht aus einem Sonnenrad, den umlaufenden Planetenrädern und dem Hohlrad (siehe Abbildung 48). Der Antrieb beziehungsweise Abtrieb erfolgt über das Sonnenrad oder das Hohlrad. Die Planetenräder führen dabei eine Drehung um sich selbst und eine Umlaufbewegung aus.⁸⁵ Diese Komponenten bilden ein einstufiges Planetengetriebe und es wird eine Übersetzung von Hohlrad auf Sonnenrad erreicht. Werden mehrere Stufen von Planetengetrieben zusammengesetzt, können noch höhere Übersetzungen erreicht werden. Die Vorteile liegen in der coaxialen Anordnung von Antriebe und Abtrieb, der kompakten Bauweise, dem geringen Gewicht, der günstigen Raumleistung und dem hohen Wirkungsgrad⁸⁶.

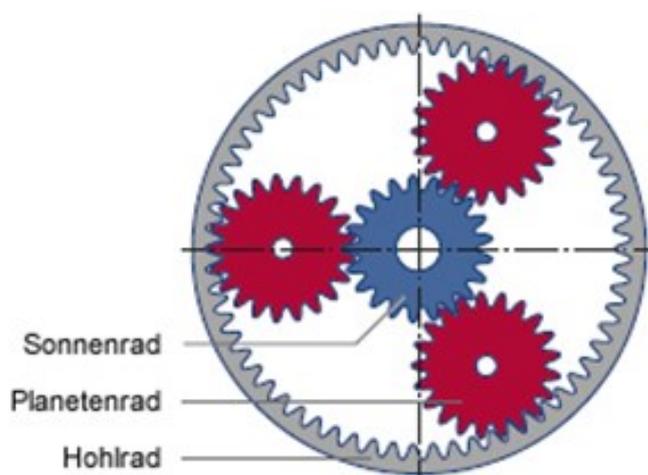


Abbildung 48: Aufbau eines einstufigen Planetengetriebes, Quelle: Voith GmbH (o.J.), Online-Quelle [16.01.2017] (leicht modifiziert).

Das Harmonic-Drive-Getriebe ist ein Wellgetriebe, das heißt, es wird die Verformung eines Bauteils ausgenutzt, um eine Bewegung zu erzeugen. Der Flexspline wird über ein spezielles Kugellager auf dem

⁸³ Vgl. Teigelkötter (2013), S. 150.

⁸⁴ Vgl. Babel (2014), S. 140 f.

⁸⁵ Vgl. Looman/Pahl (1988), S. 19 ff.

⁸⁶ Vgl. Looman/Pahl (1988), S. 19.

Wave Generator elliptisch verformt. Die elliptische Form des Flexspline greift an zwei Stellen in den nicht verformbaren innenverzahnten Circular Spline ein. Wird der Wave Generator nun gedreht, verlagert sich die Ellipse und somit der Eingriffsbereich der Zähne des Flexspline. Um eine Übersetzung zwischen Wave Generator und Flexspline zu erhalten, besitzt der fest stehende Circular Spline zwei Zähne mehr. Deshalb entsteht eine Relativbewegung zwischen Flexspline und Circular Spline von zwei Zähnen bei einer Umdrehung (siehe Abbildung 49). Durch die Anzahl der Zähne kann die Übersetzung variiert werden. Die Drehrichtung des Flexspline ist bei fixiertem Circular Spline entgegengesetzt zum Antrieb. Die Hauptvorteile, die solch ein Getriebe bietet, sind eine sehr gute Positionier- und Wiederholgenauigkeit, hohe Übersetzungen in einer Stufe, hoher Wirkungsgrad und kleine Abmessungen bei geringem Gewicht.⁸⁷

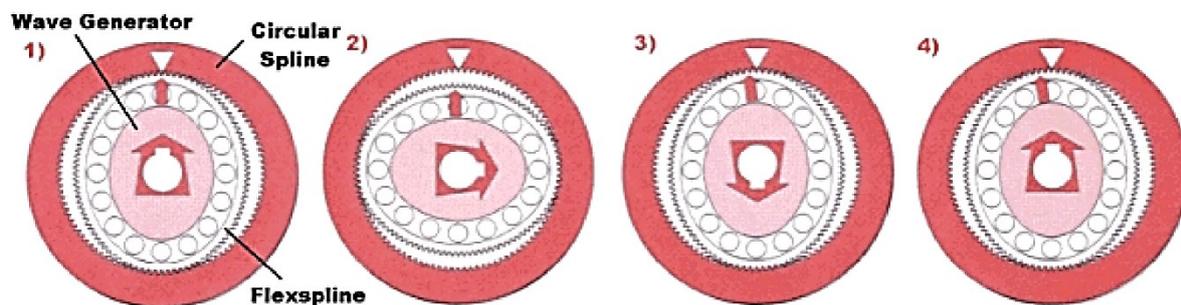


Abbildung 49: Funktionsweise Harmonic-Drive-Getriebes, Quelle: Kayser (2016), Online-Quelle [29.09.2016].

Das Schneckengetriebe besteht meist aus einer angetriebenen Schneckenwelle und einem in 90° dazu angeordneten Schneckenrad, welches dabei den Abtrieb darstellt. Sie gehören zur Gruppe der Schraubgetriebe, bei denen ein stetiges Gleiten stattfindet. Die Schneckenwelle ist einer Schraube ähnlich und dreht das Schneckenrad bei einer Umdrehung um einen Zahn weiter. Die Bauform ist kompakt und es sind hohe Übersetzungen möglich. Des Weiteren ist das Getriebe selbsthemmend, das bedeutet, bei Einleiten eines Drehmoments am Abtrieb ist aufgrund der Reibmomente im Getriebe keine Bewegung möglich. Der Wirkungsgrad ist aufgrund des stetigen Gleitens kleiner als bei anderen Getriebearten, bei großen Übersetzungen und geringen Geschwindigkeiten kann der Wirkungsgrad auf unter 50% sinken. Für die Verzahnung wird ein einlauffähiges Material, wie zum Beispiel Bronze verwendet. Dies bedeutet, dass auch der Verschleiß im Gegensatz zu Zahnrädern aus Stahl sehr groß ist.⁸⁸

Generell gilt für die drei Getriebearten, dass ein minimales Spiel und eine sehr gute Wiederhol- und Positioniergenauigkeit bei der Anwendung in diesem Messgerät erforderlich sind.

⁸⁷ Vgl. Harmonic Drive AG (2016), Online-Quelle [30.09.2016].

⁸⁸ Vgl. Schlecht (2010), S. 1025 f.

Bei der letzten Variante wird als übertragendes Element für die Drehbewegung ein Kugelgewindetrieb in Kombination mit einem Schrittmotor angedacht. Bei diesem Aufbau wird die Mutter des Kugelgewindetriebs an einem der Goniometerkreise drehbar gelagert und auch der Motor wird in einem bestimmten Abstand am Gehäuse drehbar befestigt. Die Funktionsweise ähnelt der eines Kolbens bei einem Verbrennungsmotor, durch Drehen der Spindel verfährt die Mutter und es kommt infolge der Bewegung zu einer Drehung des Goniometerkreises (siehe Abbildung 50). Der Vorteil der Kugelgewindespindel ist die niedrige Reibung und, dass sie kein Umkehrspiel besitzt. Der Nachteil besteht darin, dass die Spindellänge sehr groß ausgeführt werden muss, um den gewünschten Winkelbereich zu erreichen. Dies bedeutet eine zusätzliche Lagerung am Ende der Spindel, um eine zu starke Durchbiegung zu vermeiden. Auch die Anordnung spielt eine wichtige Rolle, da zwei Antriebe benötigt werden und eine Kollision unter keinen Umständen passieren darf.

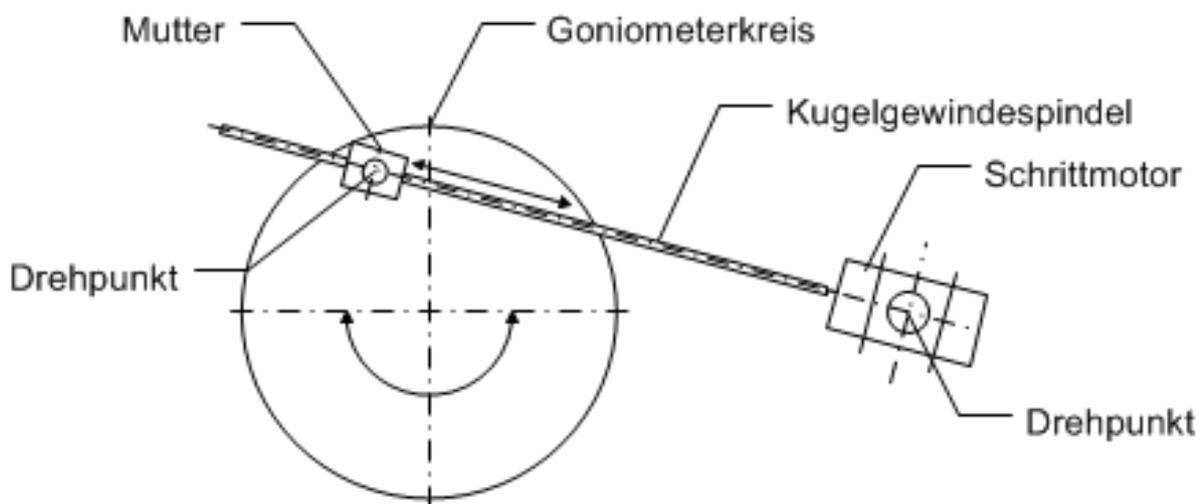


Abbildung 50: Spindeltrieb, Quelle: Eigene Darstellung.

• Beurteilungskriterien

Mit der Baugröße soll eine Abschätzung der Größe der benötigten Motoren beziehungsweise der Größe der Kombination Motor und Übertragungselement vorgenommen werden.

Beim Kriterium Winkelbereich sollen Einschränkungen der Drehbewegung bei bestimmten Varianten dargelegt werden. Es wird hier von einem Goniometer ausgegangen, an dem keine Bauteile an den Armen verbaut sind.

Die Genauigkeit umfasst die Positionier- und Wiederholgenauigkeit, sowie die Stabilität dieser beiden Faktoren über längere Zeit. Aufgrund der Tatsache, dass das Messen der Position erst am Abtrieb erfolgt, spielt die Genauigkeit der vorgelagerten Komponenten bei erster Betrachtung keine entscheidende Rolle, da der Antrieb durch die Gewichtskraft der angebauten Komponenten immer in einer Richtung vorgespannt wird. Wird aber ein Winkel von 90° überschritten, kippt der Goniometerarm um das Spiel weiter. Um dies zu minimieren, darf das Spiel nicht zu groß sein. Auch beim Ändern der Drehrichtung sollte nur ein geringes Spiel vorhanden sein, um die Regelung zu vereinfachen. Ein weiterer Punkt, warum die Genauigkeit dennoch eine Rolle spielt ist jener, das Messgerät auch ohne ein teures und hochpräzises Winkelmesssystem anbieten zu können und mit Hilfe eines im Vergleich dazu günstigen Encoders direkt am Schrittmotor eine Lowcost-Variante anbieten zu können.

Das Kriterium Hohlwelle gibt an, ob eine Ausführung mit Hohlwelle überhaupt möglich ist und welche Dimensionen erreichbar sind. Es wird, außer bei der Variante mit Kugelgewindetrieb, überall eine Hohlwelle benötigt, um einen platzsparenden Antrieb zu erreichen und eine starre Welle zur Aufnahme des Probenträgers durchzuführen.

Bei der Selbsthemmung wird beurteilt, ob eine Bremse im Antrieb notwendig ist, beziehungsweise, ob die Motoren bestromt sein müssen, oder ob das Übertragungselement dies übernimmt.

Bei der Kühlung geht es darum, ob die Komponenten eine aktive Kühlung benötigen, und wenn ja, ob eine Wasserkühlung oder Luftkühlung benötigt wird.

Beim Kriterium Stand der Technik/Neuheitsgrad soll bestimmt werden, wie innovativ diese Antriebsart ist, das heißt, kann man sie vielleicht patentieren, setzen sie die Mitbewerber bereits ein oder ist sie in diesem Marktsegment neu.

Beim Gewicht wird nicht nur das Eigengewicht der Einzelkomponenten betrachtet, sondern auch das Gewicht der zusätzlich notwendigen Anbauteile, und es wird ein Gesamtgewicht angenommen. Bei den Kosten werden allerdings nur die Anschaffungskosten der Komponenten für einen Antrieb betrachtet. Die Losgröße für die Beschaffung wird mit vier Antrieben gewählt, da zwei Goniometer als Prototyp aufgebaut werden sollen.

- **Beurteilung**

Die Beurteilung erfolgt über ein Punktesystem von null bis fünf mit fünf Punkten für das beste Abschneiden unter den fünf Varianten und null Punkten als Schlechtestes unter den zu Vergleichenden. Die Punkte werden anschließend mit der Gewichtung je Kriterium multipliziert und am Ende summiert. Trifft ein Kriterium nicht zu, da zum Beispiel bei der Kugelgewindespindel keine Hohlwelle benötigt wird, so wird für dieses Kriterium die volle Punktzahl vergeben. Unter den beiden Varianten, welche am Ende die meisten Punkte erreicht haben, wird eine für die Umsetzung ausgewählt.

7.3.2 Vergleich

Die für den Vergleich notwendigen Daten werden aus Angeboten und Datenblättern von Herstellern entnommen, beziehungsweise bei Komponenten, welche in ähnlicher Form bereits im Unternehmen eingesetzt werden, werden diese als Referenz verwendet. Die Anforderungen für die Angebotslegung wurden aus den Kapiteln 6.2 und 7.2 entnommen.

Bei den Direktantrieben werden Angebote der Firmen Siemens und HIWIN eingeholt. Von der Firma HIWIN wird ein Rundtisch der TMS7C angefragt, welcher einen integrierten absoluten oder inkrementellen Drehgeber bietet. Von der Firma Siemens wird der Torquemotor der Type 1FW3 mit einem Absolutwertdrehgeber angefragt. Beide bieten ein ausreichend großes Dauerdrehmoment von 150Nm und 200Nm, dies ist auch gleich dem Haltemoment bei Stillstand und bestromtem Motor.

Bei der Ausführung mit Planetengetriebe und Schrittmotor wird ein spielarmes Planetengetriebe der Firma Wittenstein-Alpha in Betracht gezogen. Die Bauart des Planetengetriebes ist ein TP⁺ 025 MF 2-stufiges Getriebe mit einem Nenndrehmoment am Abtrieb von 120Nm. Die Übersetzung wird aufgrund der benötigten langsamen Abtriebsgeschwindigkeiten mit 100 gewählt. Des Weiteren bietet es ein

reduziertes Verdrehspiel von kleiner 1arcmin und aufgrund eines kippsteifen Abtriebslagers eine sehr hohe Kippsteifigkeit von 550Nm/arcmin. Bei dieser Ausführung des Planetengetriebes kann keine Hohlwelle angeboten werden, das heißt, bei Auswahl dieser Variante muss konstruktiv eine Lösung gefunden werden, um die Antriebe trotzdem platzsparend positionieren zu können. Ein Ansatz für eine Lösung wäre, den Abtriebsflansch der zweiten Drehachse hohl auszuführen und in diesem den Antrieb für die erste Achse unterzubringen. Der konstruktive Aufwand wird dadurch allerdings stark erhöht.

Bei dem Harmonic-Drive-Getriebe der Harmonic Drive AG wird eine sogenannte Unit der Bauart HFUS-2SH in der Baugröße 32 ausgewählt. Es besitzt eine große Übersetzung von 160 und liefert ein Nenndrehmoment von 137Nm. Auch wird eine hohe Kippsteifigkeit des Abtriebslagers von 290Nm/arcmin angeboten. Das Getriebe besitzt sehr kompakte Abmessungen mit einer Übertragungsgenauigkeit von kleiner 1arcmin und einer Wiederholgenauigkeit von kleiner $\pm 0,1$ arcmin.

Aufgrund der Problematik des Einlaufens und des stetigen Gleitens, was zusätzlich zu Verschleiß führt, wurde zuerst überlegt, ein spielarmes Schneckengetriebe selbst zu entwickeln. Durch die dafür notwendigen Abschätzungen von Kosten und Zeit konnte man erkennen, dass dies nicht innerhalb der Herstellkostengrenzen von 7000€ möglich ist. Diese Variante wird dennoch nicht ausgeschlossen und ein Schneckengetriebe der Firma Wittenstein-Alpha für den Vergleich ausgewählt. Das Schneckengetriebe der Baureihe V Drive Advanced mit Hohlwelle und der Bezeichnung VDH⁺ 050 1-stufig bietet eine maximale Übersetzung von 40 und ein maximales Drehmoment bei 500U/min von 183Nm. Das Verdrehspiel kann auch hier auf einen Wert von ≤ 2 arcmin reduziert werden.

Für die Variante mit Kugelgewindetrieb wird als Vergleich ein bereits im Unternehmen verwendeter Kugelgewindetrieb mit einer Länge von 500mm herangezogen. Dieser besitzt einen Durchmesser von 8mm und eine Steigung von 2,5mm. Die Kosten im Einkauf liegen bei circa 250€. Der für dieses Projekt benötigte Kugelgewindetrieb wird mit einer ähnlichen Länge veranschlagt. Es wird für den folgenden Vergleich mit Kosten für die Kugelgewindespindel inklusive Endenbearbeitung von 300€ gerechnet.

Der für die vier Varianten mit Übertragungselement benötigte Schrittmotor wird abgeschätzt mit einer Baulänge von 100mm und Kosten von ungefähr 150€. Das benötigte Moment liegt im Bereich von ein bis zwei Newtonmeter. Eine genaue Auslegung kann erst nach erfolgtem Vergleich der Varianten und einer Auswahl erfolgen, da der Motor auf das entsprechende Übertragungselement angepasst wird.

Variante		Direktantrieb	Planetengetriebe	Harmonic-Drive	Schneckengetriebe	Kugelgewindetrieb
Motor		Torquemotor	Schrittmotor	Schrittmotor	Schrittmotor	Schrittmotor
Baugröße		Sehr groß $\varnothing > 300\text{mm}$ L > 250mm	$\varnothing 145\text{mm}$ L ca. 250mm	$\varnothing 142\text{mm}$ L ca. 160mm	Sehr groß LxBxH ca. 320x100x162,5	Groß im Durchmesser ca. 500mm aufgrund der Spindelbewegung
Punkte		0	3	5	0	0
Gewichtung	15%	0	0,45	0,75	0	0
Winkelbereich		360° nicht eingeschränkt	360° nicht eingeschränkt	360° nicht eingeschränkt	360° nicht eingeschränkt	Eingeschränkt aufgrund des Aufbaus
Punkte		5	5	5	5	0
Gewichtung	12%	0,6	0,6	0,6	0,6	0
Übertragungsgenauigkeit		Spielfrei, da kein Übertragungselement	$\leq 1\text{arcmin}$	$\leq 1\text{arcmin}$	$\leq 2\text{arcmin}$	Spielarm, Verbindung Motor zu Welle
Punkte		5	4	4	3	4
Gewichtung	15%	0,75	0,6	0,6	0,45	0,6
Hohlwelle		$\varnothing > 100\text{mm}$	Nicht vorhanden	$\varnothing 36\text{mm}$	$\varnothing 28\text{mm}$	Nicht notwendig für Antrieb
Punkte		5	0	3	2	5
Gewichtung	8%	0,4	0	0,24	0,16	0,4
Selbsthemmung		Nein, Motor bestromt oder Bremse	Nein, Motor bestromt oder Bremse	Nein, Motor bestromt oder Bremse	ja	Nein, Motor bestromt oder Bremse
Punkte		0	0	0	5	0
Gewichtung	5%	0	0	0	0,25	0

Kühlung		Wasserkühlung erforderlich ansonsten Sinken des Drehmoments	Nein	Nein	Nein	Nein
Punkte		0	5	5	5	5
Gewichtung	10%	0	0,5	0,5	0,5	0,5
Stand der Technik Neuheitsgrad		Im Einsatz, nur bei einem Konkurrenten	Bekannt und im Einsatz	In dieser Kombination noch nicht im Einsatz	Bekannt und im Einsatz	Völlig neues Konzept
Punkte		2	0	4	0	5
Gewichtung	8%	0,16	0	0,24	0	0,4
Gewicht		> 60kg	~10kg	~6kg	~18kg	~3kg
Punkte		0	2	4	1	5
Gewichtung	10%	0	0,2	0,4	0,1	0,5
Kosten		Sehr hoch >6000€	~1650€	~1250€	>3000€	~450€
Punkte		0	3	3	1	5
Gewichtung	17%	0	0,51	0,51	0,17	0,85
Summe		1,91	2,86	3,84	2,23	3,25

Tabelle 5: Vergleichsmatrix der verschiedenen Varianten, Quelle: Eigene Darstellung

7.3.3 Auswahl

Aus der Vergleichstabelle lässt sich erkennen, dass aufgrund der Punkte die Auswahl auf das Harmonic-Drive-Getriebe mit Schrittmotor fällt. Der dabei zum Einsatz kommende Schrittmotor muss eine Hohlwelle aufweisen, um die starre Welle zur Befestigung des Probenträgers und die Antriebswelle für die zweite Achse durchführen zu können. Aufgrund der fehlenden Selbsthemmung muss der Motor mit einer Bremse ausgestattet werden, um die Last bei Abschalten der Energieversorgung oder Stromausfall in Position zu halten. Dazu muss eine federbelastete Bremse verwendet werden, welche stromlos geschlossen ist, was bedeutet, dass diese im Betrieb dauerhaft bestromt sein muss, um der Federkraft entgegen zu wirken. Dies führt je nach Leistung der Bremse zu einer zusätzlichen Erwärmung des Motors und der Anbauteile, welche bei der Konstruktion berücksichtigt werden muss.

7.4 Umsetzungsvariante

In diesem Abschnitt wird die ausgewählte Variante für die Prototypen näher betrachtet, und es werden die Probleme bei der Umsetzung, Bauteilauswahl und Bauteilbeschaffung aufgezeigt.

7.4.1 Probleme

Um die gewünschte Dimension der Hohlwelle von mindestens 35mm zu erreichen, muss ein Schrittmotor mit dieser Hohlwellendimension gefunden werden. Leider kann dies kein Hersteller mit seinem Standardprogramm erfüllen. Dies führt zur Überlegung, den Rotor eines Standardmotors aufzubohren, um somit eine größere Hohlwelle unterzubringen. Dies bedeutet, der Rotor des Schrittmotors muss für diese Anwendung neu gefertigt werden. Die dabei auftretende Schwierigkeit ist, dass im Rotor weniger magnetisches Material zur Verfügung steht, was zur Folge hat, dass das erreichbare Drehmoment sinkt. Des Weiteren muss ein von den Außendimensionen größer und gleichzeitig schwerer Motor genutzt werden, um auch nach dem Getriebe ein Drehmoment von circa 130Nm (bei zweifacher Sicherheit) zu erreichen. Durch Vergrößerung der Dimensionen des Schrittmotors ergibt sich ein weiteres Problem: Die Antriebseinheit aus Getriebe und Motor hat eine viel größere Länge, wodurch die Baugröße des Gesamtantriebs zunimmt und die Steifigkeit des Systems abnimmt. Wenn in der Hohlwelle der Antrieb für die zweite Achse wie auch die starre Welle durchgeführt werden, erhöht sich mit Verlängerung der Wellen die elastische Verdrehung. Auch die Kosten für die Herstellung dieser speziellen Anpassung steigen, was zu einem höheren Einkaufspreis des Motors von circa 600€ führt. Ein weiteres Problem stellt die starre Welle dar, welche ebenfalls durch den Antrieb geführt werden soll. Sie muss am hinteren Ende fixiert werden und als zentrales Element für die Lagerung der Antriebe dienen, wodurch hohe Anforderungen an die Fertigungsgenauigkeit gestellt werden. Verzichtet man auf die Durchführung der starren Welle, kann die Antriebswelle für den zweiten Goniometerkreis voll ausgeführt werden. Dadurch steigt das polare Widerstandmoment und die Torsionssteifigkeit wird erhöht. Es entfällt dadurch auch eine Lagerung der Antriebswellen auf die starre Welle und die Fixierung am hinteren Ende.

7.4.2 Anpassungen

Um für diese Anwendung keinen speziell angefertigten Schrittmotor zu benötigen und auch die Dimensionen und das Gewicht gering zu halten, soll der Antrieb des Getriebes über einen Zahnriemen erfolgen. Dadurch steigen natürlich die Kosten, da ein Zahnriemen, zwei Zahnriemenscheiben und eine Welle-Nabe-Verbindung zwischen Motor und Zahnriemenscheibe benötigt werden. Trotzdem wird diese Ausführung gewählt. Die Gründe dafür sind in etwa gleich hohen Kosten, das geringere Gewicht sowie die kompaktere Bauweise gegenüber dem angepassten Schrittmotor. Durch den Zahnriemen könnte allerdings ein größeres Spiel entstehen, was im Hinblick auf eine Lowcost Variante vermieden werden soll. Daraus folgt, die Ausführung des Zahnriemens muss ein minimales Spiel aufweisen. Dies wird durch minimiertes Spiel der Zähne in den Zahnriemenscheiben und die Auswahl eines Zahnriemens mit geringer Dehnung und hoher Steifigkeit gewährleistet.

Da der Winkelbereich nicht die vollständigen 360° abdeckt, bleibt ein Bereich von 60° , -120° Zwei-Theta abgezogen von 180° , frei, in dem sich keine Goniometerarme bewegen. Die Aufhängung für den Probenträger hat damit an der Vorderseite des Goniometers in einem Bereich von 60° zu erfolgen (siehe Abbildung 51).

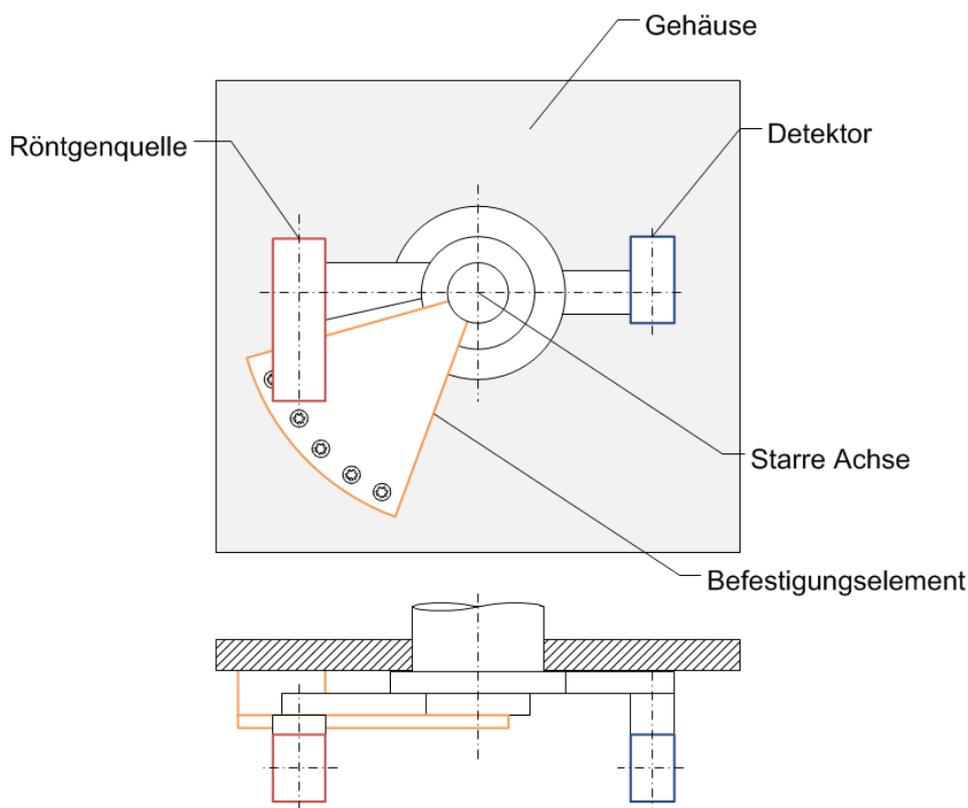


Abbildung 51: Probenaufnahme mit starrer Achse von vorne, Quelle: Eigene Darstellung.

7.4.3 Skizze

Die Skizze der Entwurfsvariante in Abbildung 52 enthält alle wesentlichen Komponenten, welche für den Aufbau benötigt werden. Ausgehend von diesen hat auch eine Auslegung, mit den berechneten Kräften und Momenten, die am Abtrieb auftreten, zu erfolgen. Der Antrieb des Quellenkreises erfolgt durch das am nächsten zum Abtrieb positionierte Harmonic-Drive-Getriebe inklusive Antrieb. Dort treten die höchsten Belastungen für die Komponenten auf, da an der Quellenseite die größten Drehmomente und Kippmomente erreicht werden. Durch den geringen Abstand zwischen Quellenarm und Harmonic-Drive-Getriebe kann das dazwischen liegende Bauteil sehr kurz ausgeführt werden, was die elastische Verdrehung der Hohlwelle verringert. Des Weiteren wird durch den minimalen Abstand das Kippmoment, welches auf das Harmonic-Drive-Getriebe wirkt verringert. Der Antrieb für den Detektorarm erfolgt durch das hintere Harmonic-Drive-Getriebe. Die dabei auftretende elastische Verformung der Welle wird gering sein, da der Ausleger für den Detektor nur gering belastet ist (maximal 5kg). Dennoch muss die elastische Verformung berücksichtigt werden, deshalb sind Materialauswahl und Dimensionierung dieses Bauteils wichtige Faktoren für die Genauigkeit. Aufgrund der elastischen Verformung im Gesamtsystem ist es wahrscheinlich immer nötig, durch Kalibrieren mit einem Standard (NIST), bei konstantem Gewicht der Komponenten und konstantem Radius, eine Kurve der Verdrehung über den Verfahrenswinkel aufzunehmen und damit das Gerät zu justieren. Das Winkelmesssystem ist auf der Abtriebsseite nach dem Harmonic-Drive-Getriebe angebracht. Dadurch ist der entstehende Winkelfehler in Getriebe und Zahnriementrieb zu vernachlässigen, da für die Positionsgenauigkeit das Winkelmesssystem ausschlaggebend ist. Allerdings besteht der Wunsch des Unternehmens, auch eine kostengünstige Variante ohne Winkelmesssystem anzubieten, deren Genauigkeit nicht so groß sein muss. Deswegen werden das Getriebe und der Zahnriementrieb so ausgewählt, dass ein minimales Spiel entsteht. Des Weiteren bringt dies auch einen Vorteil in der Regelung der Position, da aufgrund eines reduzierten Spiels die Ansprechdauer, das heißt, die Zeit bis sich der Winkel verändert, geringer ist. Dies ist vor allem beim Ändern der Drehrichtung von Bedeutung, da dort das größte Spiel auftreten wird.

In der unteren Darstellung der Abbildung 48 ist die Anordnung der Schrittmotoren und Zahnriementriebe zu erkennen. Hier wird sehr viel Wert auf eine platzsparende Anordnung gelegt, um das Gerät so kompakt wie nur möglich zu halten. Dabei muss auch ein besonderes Augenmerk auf die Montage gelegt werden, um diese nicht zu komplex werden zu lassen. Das heißt, es werden zum Beispiel viele Vorrichtungen benötigt, es muss vieles von Hand justiert werden, oder der Zusammenbau kann nicht von einer Person alleine erfolgen. Das in der Skizze vorhandene Stativ dient nur dem ersten Aufbau eines Prototyps, um Tests auch ohne Gehäuse durchführen zu können.

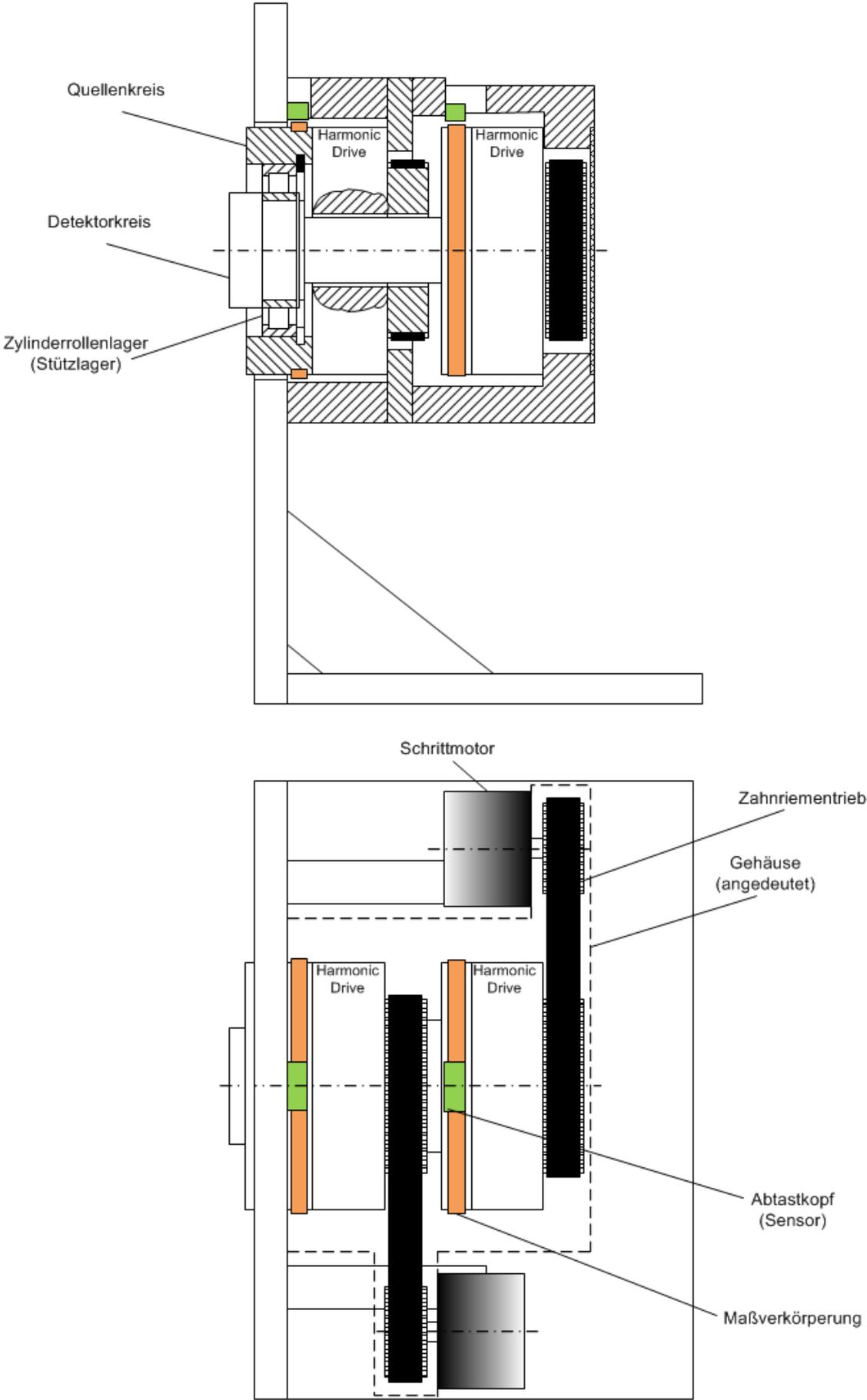


Abbildung 52: Skizze der Entwurfsvariante, Quelle: Eigene Darstellung.

7.5 Auswahl und Auslegung der Zukaufkomponenten

Es werden alle für den Antrieb notwendigen Zukaufkomponenten betrachtet, es erfolgt die Auswahl mit der Festlegung auf Hersteller und Type sowie die Auslegung aufgrund der wirkenden Kräfte und Momente.

7.5.1 Getriebe

Als Getriebeart wird ein Harmonic-Drive Getriebe gewählt. Das ausgewählte Getriebe der Baureihe HFUS-32-2SH bietet eine kompakte Bauweise mit einer großen Hohlwelle und einem kippsteifen Abtriebslager. Die Baureihe HFUS gibt es in drei verschiedenen Varianten mit unterschiedlichen Übersetzungen, abgestuft von 30 bis 160. Mit der Variantenbezeichnung 2SH am Ende wird eine Simplicity Unit mit Hohlwelle gekennzeichnet, darunter versteht man ein nach außen nicht abgedichtetes Getriebe ohne Antriebs- und Abtriebsflansch. Dies wird benötigt, um in der Konstruktion noch platzsparender zu bauen und beim Anbau an andere Bauteile eine höhere Flexibilität zu erreichen. In Tabelle 6 sind die technischen Daten des Getriebes aufgeführt. Hier wird für die Übersetzung größer eins, das heißt, eine Übersetzung ins Langsame, der Begriff Untersetzung verwendet. Die Übersetzung ist wie folgt definiert:

$$i = \frac{M_{Abtrieb}}{M_{Antrieb}} = \frac{n_{Antrieb}}{n_{Abtrieb}} = \frac{\omega_{Antrieb}}{\omega_{Abtrieb}} \quad (1.11)$$

$M_{Abtrieb}/Nm$	Abtriebsdrehmoment
$M_{Antrieb}/Nm$	Antriebsdrehmoment
$n_{Abtrieb}/s^{-1}$	Abtriebsdrehzahl
$n_{Antrieb}/s^{-1}$	Antriebsdrehzahl
$\omega_{Abtrieb}/rad\ s^{-1}$	Winkelgeschwindigkeit am Abtrieb
$\omega_{Antrieb}/rad\ s^{-1}$	Winkelgeschwindigkeit am Antrieb

Daraus lässt sich erkennen, dass bei einer Übersetzung größer eins das Drehmoment am Abtrieb größer als am Antrieb ist und die Drehzahl sich verringert. Die Übersetzung für das Getriebe wird mit der maximal möglichen Standardübersetzung von 160 gewählt, da am Abtrieb Drehzahlen im Bereich von 1min^{-1} benötigt werden. Damit kann die Drehzahl des Motors auf einen moderaten Wert angehoben und dessen Drehmoment abgesenkt werden. Es sind in Tabelle 6 für jede Übersetzung mehrere Drehmomente angeführt, die sich auf unterschiedliche Drehzahlen beziehungsweise die maximale Belastung des Getriebes beziehen. Das wiederholbare Spitzendrehmoment gibt die maximalen Beschleunigungs- und Bremsmomente an, das heißt, dieses Moment darf im Betrieb nicht überschritten werden. Das Nenndrehmoment bezieht sich auf die Nenndrehzahl von 2000min^{-1} des Getriebes und dient als Referenz für die Lebensdauer des Getriebes, das heißt, bei einer Belastung mit Nenndrehzahl und Nenndrehmoment erreicht das Getriebe die nominelle Lebensdauer. Für die Dimensionierung wird das Durchschnittsdrehmoment herangezogen, da dabei eine wechselnde Belastung des Getriebes angenommen wird. Bei einer Kollision oder einer Notabschaltung kann das Getriebe kurzzeitig mit einem höheren Drehmoment beaufschlagt werden, dem sogenannten Kollisionsdrehmoment. Dieses Drehmoment darf im normalen Betrieb nie erreicht werden.

	Einheit	HFUS-32					
		30	50	80	100	120	160
Untersetzung	i []	30	50	80	100	120	160
Wiederholbares Spitzendrehmoment	T_R [Nm]	100	216	304	333	353	372
Durchschnittsdrehmoment	T_A [Nm]	75	108	167	216	216	216
Nennendrehmoment	T_N [Nm]	54	76	118	137	137	137
Kollisionsdrehmoment	T_M [Nm]	200	382	568	647	686	686
Max. Antriebsdrehzahl (Ölschmierung)	$n_{in(max)}$ [min ⁻¹]	7000					
Max. Antriebsdrehzahl (Fettschmierung)	$n_{in(max)}$ [min ⁻¹]	4800					
Mittlere Antriebsdrehzahl (Ölschmierung)	$n_{av(max)}$ [min ⁻¹]	4600/1000 ⁹⁾					
Mittlere Antriebsdrehzahl (Fettschmierung)	$n_{av(max)}$ [min ⁻¹]	3500/1000 ⁹⁾					
Massenträgheitsmoment HFUS-2UH	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	2,85					
Massenträgheitsmoment HFUS-250	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	1,69					
Massenträgheitsmoment HFUS-25H	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	2,85					
Gewicht HFUS-2UH	m [kg]	4,2					
Gewicht HFUS-250	m [kg]	2,9					
Gewicht HFUS-25H	m [kg]	3,1					

⁹⁾Gültig für HFUS-2UH und für HFUS-25H, wenn Radialwellendichtungen an der Hohlwelle eingesetzt werden.

Tabelle 6: Technische Daten der Baugröße HFUS-32, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 14.

In Abbildung 53 sind die Abmessungen des Harmonic-Drive Getriebes angegeben. Die Hohlwelle des Wave Generators kann auf Kundenwunsch angepasst werden, um eine noch bessere Anpassung an die Applikation zu ermöglichen. Das Abtriebslager ist als Kreuzrollenlager ausgeführt. Dieses kann axiale Kräfte in beide Richtungen sowie große radiale Kräfte aufnehmen. Kreuzrollenlager haben auch eine sehr gute Laufgenauigkeit, radial wie auch axial, im Bereich von wenigen hundertstel Millimeter. Des Weiteren bietet dieses Abtriebslager eine Kippsteifigkeit von 290Nm/arcmin und kann ein statisches Kippmoment von 2425Nm aufnehmen.⁸⁹ Der Vorteil eines Harmonic-Drive Getriebes mit Abtriebslager besteht darin, die Lasten direkt an das Getriebe anbauen zu können und damit eine Belastung des Wave Generator Kugellagers zu verhindern. Der Wave Generator besitzt ein spezielles Kugellager mit elliptischer Laufbahn. Durch Aufziehen des Wave Generators auf den Flexspline wird dessen elliptische Form erzeugt.

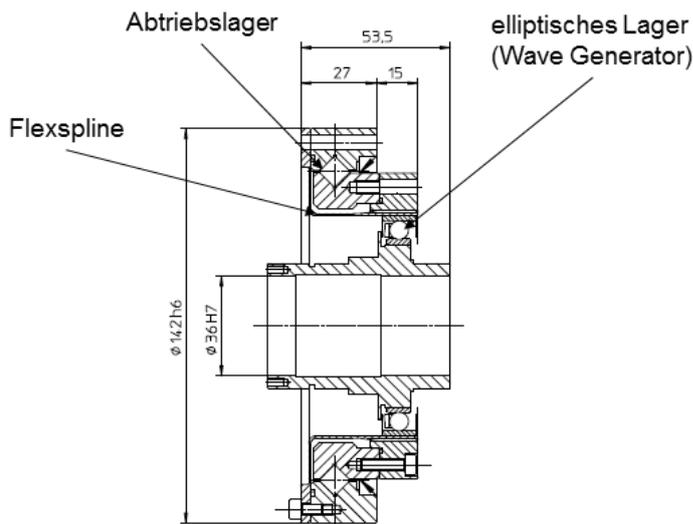


Abbildung 53: Abmessungen Harmonic-Drive, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 15 (leicht modifiziert).

⁸⁹⁾ Vgl. Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 21.

Die Genauigkeit des Getriebes wird durch verschiedene Parameter beschrieben: Übertragungsgenauigkeit, Hystereseverlust, Lost Motion und die Wiederholungsgenauigkeit. Unter der Übertragungsgenauigkeit wird die maximale Abweichung vom Absolutwert auf der Abtriebsseite verstanden. Bestimmt wird die Übertragungsgenauigkeit durch Drehen der Abtriebswelle um 360° , ohne Umkehr der Drehrichtung. Dabei ergeben die maximale positive und negative Abweichung vom Absolutwert die Genauigkeit. Um die Hysterese zu bestimmen, wird die Antriebswelle blockiert, und die Abtriebswelle wird mit dem Nenndrehmoment beaufschlagt. Dadurch kommt es zu einer Torsion im Getriebe. Durch Wechseln der Drehrichtung des Moments und Aufzeichnen der dabei entstehenden Kurve des Verdrehwinkels, beginnend bei Drehmoment gleich null, kann die Hysterese, beziehungsweise das Spiel des Getriebes bestimmt werden. Um die Torsionssteifigkeit des Getriebes bei kleinen Drehmomenten zu charakterisieren, wird der Begriff Lost Motion verwendet. Die Messung erfolgt unter den gleichen Bedingungen wie die Hysterese-messung, jedoch mit einem Drehmoment von $\pm 4\%$ des Nenndrehmoments. Bei der Wiederholungsgenauigkeit wird ein absoluter Wert mehrmals aus der gleichen Drehrichtung angefahren. Definiert ist diese als die Hälfte der Differenz aus minimalem und maximalem Winkel (siehe Abbildung 54).⁹⁰

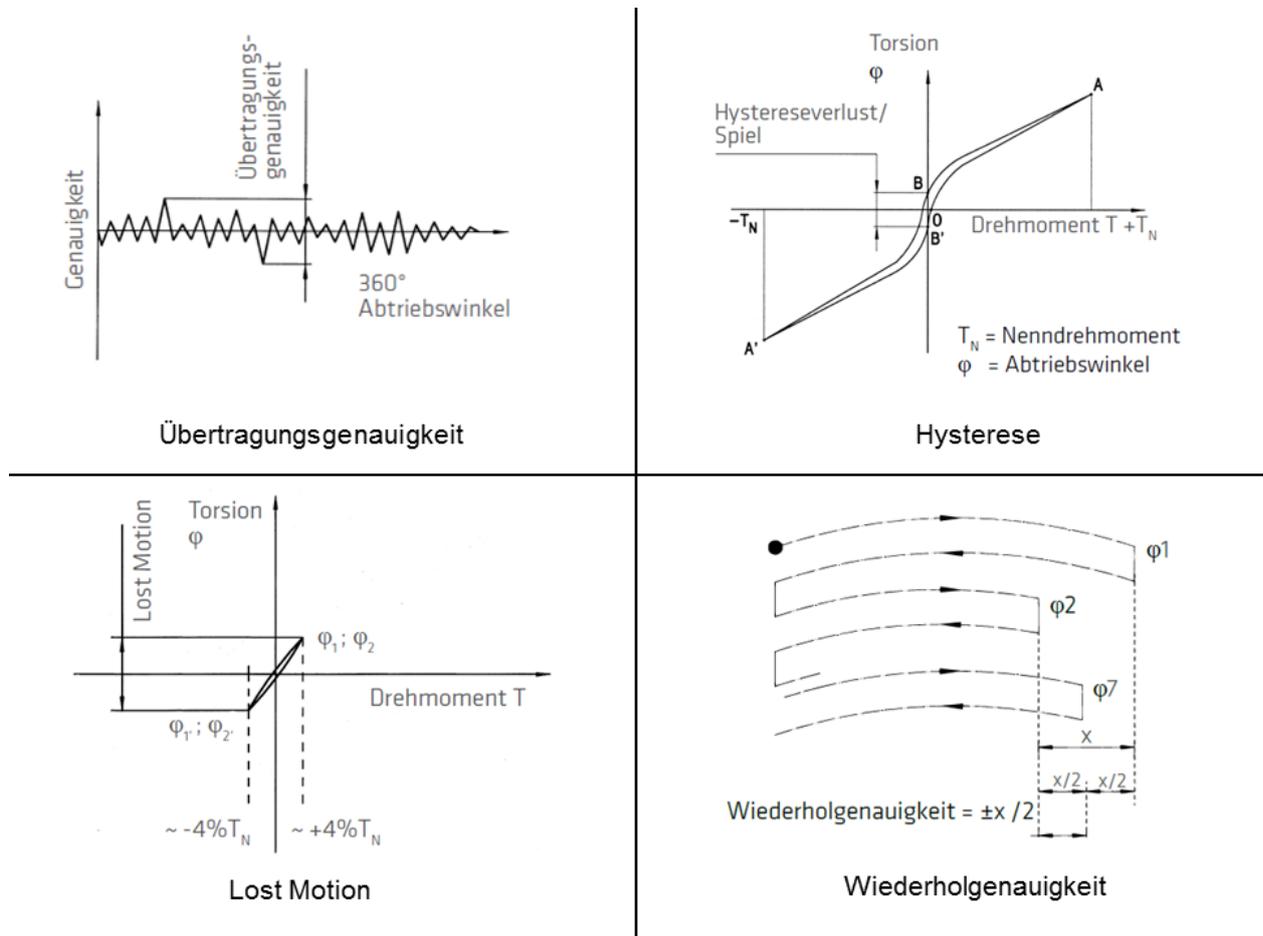


Abbildung 54: Bestimmung der Genauigkeit, Quelle: In Anlehnung an Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 64 ff.

⁹⁰ Vgl. Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 64 ff.

Daraus wird nun die Gesamtgenauigkeit des Systems berechnet. Die dafür notwendigen Genauigkeitswerte sind die Hysterese, die Übertragungsgenauigkeit und die Wiederholgenauigkeit. Lost Motion wird nicht in die Berechnung aufgenommen, da dieser Wert die Hysterese bei kleinem Drehmoment angibt. Dies ist bei einem Nenndrehmoment von 137Nm ein Drehmoment von circa 5,5 Nm. In dieser Anwendung kommen derart kleine Drehmomente nicht vor, daher wird dies nur durch die Hysterese bestimmt. Es wird von einer maximalen absoluten Gesamtabweichung von 2,2arcmin, beziehungsweise $0,036667^\circ$, ausgegangen. Diese setzt sich zusammen aus den Abweichungen Übertragungsgenauigkeit mit 1arcmin, den Hystereseverlusten von ebenfalls 1arcmin und der Wiederholgenauigkeit von 0,2arcmin. Diese Gesamtabweichung wirkt sich bei einem auf der Abtriebsseite montierten Winkelmesssystem nicht auf die Genauigkeit des Geräts aus, da die Messung danach erfolgt. Wird allerdings dieses Winkelmesssystem bei einer kostengünstigen Variante des Gesamtgeräts eingespart, muss diese Abweichung natürlich berücksichtigt werden.

Baugröße	14		17		≥ 20	
Untersetzung	30	≥ 50	30	≥ 50	30	≥ 50
Übertragungsgenauigkeit ¹⁾	<2	<1,5	<1,5	<1,5	<1,5	<1
Hystereseverlust	<3	<1	<3	<1	<3	<1
Lost Motion			< 1			
Wiederholgenauigkeit			< ± 0,1			

¹⁾ Höhere Genauigkeit auf Anfrage

Tabelle 7: Genauigkeiten des Harmonic-Drive Getriebes HFUS32-SH, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 20 (leicht modifiziert).

Für den Einbau des Getriebes in die Anwendung wird der Circular Spline fixiert, der Antrieb erfolgt über den Wave Generator und der Abtrieb über den Flexspline. Dabei ist die Drehrichtung von Antrieb und Abtrieb entgegengesetzt (siehe Abbildung 55).

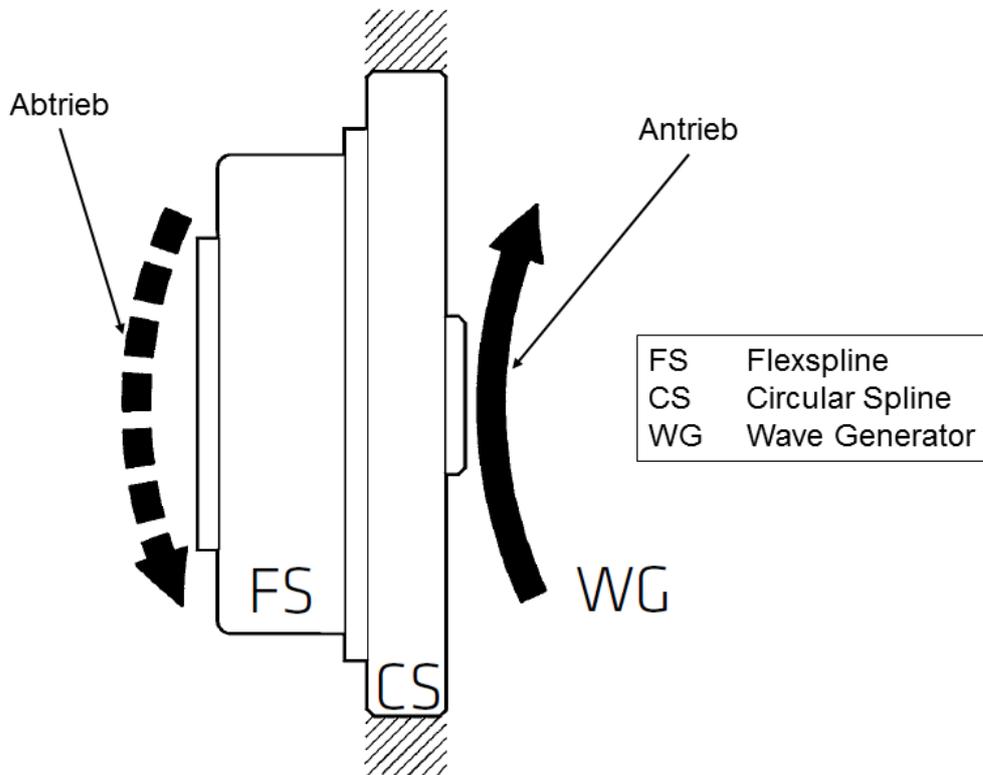


Abbildung 55: Einbau und Drehrichtung Harmonic-Drive Getriebe, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 26 (leicht modifiziert).

Für eine erste Dimensionierung des Getriebes wird eine drehmomentbasierte Auslegung durchgeführt, um das für den Betrieb durchschnittliche Abtriebsdrehmoment sowie die maximalen Drehzahlen zu ermitteln. Zur Berechnung des durchschnittlichen Abtriebsdrehmoments werden die Momente und Drehzahlen bei den Betriebsarten Beschleunigen, Normalbetrieb mit Nenndrehzahl und Bremsen benötigt. Aufgrund der geringen Beschleunigungen, positiv wie auch negativ, sowie auch der geringen Drehzahlen (maximal 1min^{-1}) bei dieser Anwendung, wird für die Dimensionierung das benötigte Maximaldrehmoment von $75,537\text{Nm}$ (siehe Kapitel 7.2) herangezogen. Das zulässige Durchschnittsdrehmoment der ausgewählten Getriebebauart liegt bei 216Nm , somit liegt das am Abtrieb anliegende Drehmoment darunter mit einer Sicherheit von 3,34.

$$s = \frac{T_A}{T_{av}} = \frac{216}{75,537} = 3,34 \quad (1.12)$$

s/dimensionlos	Sicherheit
T_A/Nm	Durchschnittsdrehmoment
T_{av}/Nm	durchschnittliches Drehmoment am Abtrieb

Das heißt, das Getriebe ist ausreichend groß dimensioniert. Auch die maximal zulässigen Drehzahlen werden nicht überschritten, da bei einer Übersetzung von 160 und einer Abtriebsdrehzahl von 1min^{-1} eine maximale Antriebsdrehzahl von 160min^{-1} auftritt. Diese liegt weit unter der maximal zulässigen Antriebsdrehzahl von 4800min^{-1} bei Fettschmierung.

Im nächsten Schritt kann mit Hilfe der folgenden Formel noch die Lebensdauer des Getriebes berechnet werden. Diese Berechnung bezieht sich auf die Lebensdauer des Wave Generator Kugellagers, dieses dient als Referenz für die Getriebelebensdauer. Für die durchschnittliche Eingangsdrehzahl wird die maximale Drehzahl von 160min^{-1} angenommen. Aus der folgenden Berechnung ist ersichtlich, dass die Lebensdauer der Lager stark überdimensioniert ist, was aufgrund der geringen Drehzahlen aber zu erwarten ist.

$$L_{50} = L_n \frac{n_n}{n_{in\ av}} \left(\frac{T_n}{T_{av}} \right)^3 \quad (1.13)$$

L_{50}/h Lebensdauer bei 50%
 Ausfallwahrscheinlichkeit
 L_n/h nominelle Lebensdauer
 bei Nenndrehzahl
 $L_n=35000h$
 n_n/s^{-1} Nenndrehzahl
 $n_n=33,333s^{-1}$
 $n_{in\ av}/s^{-1}$ durchschnittliche
 Antriebsdrehzahl
 $n_{in\ av}=2,666s^{-1}$
 T_n/Nm Nenndrehmoment
 $T_n=137Nm$

$$L_{50} = L_n \frac{n_n}{n_{in\ av}} \left(\frac{T_n}{T_{av}} \right)^3 = 35000 \frac{33,333}{2,666} \left(\frac{137}{75,537} \right)^3 = 2610120,5h$$

$$L_{10} = \frac{1}{5} L_{50} = 522024,1h \quad (1.14)$$

L_{10}/h Lebensdauer bei 10%
 Ausfallwahrscheinlichkeit

Mit dem Wirkungsgrad kann das an die Abtriebsseite übertragbare Drehmoment inklusive der Verluste berechnet werden. Da das durchschnittliche Abtriebsdrehmoment unter dem Nenndrehmoment liegt muss der Wirkungsgrad von 81% (siehe Abbildung 56) mit Hilfe einer Formel korrigiert werden. Zur Abschätzung des Wirkungsgrades bei Nenndrehmoment wird eine Umgebungstemperatur von 25°C angenommen und die Drehzahlkurve mit der niedrigsten Drehzahl herangezogen.

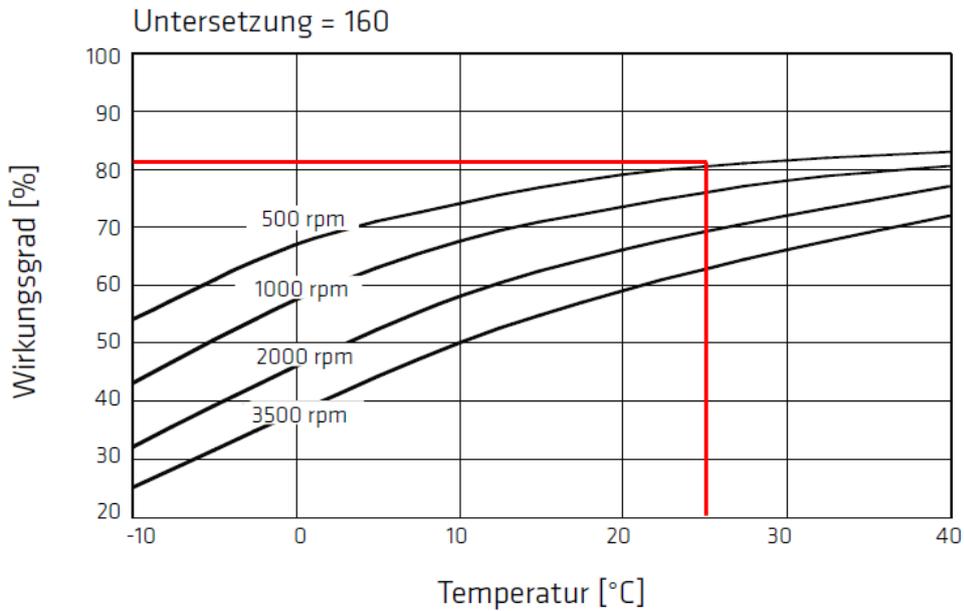


Abbildung 56: Wirkungsgrad Harmonic-Drive Untersetzung 160, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 38 (leicht modifiziert).

$$V = \frac{T_{av}}{T_n} = \frac{75,573}{137} = 0,551 \quad (1.15) \quad V/\text{dimensionslos} \quad \text{Korrekturfaktor}$$

Mit dem berechneten Korrekturfaktor kann nun in Abbildung 57 der Berechnungsfaktor für den Wirkungsgrad ermittelt werden, dieser ist 0,9.

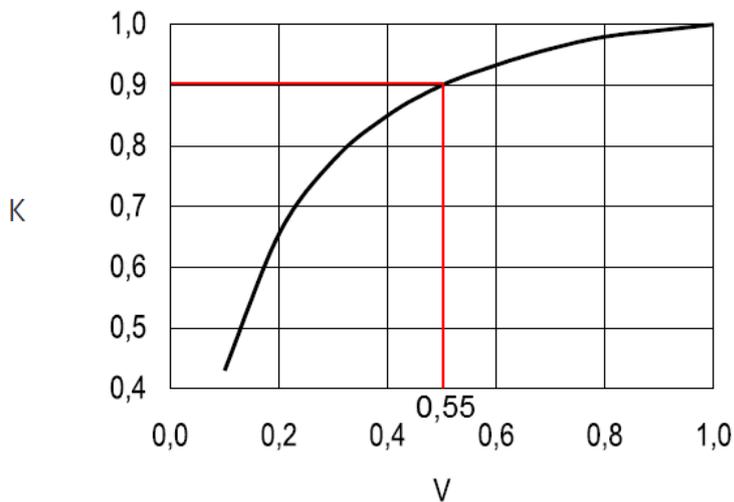


Abbildung 57: Berechnungsfaktor des Wirkungsgrades, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 34 (leicht modifiziert).

Der Wirkungsgrad aufgrund des niedrigeren Drehmoments wird nun mit folgender Formel ermittelt:

$$\eta_L = \eta V = 72,9\% \quad (1.16)$$

$\eta_L/\%$	Wirkungsgrad bei
	Belastung unter Nenndrehmoment
$\eta/\%$	Wirkungsgrad bei
	Belastung ab Nenndrehmoment

Werden bei zukünftigen Anforderungen höhere Abtriebsdrehmomente benötigt, so verbessert sich der Wirkungsgrad des Getriebes und damit auch die Leistung am Abtrieb, aufgrund folgender Formel:

$$P_{Abtrieb} = P_{Antrieb} \eta \quad (1.17) \quad \begin{array}{ll} P_{Abtrieb}/W & \text{Abtriebsleistung} \\ P_{Antrieb}/W & \text{Antriebsleistung} \end{array}$$

Eine Besonderheit, die bei Harmonic-Drive Getrieben in der Konstruktion berücksichtigt werden muss, ist eine je nach Drehrichtung wechselnde Axialkraft. Aufgrund der Verformung des Flexsplines baut sich eine Axialkraft auf, welche auf den Wave Generator wirkt. Es ist deshalb notwendig, durch eine externe Lagerung diese Axialkraft aufzunehmen (siehe Abbildung 58).

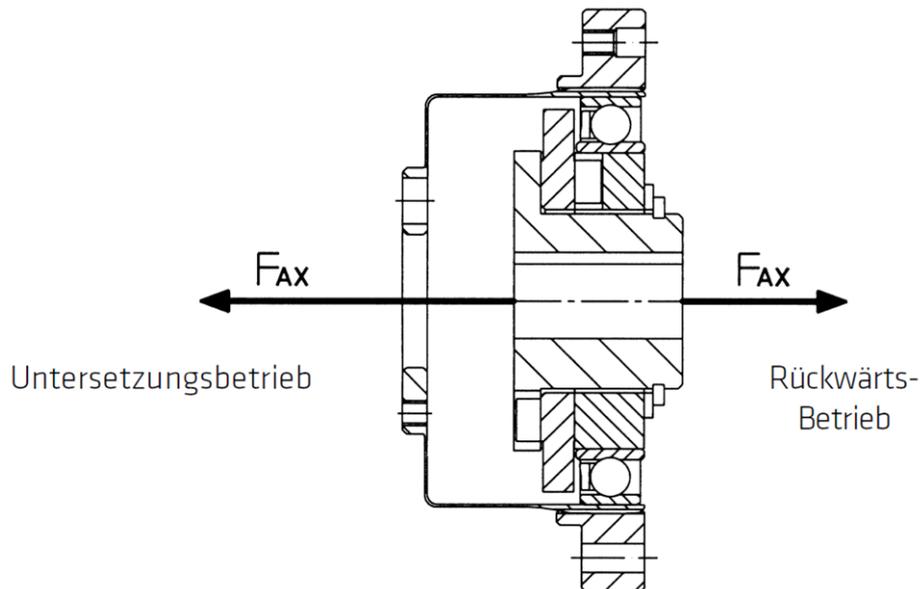


Abbildung 58: Wirkung der Axialkräfte im Harmonic-Drive Getriebe, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 51.

$$F_{AX} = 2 \frac{T_{av}}{0,00254 B} \mu \tan 30^\circ \quad (1.18) \quad \begin{array}{ll} F_{AX}/N & \text{Axialkraft} \\ \mu/\text{dimensionslos} & \text{Reibungskoeffizient} \\ B/\text{dimensionslos} & \text{Baugröße} \\ T_{av}/Nm & \text{durchschnittliches} \\ & \text{Drehmoment am Abtrieb} \\ T_{av}=75,537Nm & \end{array}$$

Mit der Baugröße 32 und einem Reibungskoeffizient von 0,07 (aus Datenblatt) ergibt sich eine Axialkraft von 75,1N, die von der Lagerung aufgenommen werden muss.

Für die Schmierung des Getriebes wird eine Fettschmierung mit einem vom Hersteller empfohlenen Fett vorgesehen, das auch bei den niedrigen Drehzahlen eine ausreichende Schmierung für Lager, Zahnrad und Zahnkranz bietet.

7.5.2 Zahnriementrieb

Für die Verbindung zwischen Schrittmotor und Harmonic-Drive-Getriebe soll ein Zahnriemen verwendet werden. Ein Zahnriementrieb ist ein formschlüssiges Übertragungselement, welches eine präzise Übertragung von Drehbewegungen ermöglicht. Die Auslegung des Zahnriemens erfolgt durch die Firma Haberkorn (siehe Anhang 2), die dafür notwendigen Daten, wie Antriebsdrehmoment, Antriebsdrehzahl, Übersetzung, Umgebungsbedingungen, Riemenprofil, Riementeilung und ungefährer Achsabstand werden ermittelt und anschließend weitergeleitet.

Das Antriebsdrehmoment des Zahnriemens, also das Abtriebsdrehmoment des Schrittmotors, wird mit 1Nm gewählt. Der Zahnriemen soll eine Übersetzung von zwei haben, um an der Antriebswelle des Harmonic-Drive-Getriebes ein ausreichend großes Moment zu erzeugen. Der Grund dafür ist, dass der Schrittmotor in einer kleinen Baugröße gewählt werden kann und nicht zwingend im Mikroschrittbetrieb angesteuert werden muss. Die Antriebsdrehzahl wird mit maximal 320min^{-1} gewählt, das heißt, am Abtrieb des Harmonic-Drive kann eine maximale Drehzahl von 1min^{-1} erzielt werden.

Umgebungsbedingungen sind Laborbedingungen ohne Stöße und ohne schnell wechselnde Lasten. Der Temperaturbereich wird zwischen 20°C und 40°C festgesetzt und als ungefährer Achsabstand werden 100mm angegeben. Es muss eine spielfarme Ausführung vorgesehen werden.

Als Riemenprofil wurde ein AT-Profil gewählt. Dieses zählt zu den Hochleistungsprofilen, das heißt, das Profil bietet aufgrund des vergrößerten Zahnvolumens eine erhöhte Zahntragfähigkeit, eine genaue Bewegungsübertragung bei Zahnriemenscheiben mit Null-Flankenspiel, eine verbesserte Zugfähigkeit und eine um 50% gesteigerte Leistungsfähigkeit gegenüber dem Standardprofil T.⁹¹ Die Teilung wurde mit drei gewählt, das heißt, der Abstand zwischen dem Mittelpunkt der Zähne beträgt 3mm (siehe Abbildung 59). Diese wurde deshalb so gewählt, da mit kleinerer Teilung der Lauf des Zahnriemens ruhiger ist. Da auch keine großen Momente übertragen werden kann problemlos diese kleine Teilung gewählt werden. Als Zahnriemen wurde der CONTI SYNCHROFLEX AT GEN III ausgewählt. Aufgrund der Kombination aus abriebfestem Polyurethan und hochfesten Stahlcordzugträgern bietet er die Vorteile einer konstante Länge ohne Nachdehnung, eines leisen Laufes und der Wartungsfreiheit⁹². Da der Riemen keine Nachdehnung aufweist, ist er besonders für präzise Übertragungen geeignet. Dadurch kann die Elastizität im Zahnriementrieb minimiert werden und dies wirkt sich direkt auf die Genauigkeit der Anwendung aus.

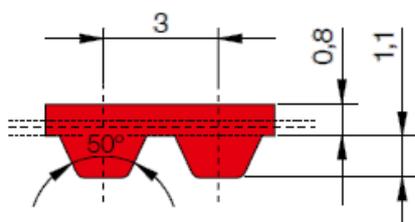


Abbildung 59: Abmessungen Zahnriemen AT3 GEN III, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 28.

⁹¹ Vgl. Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 6.

⁹² Vgl. Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S.10.

Um das Spiel in dem Übertragungsglied noch weiter zu reduzieren, wird als Lückenform die sogenannte 0-Lücke gewählt (siehe Abbildung 60). Bei normaler Lückenform besteht zwischen dem Zahn und der Lücke in der Riemenscheibe ein großes Flankenspiel, dies wird bei der Lückenform SE verringert und bei einer 0-Lücke besteht kein Spiel zwischen Zahnriemen und Riemenscheibe.

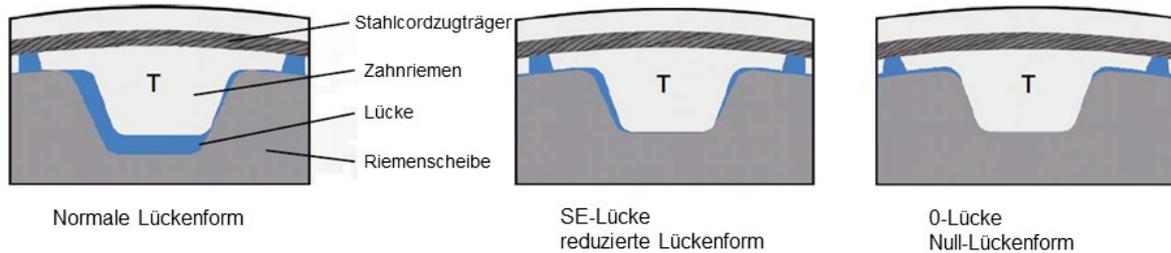


Abbildung 60: Darstellung der verschiedenen Lückenformen, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 18 (leicht modifiziert).

Damit der Zahnriemen bei Belastung nicht von den Riemenscheiben rutscht, muss er axial geführt werden. Dies geschieht durch Bordscheiben an der Antriebsriemenscheibe, welche am Schrittmotor sitzen soll. Des Weiteren sollten die beiden Achsen eine hohe Parallelität aufweisen und zueinander fluchten, um ein abgleiten des Riemens zu verhindern.⁹³

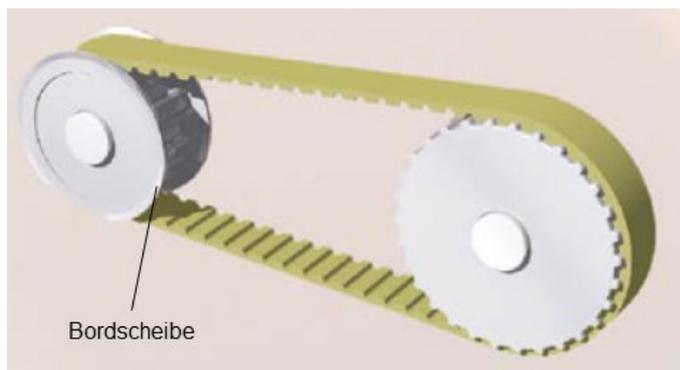


Abbildung 61: Bordscheibe zur axialen Sicherung, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 17 (leicht modifiziert).

Die Riemenspannung ist ein weiteres Kriterium, welches berücksichtigt werden muss. Der Riemen muss vorgespannt sein, um im Leertrum, das ist jener Teil des Zahnriemens, welcher sich nicht im Eingriff der Zahnriemenscheiben befindet, eine Mindestspannkraft zu haben. Diese Vorspannkraft ist abhängig von der Riemenlänge, der auftretenden maximalen Umfangskraft und der Antriebskonfiguration.⁹⁴

⁹³ Vgl. Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 17.

⁹⁴ Vgl. Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 20.

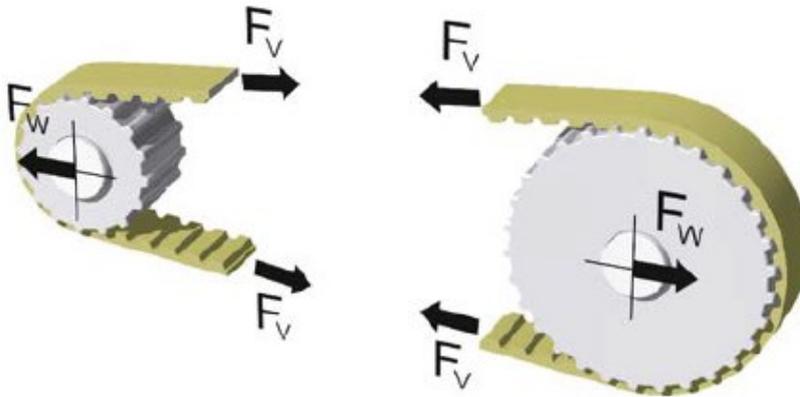


Abbildung 62: Riemenvorspannung im Leertrum, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 20.

Wird die Zahnriemenscheibe für den Antrieb direkt auf der Welle des Schrittmotors befestigt, so ist die dadurch entstehende radiale Belastung der Motorlager zu berücksichtigen. Diese ist gleich zweimal der Vorspannkraft. Die in Anhang 2 ausgewiesene Vorspannkraft beträgt 26,08N, das heißt die Lagerung des Schrittmotors muss eine maximale radiale Belastung von 52,16N aufnehmen können. Die eingestellte Vorspannkraft kann mittels eines Trummessgeräts überprüft werden, welches die Eigenfrequenz des Leertrums im Betrieb misst. Aus dieser Frequenz kann auf die Vorspannkraft rückgerechnet werden. Die Eigenfrequenz des Leertrums ist in Anhang 2 mit 149,59Hz angegeben.

7.5.3 Schrittmotor

Als Antrieb für das Messsystem wurde ein Schrittmotor gewählt, da er bei niedrigen Drehzahlen ein ausreichend hohes Drehmoment aufweist und sich durch die Ansteuerung über Winkelschritte sehr gut für Positioniersysteme eignet.

Für die Anwendung wird ein 2-Phasen Hybridschrittmotor aus der Baureihe ST6018M3008-B der Firma Nanotec ausgewählt. Er besitzt einen Vollschrittwinkel von 1,8° und wird bipolar seriell verschaltet. Die mechanischen Abmessungen können der Abbildung 63 entnommen werden.

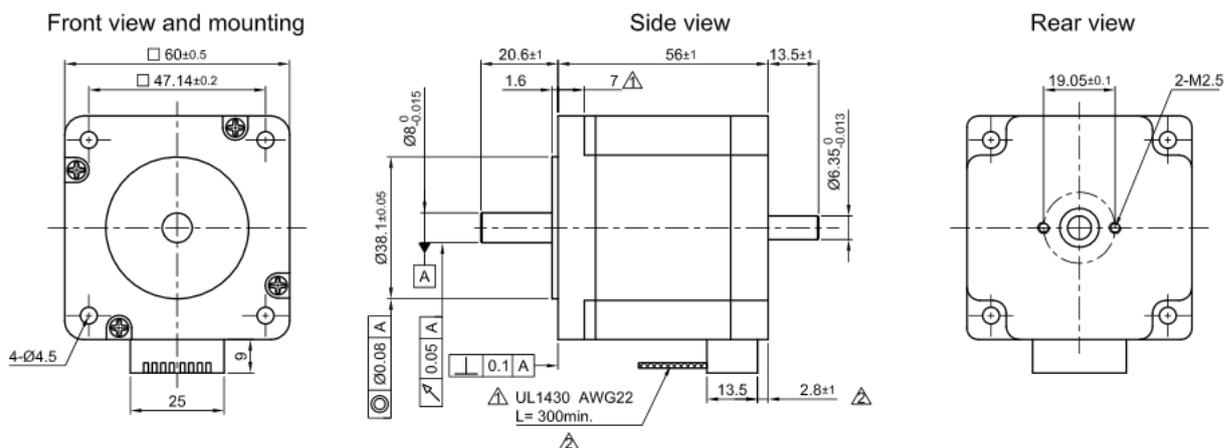


Abbildung 63: Abmessungen ST6018M3008-B, Quelle: Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016), Online-Quelle [19.10.2016].

Die Auswahl wird aufgrund der kompakten Baugröße bei einem maximalen Drehmoment von $0,85\text{Nm}$ bei 320min^{-1} getroffen (siehe Abbildung 64). Der Schrittmotor wird dabei mit $2,1\text{ A}$ und 24V betrieben. Das heißt, bei maximaler Abtriebsdrehzahl beträgt das Antriebsmoment des Harmonic Drive Getriebes, ohne Verluste am Zahnriemen, $1,7\text{Nm}$. Aufgrund der niedrigen Beschleunigungen des Systems wird hier die Auswahl des für die Anwendung notwendigen Drehmoments nur statisch betrachtet.

ST6018M3008

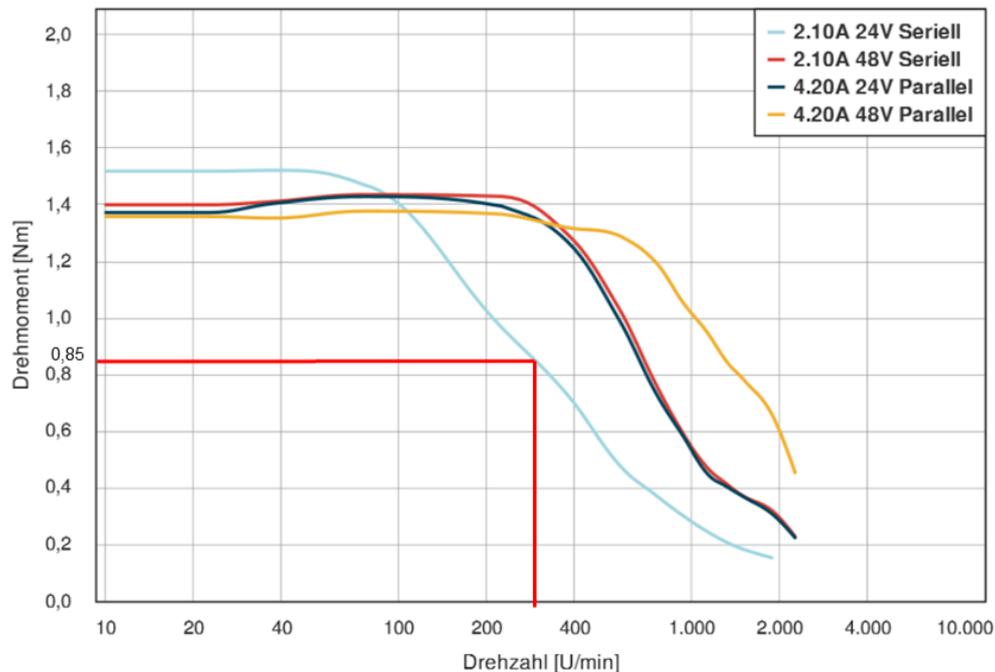


Abbildung 64: Drehmoment-Drehzahlkurve ST6018M3008, Quelle: Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016), Online-Quelle [19.10.2016], S.2.

Des Weiteren können die internen Lager, bei angreifen der Radialkraft am Ende der Welle, eine maximale radiale Belastung von 63N aufnehmen. Dadurch ist es möglich, die Zahnriemenscheibe mittels eines Spannsatzes direkt auf die Motorwelle zu montieren, da die maximal auftretende Radialkraft laut der Zahnriemenberechnung $52,16\text{N}$ beträgt. Der Motor wird, um eine gleichmäßige Bewegung und einen ruhigen Lauf des Zahnriemens zu erreichen, im Mikroschrittbetrieb betrieben.

Die Ausführung mit der Endung -B besitzt ein zweites Wellenende, an dem eine Bremse oder ein Encoder montiert werden kann. Aufgrund der fehlenden Selbsthemmung ist beim Abschalten oder Ausfall der Energieversorgung eine federbelastete Bremse unbedingt notwendig. Ansonsten würden die belasteten Goniometerarme unkontrolliert, entsprechend ihrer aktuellen Lage, ausschwenken und es könnte ein enormer Schaden am Gerät entstehen. Eine für diesen Motor passende Bremse ist die BKE-2,0-6,35 der Firma Nanotec. Diese besitzt ein Haltemoment von 2Nm und eine Leistung von 11W . Die Bremse wird über einen Hubmagneten entlastet und ist im unbestromten Zustand federbelastet, um das Haltemoment aufzubringen. Diese Bremse ist nicht als Betriebsbremse ausgelegt, sondern soll nur im Fall eines Stromausfalls oder Abschalten des Geräts ein sicheres Halten der Goniometerarme in der aktuellen Position ermöglichen. Zu beachten ist bei Einsatz dieser Bremse, dass ein definierter Einschleifvorgang vor Inbetriebnahme erforderlich ist, damit das maximale Haltemoment gewährleistet ist.

Ein weiterer wichtiger Punkt ist die Erwärmung von Bremse und Motor. Da die Bremse während des Betriebs geöffnet ist, das heißt, bestromt ist, wird sie sich stark erwärmen. Dies muss bei der Konstruktion berücksichtigt und anhand eines 3D-Modells auch thermisch untersucht werden.

7.5.4 Winkelmesssystem

Durch die Positionierung des Winkelmesssystems auf der Abtriebsseite des Harmonic-Drive-Getriebes werden alle Ungenauigkeiten, die sich durch die Komponenten davor ergeben, eliminiert. Dadurch muss die Maßverkörperung des Winkelencoders einen großen Innendurchmesser besitzen, um die Antriebs-elemente durchführen zu können, siehe dazu Abbildung 48. Die weiteren Kriterien zur Auswahl sind eine Genauigkeit von kleiner gleich $\pm 0,01^\circ$ und eine Auflösung von kleiner gleich $0,001^\circ$. Der Außendurchmesser des Messsystems soll circa 145mm betragen, der endgültige Außendurchmesser kann erst durch die Konstruktion festgelegt werden. Die benötigte Auflösung in Bit wird wie folgt berechnet:

$$2^n = \frac{\gamma}{R_W} \quad (1.19) \quad \begin{array}{ll} n/\text{Bit} & \text{Auflösung in Bit} \\ \gamma/^\circ & \text{Winkel für eine Umdrehung} \\ R_W/^\circ & \text{Auflösung in Grad} \end{array}$$

Mit R_W gleich $0,001^\circ$ Auflösung und γ , bei einer vollen Umdrehung, von 360° , ist das Ergebnis für die Auflösung n mindestens 18,46 Bit also aufgerundet 19 Bit.

Es gibt zwei unterschiedliche Messverfahren bei Winkelmesssystemen, diese sind eine absolute Messung und eine inkrementelle Messung. Bei der absoluten Messung ist jeder Position, also jedem Teilstrich auf der Maßverkörperung, ein absoluter Wert von einem Nullpunkt aus zugeordnet. Daraus folgt, dass bei Einsatz eines absoluten Messsystems nur ein einmaliges Kalibrieren auf eine Nullposition nötig ist, da die Maschine, auch ohne Verfahren, die codierten Teilstriche auf der Maßverkörperung einem absoluten Wert zuordnen kann. Beispiele für solche Messsysteme sind Codelineale oder Codescheiben. Bei einem inkrementellen System gibt es keine feste Nullposition, das heißt, es wird immer relativ gemessen. Das Messen erfolgt, bei der Verwendung von Strichlinealen, durch Zählen der Striche. Dadurch kann die zurückgelegte Strecke bestimmt werden. Die Striche werden auch als Inkremente bezeichnet.⁹⁵

Für diese Anwendung wurde ein optisch inkrementelles Winkelmesssystem mit Referenzmarken der Firma Renishaw ausgewählt. Als Maßverkörperung dient ein Goldmaßband der Serie RGSZ20-S mit dazugehörigem Abtastkopf VIONiC.

Das Maßband besitzt im Abstand von je 50mm codierte Referenzmarken, die direkt in die Inkremente eingebettet sind. Daraus folgt, dass nach einem Initialisierungsvorgang eine Referenzmarke als Nullposition definiert wird, von der aus die Inkremente gezählt werden. Der Nachteil dabei ist, dass nach jedem Neustart des Geräts ein Initialisierungsvorgang zu erfolgen hat.

Es wird aus Gründen des sehr guten Kosten zu Nutzen Verhältnisses und der Zumutbarkeit eines automatisierten Initialisiervorgangs für den Kunden/die Kundin ein inkrementelles System gewählt.

⁹⁵ Vgl. Hesse/Schnell (2009), S. 275 ff.

Das Maßband besitzt auf der Rückseite eine Klebefläche, mit der es auf das entsprechende Bauteil aufgebracht wird, die Enden werden dabei mit Endklemmen versiegelt. Auf der Vorderseite wird die Maßverkörperung durch einen Schutzlack geschützt. Die Teilungsperiode der Inkremente beträgt $20\mu\text{m}$ bei einer Linearität von $\pm 3\mu\text{m/m}$ und $\pm 0,75\mu\text{m}/60\text{mm}$. Die Referenzmarke ist dabei entsprechend der Auflösung bidirektional wiederholgenau. Ein weiterer Vorteil, den ein Maßband bietet, ist die aufgrund des geringen Querschnitts geringe Wärmeausdehnung, das heißt, die Ausdehnung entspricht der Ausdehnung des Bauteils, an dem es befestigt ist. Geeignet als Untergrundmaterialien sind Werkstoffe mit einem Wärmeausdehnungskoeffizient bis $23\mu\text{m}/\text{m}/^\circ\text{C}$, dies sind als Beispiel Stahl, Aluminium oder Invar.⁹⁶

Durch das Aufkleben des Maßbandes und Versiegeln der Enden mit Endklemmen kann nur ein Teil von einer vollen Umdrehung (360°) abgedeckt werden. Die Endklemmen können nicht überfahren werden, somit schränken diese den Winkelbereich ein. Allerdings wird für die Anwendung keine volle Umdrehung der Achsen benötigt, sondern nur ein Teilbereich von maximal 270° . Dieser Teilbereich kann von einem Maßband mit Endklemmen bei dieser Anwendung ohne Probleme erreicht werden.

Für das Auslesen der Maßverkörperung wird der VIONiC-Abtastkopf mit einer Auflösung von $1\mu\text{m}$ ausgewählt. Er besitzt einen zyklischen Fehler von maximal $\pm 30\text{nm}$ (siehe Abbildung 65).

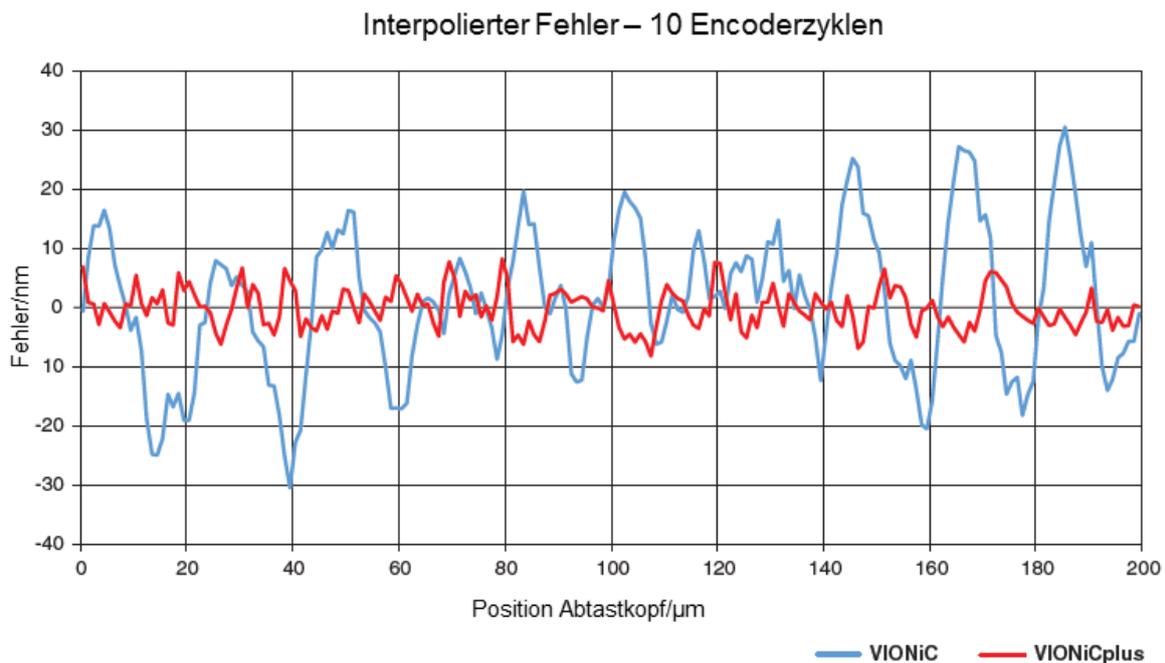


Abbildung 65: Zyklischer Fehler VIONiC und VIONiC plus, Quelle: Renishaw plc (2016), Online-Quelle [24.10.2016], S. 2 (leicht modifiziert).

Die Ausgabe des Encoders ist digital, die dafür benötigte Frequenz ist abhängig von der Geschwindigkeit der Maßverkörperung. Bei der kleinsten Frequenz von 1MHz ist eine maximale lineare Geschwindigkeit v von $0,91\text{ms}^{-1}$ möglich, diese wird nun in die maximale Drehzahl n_{Encoder} umgerechnet. Für die Berechnung

⁹⁶ Vgl. Renishaw plc (2010), Online-Quelle [24.10.2016], S. 1 ff.

wird deshalb zu einem maximal angenommenen Außendurchmesser von 145mm, die Dicke des Maßbandes von 0,2mm addiert, das heißt, der Außendurchmesser beträgt 145,4mm:

$$n_{Encoder} = \frac{v \cdot 1000 \cdot 60}{\pi D} = 1,992s^{-1} = 119,5min^{-1} \quad (1.20)$$

$n_{Encoder}/s^{-1}$ maximale Umdrehungen
 bei 1MHz Ausgabefrequenz
 v/ms^{-1} lineare Geschwindigkeit
 bei 1MHz
 D/m Außendurchmesser

Da die maximal mögliche Drehzahl mit $119,5min^{-1}$ weit über der erforderlichen Drehzahl von $1min^{-1}$ liegt, folgt daraus, dass der Abtastkopf mit der niedrigsten Ausgabefrequenz von 1MHz gewählt werden kann. Wird der Durchmesser verkleinert, erhöht sich die maximal mögliche Drehzahl.

Um die geforderte Auflösung von $0,001^\circ$ zu erreichen, darf bei einer linearen Auflösung R_L von $1\mu m$ ein bestimmter Außendurchmesser nicht unterschritten werden:

$$D_{erforderlich} = \frac{R_L \cdot 360^\circ}{R_W \cdot \pi} = 0,1146m = 114,6mm \quad (1.21)$$

$R_W/^\circ$ Winkelauflösung
 $R_W=0,001^\circ$
 R_L/m lineare Auflösung
 $D_{erforderlich}/m$ erforderlicher
 Außendurchmesser

Damit diese Auflösung am Messsystem auch erreicht werden kann, muss die Auflösung des Schrittmotors höher sein, das heißt kleiner $0,001^\circ$. Der Schrittmotor hat einen Vollschrittwinkel von $1,8^\circ$, daraus folgt, dass er bei einer Umdrehung 200 Schritte ausführt. Da er im Mikroschrittbetrieb betrieben wird, soll nachfolgende Berechnung die Anzahl der Mikroschritte ergeben, in die ein Vollschritt unterteilt werden muss, um die Auflösung zu erreichen:

$$\mu S = \frac{360^\circ}{VS \cdot i_{Zahnriemen} \cdot i_{Harmonic} \cdot R_W} \quad (1.22)$$

$\mu S/\text{dimensionslos}$ Anzahl der
 Mikroschritte
 $VS/\text{dimensionslos}$ Anzahl der
 Vollschritte
 $VS=200$
 $i_{Zahnriemen}/\text{dimensionslos}$ Übersetzung
 Zahnriementrieb
 $i_{Zahnriemen}=2$
 $i_{Harmonic}/\text{dimensionslos}$ Übersetzung
 Harmonic-Drive-Getriebe
 $i_{Harmonic}=160$

Nach dem Einsetzen der Werte ergibt die Berechnung eine Mindestanzahl an Mikroschritten von 5,625, um eine ausreichende Auflösung des Schrittmotors zu erhalten, sollte er mit mindestens 16 Mikroschritten pro Vollschritt betrieben werden.

Das Ausgabesignal beinhaltet die Informationen der Inkremente und des Referenzsignals (siehe Abbildung 66). Die Breite der Signalperiode beträgt $4\mu\text{m}$, die des Referenzsignals $1\mu\text{m}$. Die beiden Kanäle A und B, welche die Informationen der Inkremente beinhalten, sind um 90° phasenverschoben.⁹⁷

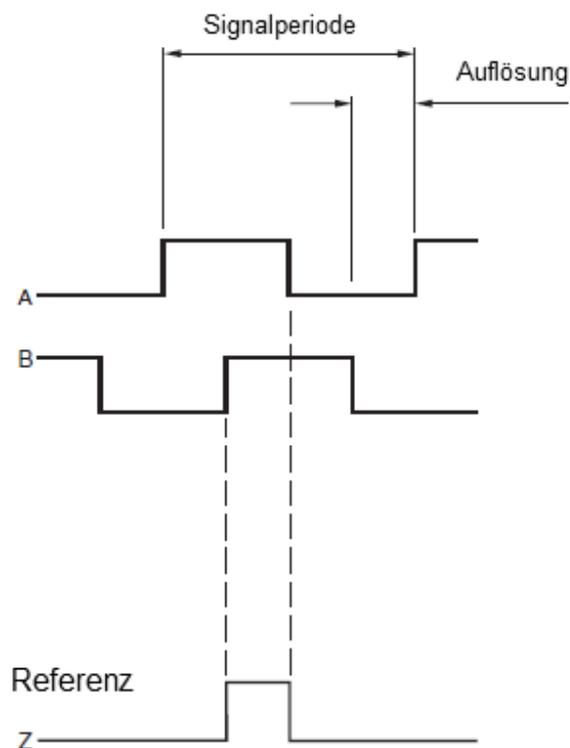


Abbildung 66: Ausgabesignal VIONiC, Quelle: Renishaw plc (2016), Online-Quelle [24.10.2016], S. 8 (leicht modifiziert).

7.5.5 Daten des Antriebes

Hier werden die mechanischen Daten des Antriebs übersichtlich dargestellt und das tatsächliche Drehmoment am Abtrieb berechnet.

$M_{\text{Motor}}=0,85\text{Nm}$	Schrittmotordrehmoment bei Drehzahl n_m
$n_m=5,333\text{s}^{-1}=320\text{min}^{-1}$	Abtriebsdrehzahl des Schrittmotors
$i_{\text{Zahnriemen}}=2$	Übersetzung des Zahnriemens
$\eta_{\text{Zahnriemen}}=95\%$	Wirkungsgrad Zahnriemen (Annahme)

⁹⁷ Vgl. Renishaw plc (2016), Online-Quelle [24.10.2016], S. 20.

Antriebsmoment Harmonic Drive:

$$P = M \omega \quad (1.23) \quad \text{in Gleichung 1.17 eingesetzt ergibt:}$$

$$M_{Abtrieb} \omega_{Abtrieb} = M_{Antrieb} \omega_{Antrieb} \eta \quad \text{dies ergibt nach dem Umformen:}$$

$$M_{Abtrieb} = M_{Antrieb} i_{Zahnriemen} \eta_{Zahnriemen} \quad \text{und eingesetzt:}$$

$$M_{An-Harmonic} = 0,85Nm \cdot 2 \cdot 0,95 = 1,615Nm \quad M_{An-Harmonic}/Nm \text{ Antriebsdrehmoment} \\ \text{Harmonic-Drive-Getriebe}$$

Die Antriebsdrehzahl des Harmonic-Drive-Getriebes ergibt sich aus Gleichung 1.11:

$$n_{An-Harmonic} = \frac{n_m}{i_{Zahnriemen}} \quad n_{An-Harmonic}/s^{-1} \quad \text{Antriebsdrehzahl} \\ \text{Harmonic-Drive-Getriebe}$$

$$n_{An-Harmonic} = \frac{5,333}{2} = 2,666s^{-1} = 160min^{-1}$$

Abtriebsmoment Harmonic-Drive-Getriebe:

$$M_{an-Harmonic} = 1,615Nm \quad \text{Antriebsdrehmoment Harmonic-Drive-Getriebe}$$

$$n_{an-Harmonic} = 2,666s^{-1} = 160min^{-1} \quad \text{Antriebsdrehzahl Harmonic-Drive-Getriebe}$$

$$i_{Harmonic} = 160 \quad \text{Übersetzung Harmonic-Drive-Getriebe}$$

$$\eta_{Harmonic} = 72,9\% \quad \text{Wirkungsgrad Harmonic-Drive-Getriebe}$$

Abtriebsdrehmoment am Goniometer:

$$M_{Abtrieb-Gesamt} = M_{An-Harmonic} i_{Harmonic} \eta_{Harmonic} \quad M_{Abtrieb-Gesamt}/Nm \text{ Abtriebsdrehmoment} \\ \text{am Goniometer}$$

$$M_{Abtrieb-Gesamt} = 1,615Nm \cdot 160 \cdot 0,729 = 188,37Nm$$

Abtriebsdrehzahl des Goniometers:

$$n_{Abtrieb-Gesamt} = \frac{n_{An-Harmonic}}{i_{Zahnriemen}} \quad n_{Abtrieb-Gesamt}/s^{-1} \quad \text{Abtriebsdrehzahl} \\ \text{Goniometer}$$

$$n_{An-Harmonic} = \frac{2,666}{160} = 0,01666s^{-1} = 1min^{-1}$$

Sicherheit des Gesamtsystems:

$$S = \frac{M_{Abtrieb-Gesamt}}{T_{av}} = \frac{188,37}{75,537} = 2,49$$

Die Sicherheit inklusive der Verluste ist immer noch 2,49 und damit größer als der geforderte Wert 2.

8 UMSETZUNGSVARIANTE FÜR PROTOTYPENAUFBAU

In diesem Abschnitt wird der Aufbau der 3D Konstruktion, welche die Basis für die Prototypen bildet, gezeigt. Es werden die dafür notwendigen Anpassungen und Optimierungen erklärt. Des Weiteren erfolgen eine Berechnung der erreichbaren Genauigkeit und eine Kostenabschätzung für die Prototypen.

8.1 Optimierungen und Anpassungen

Bei der Konstruktion werden noch einige Veränderungen in Bezug auf den Entwurf vorgenommen. Der Schrittmotor wird zusätzlich zur Bremse auch noch mit einem Encoder ausgestattet, um einerseits einen möglichen Schrittverlust zu erkennen und andererseits Tests ohne das Winkelmesssystem durchführen zu können. Deshalb wird ein Encoder WEDS5541-B06 der Firma Nanotec ausgewählt, welcher 1000 Impulse pro Umdrehung liefert, also alle $0,36^\circ$ einen Impuls.

Da der Antrieb für den Detektorkreis ein geringeres Moment benötigt und das Getriebe keine große Hohlwelle benötigt, wird hier ein Harmonic-Drive-Getriebe der kleineren Baureihe HFUS-25-2SH, ebenfalls mit einer Untersetzung von 160, verwendet. Für das maximale Drehmoment am Abtrieb werden 40Nm angenommen, die Drehzahl bleibt gleich mit 160min^{-1} am Antrieb. Es werden der gleiche Schrittmotor und der gleiche Zahnriementrieb wie bei der größeren Bauart eingesetzt, damit die Ansteuerung für beide Einheiten dieselbe ist. Durch Einsatz des kleineren Getriebes kann die Baugröße des Gesamtsystems noch weiter reduziert werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass es durch die kompakte Größe auch für weitere Antriebe im Gesamtsystem einsetzbar ist. Die Verwendung des kleineren Getriebes hat auch eine Auswirkung auf das Winkelmesssystem, dort sinkt der Durchmesser, auf den das Maßband aufgebracht wird, auf 115mm. Dieser ist aber ausreichend, um eine Auflösung von $0,001^\circ$ zu erreichen (siehe Gleichung 1.21). Die für die Auslegung wichtigen Daten werden nachfolgend angeführt, sie werden analog zu Kapitel 7.5.1 und den Gleichungen 1.12 bis 1.18 durchgeführt:

Die Winkelgenauigkeit des Getriebes beträgt, wie auch beim HFUS-32-2SH $2,2\text{arcmin}$, beziehungsweise $0,036667^\circ$. Das Durchschnittsdrehmoment bei einer Untersetzung von 160, aus Tabelle 8, ist mit 108Nm angegeben. Die Sicherheit bei einem maximalen Abtriebsdrehmoment von 40Nm beträgt 2,7. Auch die maximale Antriebsdrehzahl bei Fettschmierung von 5600min^{-1} wird nicht überschritten.

Umsetzungsvariante für Prototypenaufbau

	Einheit	HFUS-25					
		30	50	80	100	120	160
Untersetzung	i []	30	50	80	100	120	160
Wiederholbares Spitzendrehmoment	T_R [Nm]	50	98	137	157	167	176
Durchschnittsdrehmoment	T_A [Nm]	38	55	87	108	108	108
Nenn Drehmoment	T_N [Nm]	27	39	63	67	67	67
Kollisionsdrehmoment	T_M [Nm]	95	186	255	284	304	314
Max. Antriebsdrehzahl (Ölschmierung)	$n_{in(max)}$ [min ⁻¹]	7500					
Max. Antriebsdrehzahl (Fettschmierung)	$n_{in(max)}$ [min ⁻¹]	5600					
Mittlere Antriebsdrehzahl (Ölschmierung)	$n_{av(max)}$ [min ⁻¹]	5600/1000 ¹⁾					
Mittlere Antriebsdrehzahl (Fettschmierung)	$n_{av(max)}$ [min ⁻¹]	3500/1000 ¹⁾					
Massenträgheitsmoment HFUS-2UH	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	1,07					
Massenträgheitsmoment HFUS-2S0	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	0,413					
Massenträgheitsmoment HFUS-2SH	J_{in} [x10 ⁻⁴ kgm ²]	1,07					
Gewicht HFUS-2UH	m [kg]	2,1					
Gewicht HFUS-2S0	m [kg]	1,31					
Gewicht HFUS-2SH	m [kg]	1,44					

¹⁾Gültig für HFUS-2UH und für HFUS-2SH, wenn Radialwellendichtungen an der Hohlwelle eingesetzt werden.

Tabelle 8: Technische Daten der Baugröße HFUS-32, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 12.

Für die Lebensdauerberechnung werden die Gleichungen 1.15 und 1.16 herangezogen. Die nominelle Lebensdauer, die Nenndrehzahl sowie die Antriebsdrehzahl sind gleich wie in Kapitel 7.5.1. Das Nenndrehmoment beträgt 67Nm und das durchschnittliche Drehmoment am Abtrieb 40Nm. Damit ergibt sich eine Lebensdauer L_{50} von 2055997,1h und L_{10} von 411199,4h. Daraus lässt sich erkennen, dass auch dieses Getriebe von der Lagerung her überdimensioniert ist.

Der Wirkungsgrad aus Abbildung 56 beträgt auch 81% und wird mit einem neuen Korrekturfaktor (Gleichung 1.15) V von 0,597 ermittelt. Aus Abbildung 57 wird der Berechnungsfaktor aufgrund des Korrekturfaktors ermittelt, dieser beträgt 0,93. Der Wirkungsgrad bei Belastung unter dem Nenndrehmoment kann nun mittels Gleichung 1.16 ermittelt werden, er beträgt 75,33%.

Die Axialkräfte, welche von der Lagerung des Wave Generators aufgenommen werden müssen, werden laut Gleichung 1.18 bestimmt. Die Baugröße B ist 25 und der Reibungskoeffizient $\mu=0,07$. Daraus ergibt sich eine axiale Belastung von 50,92N.

8.2 3D-Konstruktion

In Abbildung 67 ist der Gesamtaufbau in einer Schnittdarstellung dargestellt. Aufgrund der auftretenden Axialkräfte im Harmonic-Drive-Getriebe wird jeder Wave Generator durch eine Fest-Loslagerung mit Rillenkugellagern fixiert.

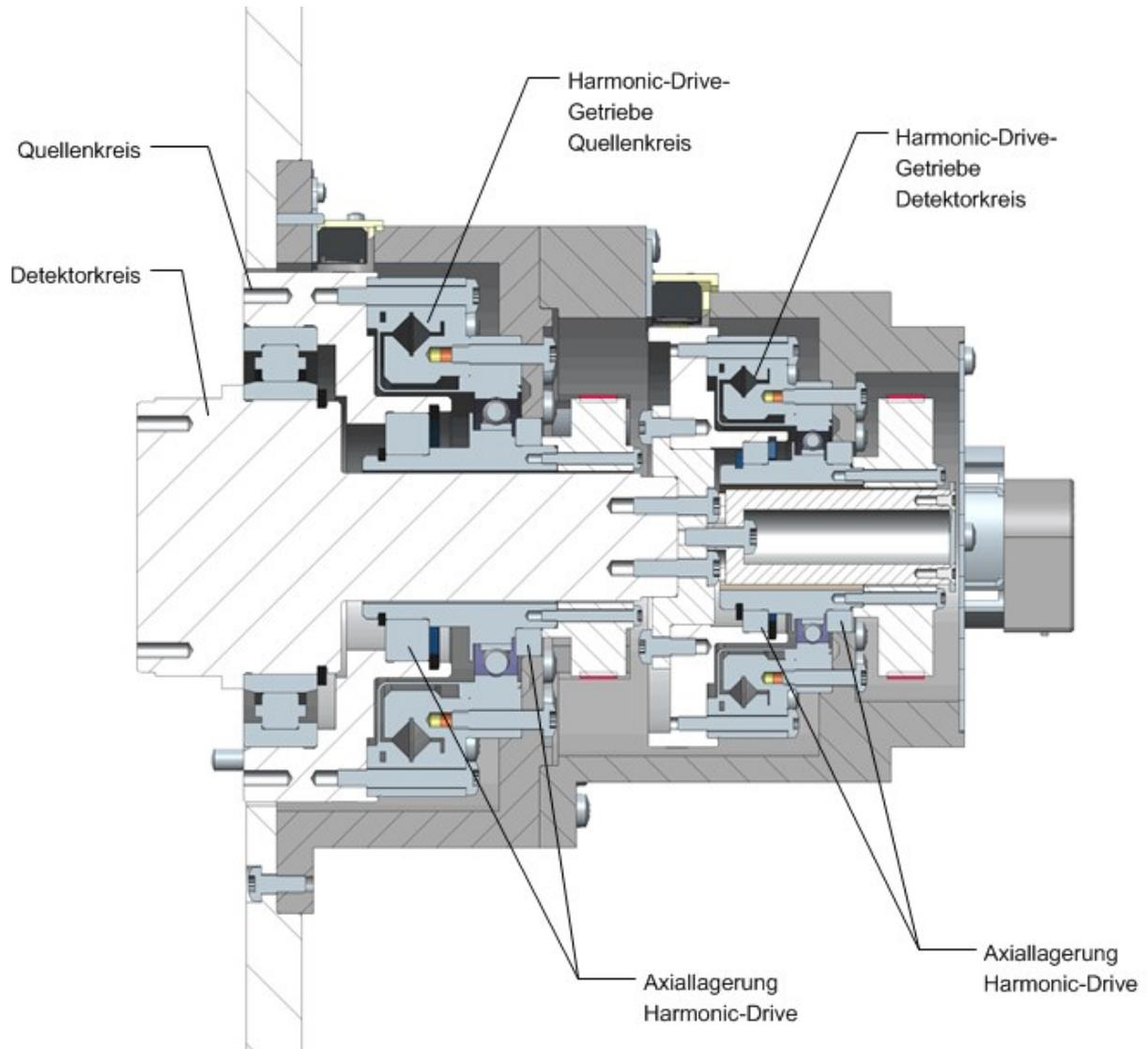


Abbildung 67: 3D Konstruktion des Goniometers in Schnittdarstellung, Quelle: Eigene Darstellung.

8.2.1 Antrieb

Eine Antriebseinheit setzt sich aus folgenden Komponenten zusammen: Schrittmotor mit Bremse und Encoder, Zahnriementrieb inklusive Spannrolle, Harmonic-Drive-Getriebe mit Abtriebswelle und Winkelmesssystem (siehe Abbildung 68). Zur vereinfachten Montage des Maßbandes befindet sich in der Abtriebswelle eine Nut, die es aufnimmt. Der Abtastkopf muss zur Maßverkörperung justiert werden. Er sitzt deshalb auf einem zusätzlichen Bauteil, dieses ermöglicht eine Justierung von drei Winkeln (Gier-, Roll-, und Nickwinkel) (siehe Abbildung 69). Die Winkeljustierung ist notwendig, da die Bauteile zueinander eine zu große Fertigungstoleranz aufweisen können und das Maßband durch das Aufkleben eine zusätzliche Abweichung aufweisen kann. Die Justierung erfolgt über eine Einstell-LED am Abtastkopf. Die Zahnriemenscheiben sitzen direkt auf der Abtriebswelle des Schrittmotors und auf der Antriebswelle des Harmonic-Drive-Getriebes. Da Zahnriemenscheiben mit Null-Lücke generell Spezialanfertigungen sind, können sie einfach auf die Anwendung hin angepasst werden. Dadurch werden zusätzliche Bauteile und damit Kosten vermieden. Zur Spannung des Zahnriemens wurde eine Exzenterrolle gewählt, welche durch Verdrehen den Riemen spannt.

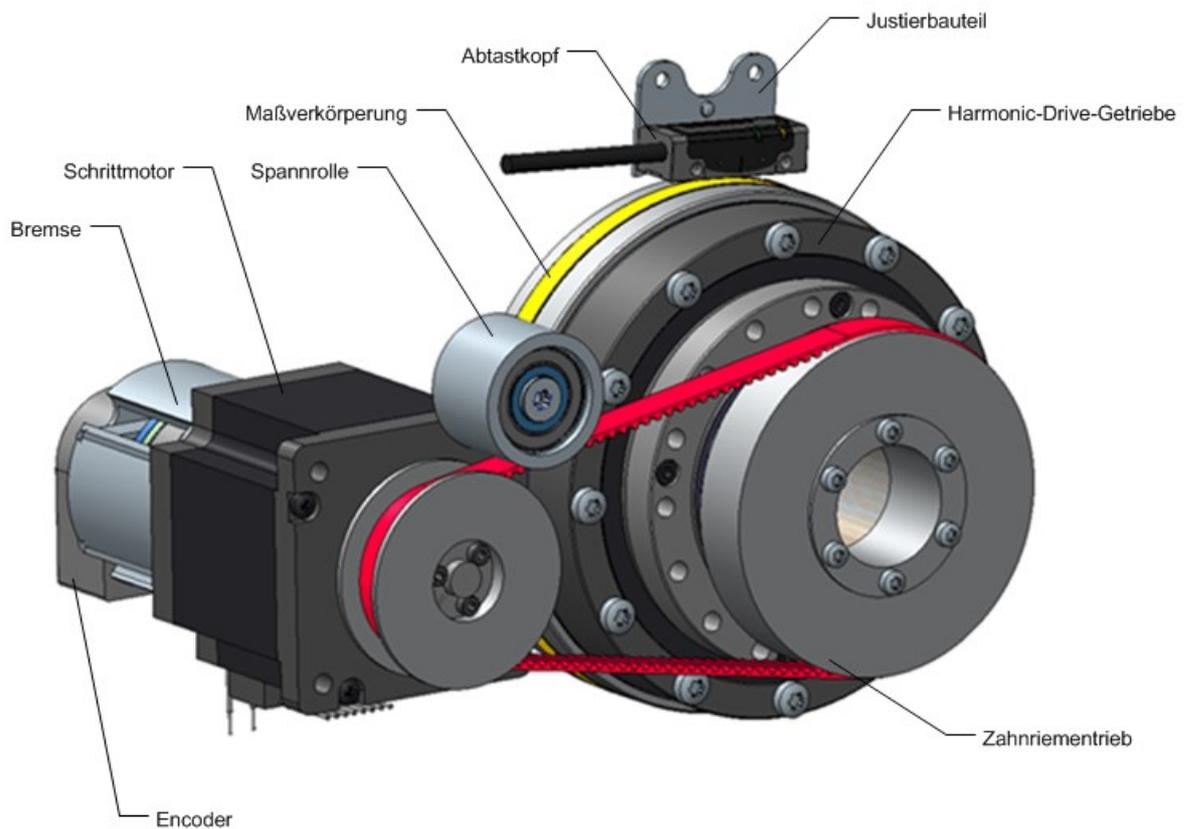


Abbildung 68: Antriebseinheit Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.

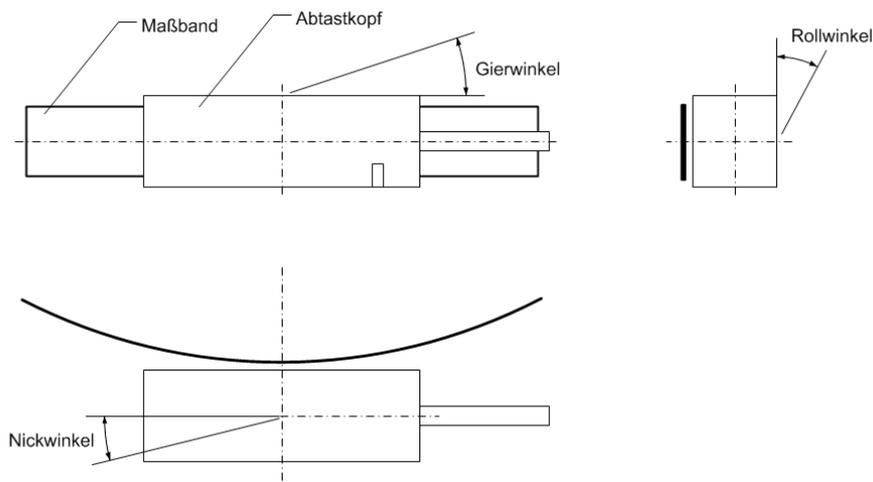


Abbildung 69: Definition von Gier-,Nick- und Rollwinkel, Quelle: Eigene Darstellung.

Im Gesamtsystem sind die Einheiten bis auf die unterschiedlichen Harmonic-Drive-Getriebe baugleich aufgebaut (siehe Abbildung 70). Durch das wechselseitige Montieren der Motoren, das heißt, einmal zeigt die Abtriebswelle nach vorne und einmal nach hinten, wird viel Platz eingespart. Allerdings ist zu beachten, dass die Motoren in unterschiedliche Richtungen drehen müssen. Dies bedeutet, wenn die Motoren beide in die gleiche Richtung drehen, bewegen sich die auf den jeweiligen Kreisen montierten Arme entweder aufeinander zu oder voneinander weg. Auch die Maßverkörperungen müssen entsprechend der Drehrichtung am Abtrieb montiert sein, da sie nicht den kompletten Winkelbereich von 360° abdecken.

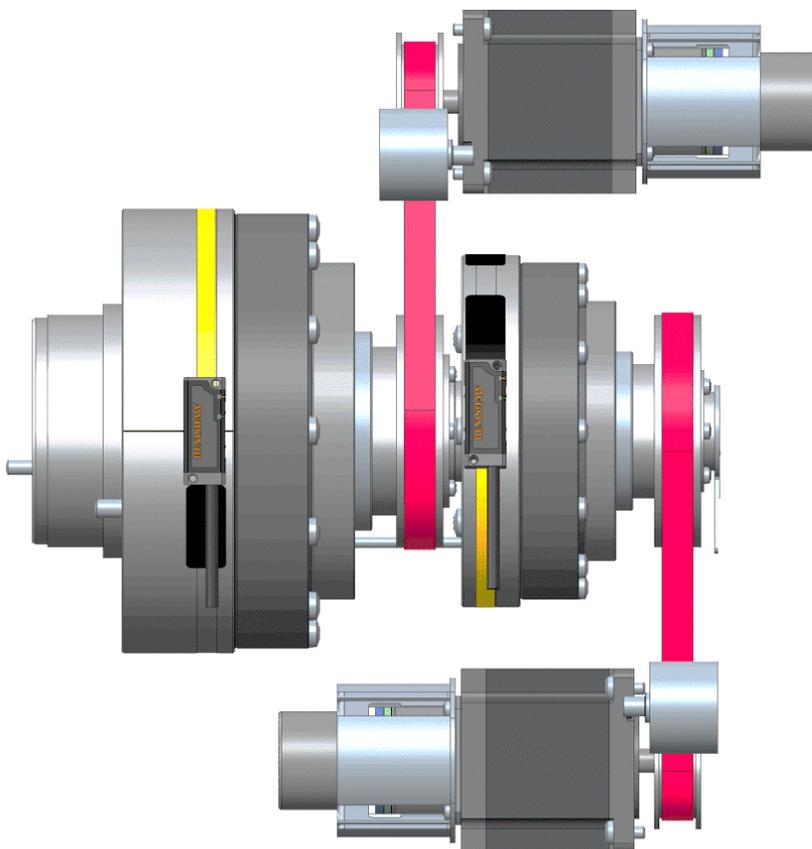


Abbildung 70: Antriebe des Goniometers, Quelle: Eigene Darstellung.

8.2.2 Gesamtsystem

Das Gesamtsystem wird für die Inbetriebnahme und die ersten Tests auf ein Stativ montiert. Dabei lassen sich sehr gut die Dimensionen des Gesamtgeräts abschätzen. Durch die geringe Tiefe des Antriebs im eingebauten Zustand von nur 210mm und einer Breite von 300mm kann davon ausgegangen werden, dass die Abmessungen von Breite und Tiefe (1200mmx800mm) einer Europalpalette eingehalten werden können. Für die Probenmanipulation und den Einbau von Komponenten ist in der Tiefe noch ein freier Raum von ungefähr 500mm und in der Breite von 800mm. Für die Höhe wird ein Wert von 1000mm abgeschätzt. Dies ergibt einen ausreichenden Platzbedarf für den einfachen Umbau von Komponenten und die Erweiterung des Geräts mit Zusätzen.

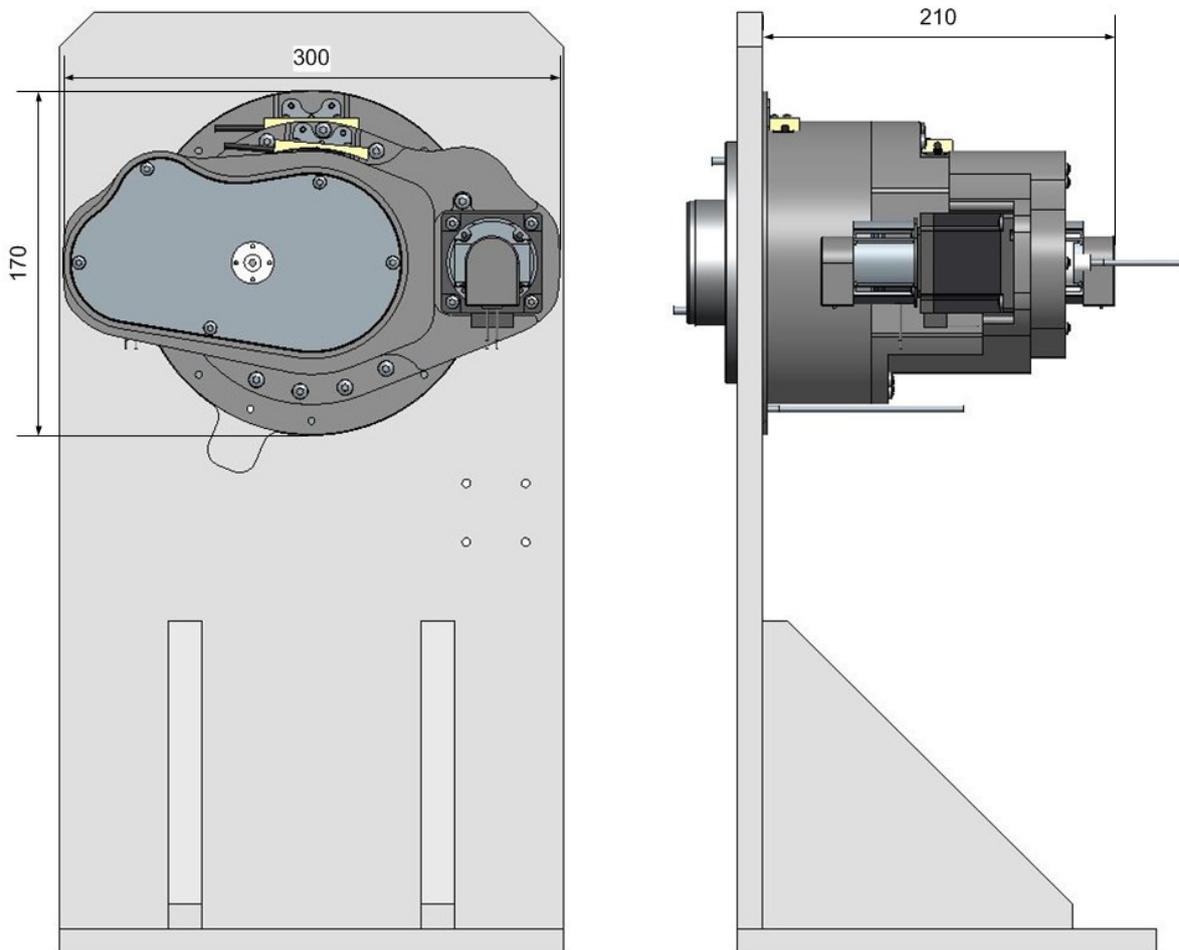


Abbildung 71: Abmessungen des Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.

8.3 Betrachtung der erreichbaren Genauigkeit

8.3.1 Bauteilverformung

Bei der Bauteilverformung wird jene Verformung betrachtet, welche die Genauigkeit des Winkels beeinflusst. Dies ist die Torsion der Bauteile nach dem Winkelmesssystem. Das Bauteil, welches das Moment an den Quellenkreis überträgt, besitzt aufgrund der Abmessungen eine hohe Steifigkeit und ist zudem auch noch sehr kurz. Es wird deshalb davon ausgegangen, dass dieses keiner großen Verformung ausgesetzt wird, welche einen Einfluss auf die Genauigkeit hat. Die Welle, welche allerdings das Drehmoment an den Detektorkreis überträgt, wird eine Verformung erfahren, welche einen Einfluss hat. Daraus folgt, dass für dieses Bauteil der Verdrehwinkel bei maximalem Moment berechnet werden muss. Es wird ein maximales Moment von 40Nm angenommen (siehe Kapitel 8.1), die Abmessungen für den kritischen Bereich sind aus Abbildung 72 zu entnehmen. Als Werkstoff für die Berechnung wird Aluminium verwendet. Der Vorteil des Werkstoffs Aluminium besteht in seinem geringen Gewicht und der einfachen Bearbeitbarkeit.

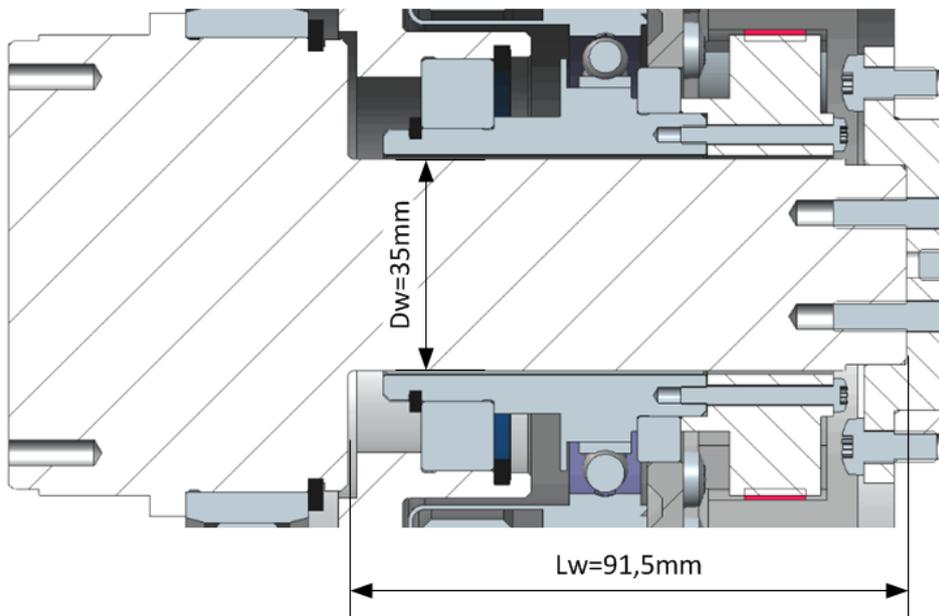


Abbildung 72: Abmessungen für die Torsionsberechnung, Quelle: Eigene Darstellung.

$$I_T = \frac{D_W^4 \pi}{32} \quad (1.24) \quad \begin{array}{ll} I_T/m^4 & \text{Torsionsträgheitsmoment} \\ D_W/m & \text{Durchmesser Welle} \\ D_W=0,035m & \end{array}$$

Nach dem Einsetzen ergibt sich ein Torsionsträgheitsmoment von $147323,5\text{mm}^4$. Dieses wird nun in die Gleichung des Verdrehwinkels eingesetzt.

$$\varphi = \frac{M_D L_W}{G_A I_T} \quad (1.25)$$

φ/rad	Verdrehwinkel
M_D/Nm	Drehmoment Detektorarm
$M_D=40\text{Nm}$	
L_W/m	Länge Welle
$L_W=0,0915\text{m}$	
G_A/Nm^{-2}	Schubmodul Aluminium
$G_A=25\,500\,000\,000\text{Nm}^{-2}$	

Dies ergibt einen Wert von 0,000974rad, in Grad umgerechnet sind dies 0,056°. Diese Verformung ist elastisch und beträgt nur an dem Punkt 0,056°, an dem das maximale Moment von 40Nm wirkt, also nur wenn der Detektorarm horizontal steht. Dieser Wert liegt außerhalb der Genauigkeit von ±0,01°, ist aber gering genug, um ihn durch Kalibrieren des Geräts mittels Software herauszurechnen. Beim Ändern des Werkstoffes auf Stahl steigt der Schubmodul auf 79300Nmm⁻² an, das heißt, die Verformung sinkt auf 0,018°.

Durch Ändern des Werkstoffes kann die Verformung um über ein Drittel reduziert werden, befindet sich aber immer noch nicht in der Toleranz. Eine weitere Maßnahme ist es, eine Hohlwelle aus Stahl einzusetzen, dies reduziert die Verdrehung nochmals. Allerdings muss weiters noch beachtet werden, dass nach der Welle noch der Arm und weitere Bauteile angebaut werden. Diese besitzen ebenso eine elastische Verformung und in Summe ist davon auszugehen, dass ein Erreichen einer Gesamtgenauigkeit von kleiner ±0,01° ohne Kalibrieren des Systems nicht möglich ist. Deshalb wird für die Prototypen, aufgrund des geringeren Gewichts und der einfacheren Bearbeitbarkeit, eine Welle aus Aluminium gefertigt und der etwas größere Verdrehwinkel gegenüber einer Stahlwelle in Kauf genommen. Ein Kalibrieren wird ohnehin notwendig sein.

8.3.2 Messsystem

Es folgt die Berechnung der erreichbaren Genauigkeit beim Aufbringen des Maßbandes. Die Außendurchmesser sind laut Konstruktion 145mm und 115mm. Die Dicke des Maßbandes beträgt 0,2mm und wird dem Durchmesser hinzu gezählt, das heißt, die Durchmesser für die Berechnung betragen 145,4mm und 115,4mm:

$$A_1 = \frac{D_1 \pi 0,01^\circ}{360^\circ} = 12,68\mu\text{m} \quad (1.26)$$

A_1/m	Bogenlänge bei 0,01° und D_1
D_1/m	Außendurchmesser der aufgetragenen Maßverkörperung
$D_1=0,1454\text{m}$	

$$A_2 = \frac{D_2 \pi 0,01^\circ}{360^\circ} = 10,07\mu\text{m} \quad (1.27)$$

A_2/m	Bogenlänge bei 0,01° und D_2
D_2/m	Außendurchmesser der aufgetragenen Maßverkörperung
$D_2=0,1154\text{m}$	

Beim Durchmesser 145,4mm wird das Maßband auf einem Winkelbereich von 130° aufgebracht. Dies ergibt einen Umfang des Teilstückes von 164,95mm. Wird dieser mit der Linearität von 0,75µm/60mm multipliziert, so erhält man 2,06µm. Der Umfang des Maßbandes beim Durchmesser von 115,4mm und einem abgedeckten Winkelbereich von 300° beträgt 302,11mm, wird dieser mit der gleichen Linearität multipliziert erhält man 3,8µm. Beide Werte liegen unter der geforderten Genauigkeit von 13,12µm,

beziehungsweise $10,07\mu\text{m}$, also unter $0,01^\circ$. Damit erfüllt das Maßband auf beiden Durchmessern die Anforderungen an die Genauigkeit.

8.4 Kostenabschätzung

Die Kostenabschätzung erfolgt für die Losgröße von zwei Prototypen. Für die Fertigungsteile, Lager und Kleinteile wird nur eine Position in der Tabelle angegeben, die anderen Zukaufteile werden einzeln aufgeschlüsselt. Die Kosten für die Fertigungsteile werden aufgrund des Grundmaterials und der Bearbeitung abgeschätzt.

Aus Tabelle 9 ist ersichtlich, dass die Kostengrenze von 7000€ für die beiden Prototypen nicht eingehalten wird. Da die Kosten für die Fertigungsbauteile nur eine Abschätzung sind, müssen diese nach erfolgter Fertigung nochmals betrachtet werden, um die tatsächlichen Kosten zu erhalten. Es ist aber zu sehen, dass die Abschätzung nicht weit von der Vorgabe entfernt liegt.

Bezeichnung	Anzahl/Prototyp	Kosten/Stück	Kosten Prototyp
Fertigungsbauteile	1	3500€	3500€
Lager	1	250€	250€
Kleinteile (Schrauben, Sicherungsringe,...)	1	100€	100€
Harmonic-Drive HFUS-32-2SH	1	1003€	1003€
Harmonic-Drive HFUS-25-2SH	1	912€	912€
Schrittmotor mit Bremse und Encoder	2	300€	600€
Zahnriemen	2	10,55€	21,10€
Zahnriemenscheibe Abtrieb Schrittmotor	2	32,40€	64,80€
Zahnriemenscheibe Antrieb Harmonic-Drive	2	67,57€	135,14€
Winkelmesssystem Abtastkopf	2	494€	988€
Maßband L=250mm	1	81,25€	81,25€
Maßband L=350mm	1	113,75€	113,75€
Endklemmen mit Kleber	2	20,40€	40,80€
Induktiver Schalter	2	20€	40€
Summe			7849,84€

Tabelle 9: Kostenabschätzung für die Prototypen, Quelle: Eigene Darstellung.

9 ERGEBNISSE

Die Ergebnisse dieser Masterarbeit sind eine erfolgte Analyse der Geräte der Mitbewerber und die daraus resultierenden Anforderungen an das Gesamtgerät sowie an das Goniometer. Dadurch sind die in den Zielen definierten Anforderungen an Genauigkeit, Winkelbereich und Auflösung bestätigt worden.

Die Erreichung des Zwei-Theta-Winkels von mindestens 165° ist aufgrund des Goniometers ohne Einschränkung möglich und ist nur abhängig von den angebauten Komponenten. Dies ist auch bei den Mitbewerbergeräten der Fall, das heißt, die Anbauteile, welche auf den Arm gebaut werden, müssen so konstruiert werden, dass eine Erreichung eines Winkelbereichs von mindestens 165° möglich ist. Die Flexibilität und die Modularität werden erhöht durch Verwendung von Harmonic-Drive-Getrieben in Verbindung mit Schrittmotoren und Winkelmesssystemen für weitere Antriebe. Aufgrund der kompakten Abmessungen der Antriebseinheit (siehe Kapitel 8.2.2) werden die Abmessungen des Gesamtgeräts mit einer Höhe von 1000mm, einer Breite von 1200mm und einer Tiefe von 800mm abgeschätzt. Im Vergleich mit dem Wettbewerb kann in fast allen Dimensionen eine deutlich kompaktere Bauweise realisiert werden, also eine Verminderung der Abmessungen um mindestens 10%. Allerdings wird beim Gerät des Herstellers Rigaku, dem SmartLab, dieser Wert von 10% in der Breite und in der Tiefe nicht erreicht. Bei der Höhe beträgt die Verminderung jedoch 46,5%.

Die Kostenabschätzung in Kapitel 8.4 hat ergeben, dass die Kosten für die beiden Prototypen über den geforderten Kosten von je 7000€ liegen werden. Dabei sind die Kosten für die Fertigungsteile allerdings nur abgeschätzt worden. Die Bauteile wurden bereits gefertigt und die tatsächlichen Kosten liegen bei rund 3200€. Dies reduziert die Gesamtkosten auf circa 7450€ für einen Prototypen. Dieser Betrag liegt aber immer noch außerhalb des Zieles. Es kann jedoch davon ausgegangen werden, dass, sobald mit einer Losgröße von fünf Stück gefertigt wird, die Kosten für Fertigungsteile und Zukaufteile noch weiter sinken und damit ein Unterschreiten der Grenze von 7000€ erreicht wird.

Die geforderte Genauigkeit von $\pm 0,01^\circ$ und Auflösung von $0,001^\circ$ des Antriebs kann laut Berechnungen durch das Winkelmesssystem erreicht werden. Durch die elastische Verformung der Bauteile ist allerdings ein Kalibrieren notwendig, um die geforderte Genauigkeit in jeder Position zu erreichen. Die Verifikation, ob die Anforderungen auch am Prototyp erfüllt werden, ist noch durchzuführen.

10 AUSBLICK

Die nächsten Schritte sind der Aufbau und die Inbetriebnahme der Prototypen inklusive funktionaler Tests. Danach hat die Überprüfung der erreichbaren Genauigkeit am Abtrieb zu erfolgen, ohne Last am Abtrieb. Bestätigen die Ergebnisse der Tests die Berechnung, sollten mit den Prototypen noch Dauerlauftests erfolgen, um die Langzeitstabilität zu testen.

Gleichzeitig müssen bereits die Konstruktion sowie die Fertigung der Anschlusskomponenten und der Goniometerarme erfolgen, damit im Anschluss an die Dauerlauftests das Messgerät mit einem Röntgenstrahl getestet und kalibriert werden kann. Diese Tests sollen Evaluierungsmessungen mit Referenzproben und echten Kundenproben beinhalten.

LITERATURVERZEICHNIS

Gedruckte Werke (13)

Allmann, Rudolf (2003): *Röntgenpulverdiffraktometrie*, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg

Babel, Gerhard (2014): *Elektrische Antriebe in der Fahrzeugtechnik*, 3. Auflage, Springer Vieweg Verlag, Wiesbaden

Ermrich, Martin; Opper, Detlef (2013): *XRD for the analyst*, 2. Auflage, PANalytical B.V., Almelo

Hesse, Stefan; Schnell, Gerhard (2009): *Sensoren für die Prozess- und Fabriksautomation*, 4. Auflage, Vieweg+Teubner, Wiesbaden

Krieger, Hanno (2005): *Strahlungsquellen für Technik und Medizin*, 1. Auflage, B.G. Teubner Verlag, Wiesbaden

Looman, Johannes; Pahl, Gerhard (1988): *Zahnradgetriebe*, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg

Pecharsky, Vitalij; Zavalij, Peter (2009): *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, 2. Auflage, Springer Verlag, o.O.

Schlecht, Berthold (2010): *Maschinenelemente 2*, 1. Auflage, Pearson Studium, München

Schnablegger, Heimo; Singh, Yashveer (2013): *The SAXS Guide*, 3. Auflage, Anton Paar GmbH, Graz

Schröder, Dierk (2007): *Elektrische Antriebe-Grundlagen*, 3. Auflage, Springer Verlag, Berlin Heidelberg

Spieß, Lothar; Teichert, Gerd; Schwarzer Robert; Behnken, Herfried; Genzel, Christoph (2009): *Moderne Röntgenbeugung*, 2. Auflage, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden

Teigelkötter, Johannes (2013): *Energieeffiziente elektrische Antriebe*, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden

Waseda, Yoshio; Maturaba, Eiichiro; Shinoda, Kozo (2011): *X-Ray Diffraction Crystallography*, Springer Verlag, Berlin Heidelberg

Online-Quellen (22)

Bruker Corporation (2016): *D8 Advance Diffraction Solutions*

<https://www.bruker.com/de/products/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/x-ray-diffraction/d8-advance/learn-more.html> [Stand: 16.09.2016]

Mulco-Europe EWIV (2014): *Downloads: Kataloge*

http://www.mulco.de/sites/default/files/downloads/synchroflex-gesamtkatalog_2014.pdf [Stand: 13.10.2016]

Harmonic Drive AG (2016): *Harmonic Drive Technologie: Harmonic Drive Wellgetriebe*

<http://harmonicdrive.de/de/technologie/harmonic-drive-wellgetriebe/> [Stand: 30.09.2016]

Rigaku Corporation (2016): *Home: HyPix-3000 Hybrid Pixel Array Detector*

<http://www.rigaku.com/en/node/5684> [Stand: 18.09.2016]

NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce (2013): *NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce*
<https://www-s.nist.gov/srmors/msds/1976B-MSDS.pdf> [Stand: 05.09.2016]

NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce (o.J.): *NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce*
<https://www.nist.gov/> [Stand: 05.09.2016]

PANalytical B.V. (2009): *Empyrean: The multi-purpose solution for your needs*
<http://www.panalytical.com/de/Empyrean/Technische-Daten.htm> [Stand: 06.09.2016]

PANalytical B.V. (2016): *Products*
<http://www.panalytical.com> [Stand: 06.09.2016]

Rigaku Corporation (2016): *Produkte: Smartlab*
<http://www.rigaku.com/en/products/xrd/smartlab> [Stand: 16.09.2016]

Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016): *Produkte: ST6018*
<http://de.nanotec.com/fileadmin/files/Datenblaetter/Schrittmotoren/ST6018/M/ST6018M3008-B.pdf>
[Stand: 19.10.2016]

Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016): *Produkte: ST6018: Baureihenübersicht*
http://de.nanotec.com/fileadmin/files/Baureihenuebersichten/Schrittmotoren/Baureihenubersicht_ST6018.pdf [Stand: 19.10.2016]

Rigaku Corporation (2016): *Produkte: Ultima IV*
<http://www.rigaku.com/en/products/xrd/ultima> [Stand: 18.09.2016]

Harmonic Drive AG (2014): *Produkte: Units: HFUS-2SH*
<http://harmonicdrive.de/de/produkte/units-getriebeboxen-und-planetengertriebe/units/hfus/hfus-2sh.html>
[Stand: 06.10.2016]

Bruker Corporation (2016): *Produkte: XRD-Komponenten Quellen*
<https://www.bruker.com/de/products/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/x-ray-diffraction/components/xrd-components/sources.html> [Stand: 06.09.2016]

Renishaw plc (2010): *Renishaw.de: Download Center*
<http://www.renishaw.de/de/tonic-rgsz-wegmess-system--10187> [Stand: 24.10.2016]

Renishaw plc (2016): *Renishaw.de: Download Center*
<http://resources.renishaw.com/en/details/data-sheet-vionic-series-encoder-system--85668> [Stand: 24.10.2016]

Rigaku Corporation (2014): *SmartLab 3 X-ray diffractometer*
<http://www.rigaku.com/en/products/xrd/smartlab> [Stand: 16.09.2016]

Anton Paar GmbH (2016): *Über uns: Anton Paar GmbH*
<http://www.anton-paar.com/corp-de/ueber-uns/> [Stand: 21.05.2016]

Bruker Corporation (2012): *D8 ADVANCE TWIN/TWIN*

<https://www.bruker.com/de/products/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/x-ray-diffraction/d8-advance/learn-more.html> [Stand: 11.01.2017]

Voith GmbH (o.J.): *Produkte & Leistungen: WinDrive Technologie*

<http://www.voith.com/de/produkte-leistungen/antriebstechnik/regelbare-getriebe/windrive-technologie-26074.html> [Stand: 16.01.2017]

Kayser, Andreas (2016): *Harmonic Drive Presse Publikationen*

<http://harmonicdrive.de/de/presse/publikationen/servo-antriebssysteme-mit-ferraris-sensor/> [Stand: 29.09.2016]

Speakman, Scott (o.J.): *Basics of X-Ray Powder Diffraction*

<http://prism.mit.edu/xray/oldsite/Basics%20of%20X-Ray%20Powder%20Diffraction.pdf> [Stand: 21.Mai.2016]

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1: CEO Friedrich Santner, Quelle: Anton Paar GmbH (2016), Online-Quelle [21.05.2016].	1
Abbildung 2: Frequenz und Wellenlänge von elektromagnetischen Strahlen, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S.10 (leicht modifiziert).	3
Abbildung 3: Vereinfachte Darstellung der Erzeugung von Röntgenstrahlung in Röntgenröhren, Quelle: Eigene Darstellung.	5
Abbildung 4: Röntgenspektrum, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 8.	6
Abbildung 5: Schematische Darstellung der Erzeugung charakteristischer Röntgenstrahlung, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S14 (leicht modifiziert).	7
Abbildung 6: Energieniveaus charakteristischer Röntgenstrahlung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 13 (leicht modifiziert).	8
Abbildung 7: Verhalten von Röntgenstrahlung bei Auftreffen auf Materie, Quelle: Schnablegger/Singh (2013), S 17 (leicht modifiziert).	9
Abbildung 8: Compton Streuung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 19.	11
Abbildung 9: Massenabschwächungskoeffizient als Funktion der Photonenenergie, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 32 (leicht modifiziert).	12
Abbildung 10: Aufbau eines Röntgenfilms, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 28.	13
Abbildung 11: Aufbau eines Szintillationsdetektors mit Auswerteeinheit, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S 131.	14
Abbildung 12: Aufbau eines Kristallgitters und dessen Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 42.	16
Abbildung 13: Aufbau einer Elementarzelle, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 7.	17
Abbildung 14: Anwendung des Miller-Index, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 8 (leicht modifiziert).	18
Abbildung 15: Darstellung der Richtungen in einem Kristallgitter, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 11.	19
Abbildung 16: Konvertierung eines realen Gitters in ein reziprokes Gitter, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 13 (leicht modifiziert).	20
Abbildung 17: Grafische Veranschaulichung des Bragg'schen Gesetzes, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 90.	21
Abbildung 18: Aufbau der Ewald Sphäre, Quelle: Pecharsky/Zavalij (2009), S. 145 (leicht modifiziert).	22
Abbildung 19: Schematische Darstellung eines Diffraktometers, Quelle: Eigene Darstellung.	23

Abbildung 20: Theta-Theta-Goniometer, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 149.....	25
Abbildung 21: Theta-Zwei-Theta-Goniometer, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 149.....	25
Abbildung 22: Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 159.....	26
Abbildung 23: Glanzwinkel bei Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 157.....	27
Abbildung 24: Transmissionsgeometrie mit Glaskapillare als Probe, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 32 (leicht modifiziert).	27
Abbildung 25: Einfluss der Probenhöhe (blaue Pfeile) bei Parallelstrahlgeometrie, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 32 (leicht modifiziert).	28
Abbildung 26: Aufbau einer Stehanodenröntgenröhre, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 96 (leicht modifiziert).....	29
Abbildung 27: Fokusarten bei einer Sealed-Tube Röhre, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 98 (leicht modifiziert).....	30
Abbildung 28: Strahlengang mit optischen Komponenten in Bragg-Brentano-Anordnung, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 31.	31
Abbildung 29: Funktionsweise Sollerspalt, Quelle: Speakman (o.J.), Online-Quelle [21.Mai.2016].....	32
Abbildung 30: Einfacher Probenträger für Festkörper, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 152 (leicht modifiziert).....	33
Abbildung 31: Deybe-Scherrer Anordnung mit Streuegeln, Quelle: Ermrich/Opper (2013), S. 40.	34
Abbildung 32: Liniendetektor in gasgefüllter Ausführung mit Zähl draht, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 135 (leicht modifiziert).....	35
Abbildung 33: Flächendetektor mit Halbleiterstreifen, Quelle: Spieß/Teichert/Schwarzer Robert/Behnken/Genzel (2009), S. 139.	35
Abbildung 34: Ansteuerung eines Reluktanz-Schrittmotors mit drei Statorsträngen, Quelle: Schröder (2007), S. 484.....	36
Abbildung 35: Permanentmagnet-Schrittmotor mit zwei Statorwicklungen, Quelle: Schröder (2007), S. 486.....	37
Abbildung 36: Aufbau eines Hybridschrittmotors, Quelle: Schröder (2007), S. 488 (leicht modifiziert).....	37
Abbildung 37: Unipolare Ansteuerung, Quelle: Schröder (2007), S. 499.	38
Abbildung 38: Diffraktometer D8 Advance von Bruker, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].....	40

Abbildung 39: Abweichung vom Sollwert über den gesamten Bereich von Zwei-Theta bei dem D8 Advance Diffraktometer, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].	41
Abbildung 40: Drehanodenröntgenröhre, Quelle: Krieger (2005), S. 125 (leicht modifiziert).	43
Abbildung 41: TWIN-Optik, Quelle: Bruker Corporation (2012), Online-Quelle [11.01.2017].	44
Abbildung 42: Diffraktometer Empyrean von PANalytical, Quelle: PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016].	45
Abbildung 43: SmartLab Diffraktometer, Quelle: Rigaku Corporation (2014), Online-Quelle [16.09.2016].	48
Abbildung 44: Ansicht des Goniometers von oben mit in-plane Achse, Quelle: Eigene Darstellung.	49
Abbildung 45: Prinzipskizze Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.	58
Abbildung 46: Kräfteverhältnisse am Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.	59
Abbildung 47: Vom permanenterregten Synchronmotor zu Direktantrieben, Quelle: Teigelkötter (2013), S. 148.	60
Abbildung 48: Aufbau eines einstufigen Planetengetriebes, Quelle: Voith GmbH (o.J.), Online-Quelle [16.01.2017] (leicht modifiziert).	61
Abbildung 49: Funktionsweise Harmonic-Drive-Getriebes, Quelle: Kayser (2016), Online-Quelle [29.09.2016].	62
Abbildung 50: Spindeltrieb, Quelle: Eigene Darstellung.	63
Abbildung 51: Probenaufnahme mit starrer Achse von vorne, Quelle: Eigene Darstellung.	69
Abbildung 52: Skizze der Entwurfsvariante, Quelle: Eigene Darstellung.	71
Abbildung 53: Abmessungen Harmonic-Drive, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 15 (leicht modifiziert).	73
Abbildung 54: Bestimmung der Genauigkeit, Quelle: In Anlehnung an Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 64 ff.	74
Abbildung 55: Einbau und Drehrichtung Harmonic-Drive Getriebe, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 26 (leicht modifiziert).	76
Abbildung 56: Wirkungsgrad Harmonic-Drive Untersetzung 160, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 38 (leicht modifiziert).	78
Abbildung 57: Berechnungsfaktor des Wirkungsgrades, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 34 (leicht modifiziert).	78
Abbildung 58: Wirkung der Axialkräfte im Harmonic-Drive Getriebe, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 51.	79
Abbildung 59: Abmessungen Zahnriemen AT3 GEN III, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 28.	80

Abbildung 60: Darstellung der verschiedenen Lückenformen, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 18 (leicht modifiziert).	81
Abbildung 61: Bordscheibe zur axialen Sicherung, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 17 (leicht modifiziert).....	81
Abbildung 62: Riemenvorspannung im Leertrum, Quelle: Mulco-Europe EWIV (2014), Online-Quelle [13.10.2016], S. 20.	82
Abbildung 63: Abmessungen ST6018M3008-B, Quelle: Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016), Online-Quelle [19.10.2016].....	82
Abbildung 64: Drehmoment-Drehzahlkurve ST6018M3008, Quelle: Nanotec Electronic GmbH & Co. KG (2016), Online-Quelle [19.10.2016], S.2.....	83
Abbildung 65: Zyklischer Fehler VIONiC und VIONiC plus, Quelle: Renishaw plc (2016), Online-Quelle [24.10.2016], S. 2 (leicht modifiziert).....	85
Abbildung 66: Ausgabesignal VIONiC, Quelle: Renishaw plc (2016), Online-Quelle [24.10.2016], S. 8 (leicht modifiziert).	87
Abbildung 67: 3D Konstruktion des Goniometers in Schnittdarstellung, Quelle: Eigene Darstellung.....	91
Abbildung 68: Antriebseinheit Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.....	92
Abbildung 69: Definition von Gier-,Nick- und Rollwinkel, Quelle: Eigene Darstellung.....	93
Abbildung 70: Antriebe des Goniometers, Quelle: Eigene Darstellung.	93
Abbildung 71: Abmessungen des Goniometer, Quelle: Eigene Darstellung.....	94
Abbildung 72: Abmessungen für die Torsionsberechnung, Quelle: Eigene Darstellung.	95

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1: Technische Daten D8 Advance, Quelle: Bruker Corporation (2016), Online-Quelle [16.09.2016].....	42
Tabelle 2: Technische Daten Empyrean, Quelle: PANalytical B.V. (2016), Online-Quelle [06.09.2016]...	46
Tabelle 3: Technische Daten SmartLab, Quelle: Rigaku Corporation (2014), Online-Quelle [16.09.2016].	50
Tabelle 4:Vergleich der Messgeräte der drei Mitbewerber, Quelle: Eigene Darstellung.	54
Tabelle 5: Vergleichsmatrix der verschiedenen Varianten, Quelle: Eigene Darstellung.....	67
Tabelle 6: Technische Daten der Baugröße HFUS-32, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 14.	73
Tabelle 7: Genauigkeiten des Harmonic-Drive Getriebes HFUS32-SH, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 20 (leicht modifiziert).....	75
Tabelle 8: Technische Daten der Baugröße HFUS-32, Quelle: Harmonic Drive AG (2014), Online-Quelle [06.10.2016], S. 12.	90
Tabelle 9: Kostenabschätzung für die Prototypen, Quelle: Eigene Darstellung.	97

ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

cps	counts per second
RTMS	real time multiple strips
GADS	gaseous area detector
CCD	charged couple device
NIST	National Institute of Standards and Technology
SAXS	small angle X-ray scattering

ANHANG 1: BRAVAIS GITTER

Entnommen aus Ernrich/Opper (2013), S. 19.

Bravais lattices

The Bravais lattices (see Table 3) are the 14 possible lattices given by translation symmetry. These simple lattices allow to describe all crystal structures, even complicated ones (Figure 9).

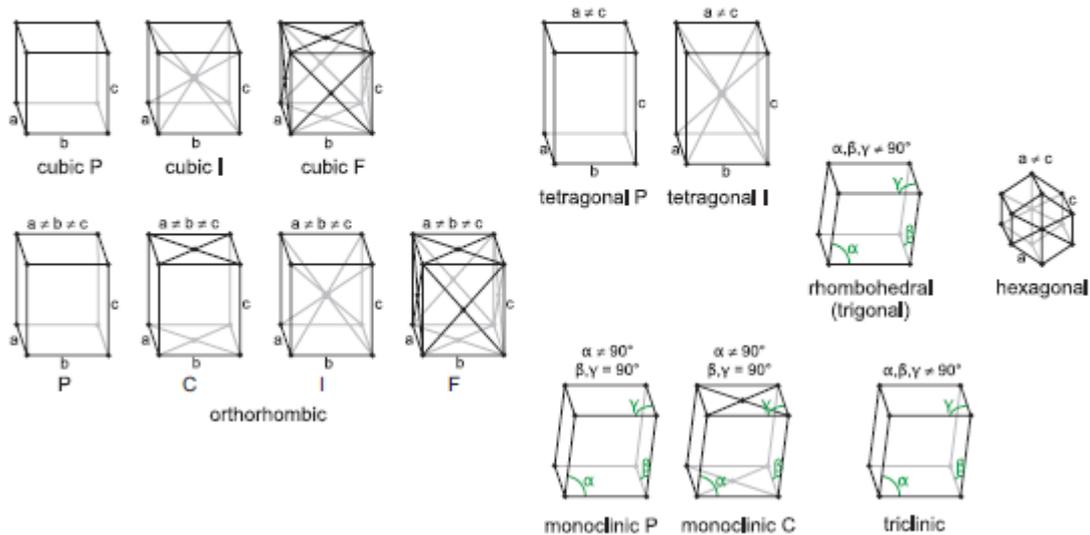


Figure 9. Graphical representation of the 14 Bravais lattices

Table 3. The 14 Bravais lattices

System	Unit cell	lattice parameters	angles
triclinic	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
monoclinic	P, C	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
orthorhombic	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal	R	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
hexagonal	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
tetragonal	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
cubic	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
P	primitive unit cell		
C	face-centered unit cell		
I	body-centered unit cell		
F	all-face-centered unit cell		
Some abbreviations to describe the unit cell:			
pc	primitive cubic		
bcc	body-centered cubic		
fcc	face-centered cubic		
hcp	hexagonal closed packed		

ANHANG 2 AUSLEGUNG ZAHNRIEMEN

Protokoll Synchroflex - Zahnriemen 10.0 AT3/399.0-GenIII

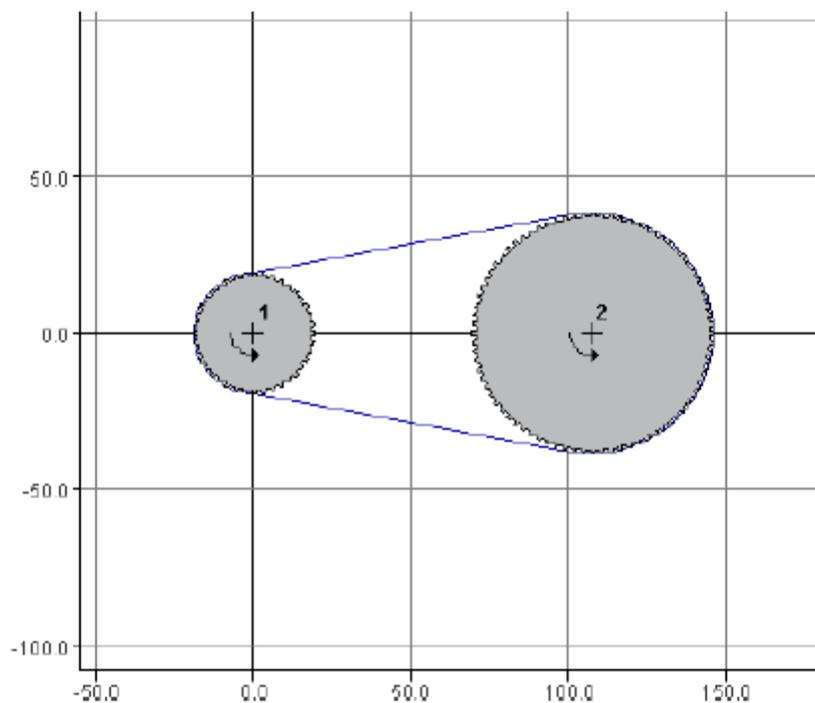
Seite 1 von 4

Haberkorn GmbH

Modecenterstraße 7 - A-1030 Wien
 Tel: ++ 43 (1) 74074-0 - Fax: ++ 43 (1) 74074-99
 eMail: info.wien@haberkorn.com

HABERKORN
 EINFACH BESSER

Geometrieübersicht Fa. Paar (Projekt E29)



Rad	Drehr.	Zähnezahl	X [mm]	Y [mm]	WirkØ [mm]	AußenØ [mm]	Truml. [mm]	Umschl.-winkel [°]	Bogenl. [mm]	Achsabst. [mm]
1	gUz	40	0.00	0.00	38.35	37.77	105.86	159.55	53.39	107.57
2	gUz	80	107.57	0.00	76.54	75.96	105.86	200.45	133.89	107.57

Synchroflex - Zahnriemen 10.0 AT3/399.0-GenIII

15. Juli 2016

MULCO
 THE STRONG PARTNER SINCE 1952
 Version 3.34

Haberkorn GmbH

Modecenterstraße 7 - A-1030 Wien
 Tel: ++ 43 (1) 74074-0 - Fax: ++ 43 (1) 74074-99
 eMail: info.wien@haberkorn.com

HABERKORN
 EINFACH BESSER

**Leistungsübersicht
 Fa. Paar (Projekt E29)**

Rad	Zähne- zahl	Drehzahl [1/min]	eingr. Zähne	eingr. Zähne (für Leistung)	Truml. [mm]	Freq. [Hz]	erforderliche Breite [mm]	max. übertragb. Leistung [kW]
1	40	150.00	17.00	16.00	105.86	149.59	0.79	0.19
2	80	75.00	44.00	16.00	105.86	149.59	0.76	0.18

Synchronflex - Zahnriemen 10.0 AT3/399.0-GenIII

15. Juli 2016


 Version 3.34

Haberkorn GmbH

Modecenterstraße 7 - A-1030 Wien
 Tel: ++ 43 (1) 74074-0 - Fax: ++ 43 (1) 74074-99
 eMail: info.wien@haberkorn.com

HABERKORN
 EINFACH BESSER

Leistungsdaten Fa. Paar (Projekt E29)
--

Leistungsdaten für Rad Nr. 1**Leistungsdaten**

Leistung	P	=	0.02 kW
Drehmoment	M	=	1.00 Nm
Umfangskraft	F_U	=	52.16 N
statische Achslast	F_A	=	51.33 N

Antriebsdaten

Mittelpunkt	X	=	0.00 mm
Mittelpunkt	Y	=	0.00 mm
Drehrichtung		=	gegen Uhrzeigersinn
Achsabstand	a	=	107.57 mm
Trumlänge	l_T	=	105.86 mm
Zähnezahl	z_1	=	40.00
Kopfkreisdurchmesser	d_{k1}	=	37.77 mm
Fusskreisdurchmesser	d_{f1}	=	35.77 mm
Wirkkreisdurchmesser	d_{d1}	=	38.35 mm
Drehzahl	n_1	=	150.00 1/min
Umfangsgeschwindigkeit	v_1	=	0.30 m/s
eingreifende Zähnezahl	z_{e1}	=	17.00
Umschlingungswinkel	β_1	=	159.55 °

Zahnriemendaten

Teilung	t	=	3.00 mm
Riemenlänge	L_B	=	399.00 mm
Riemenbreite bei Sicherheit = 1	$b_{B=1}$	=	0.79 mm
Riemenbreite gewählt	b	=	10.00 mm
Sicherheit des Seilzuges	S_{Seil}	=	11.46
Sicherheit der Zahnfestigkeit	S_{Zahn}	=	12.72
Vorspannkraft der Trumlänge	F_v	=	26.08 N
Trumkraft max.	$F_{Trum\ max.}$	=	52.26 N
Frequenz	f	=	149.59 Hz

Synchroflex - Zahnriemen 10.0 AT3/399.0-GenIII

15. Juli 2016



Version 3.34

Haberkorn GmbH

Modecenterstraße 7 - A-1030 Wien
 Tel: ++ 43 (1) 74074-0 - Fax: ++ 43 (1) 74074-99
 eMail: info.wien@haberkorn.com

HABERKORN
 EINFACH BESSER

Leistungsdaten
Fa. Paar (Projekt E29)

Leistungsdetails für Rad Nr. 2**Leistungsdaten**

Leistung	P	=	-0.02 kW
Drehmoment	M	=	-2.00 Nm
Umfangskraft	F _U	=	-52.26 N
statische Achslast	F _A	=	51.33 N

Antriebsdaten

Mittelpunkt	X	=	107.57 mm
Mittelpunkt	Y	=	0.00 mm
Drehrichtung		=	gegen Uhrzeigersinn
Achsabstand	a	=	107.57 mm
Trumlänge	l _T	=	105.86 mm
Zähnezahl	z ₂	=	80.00
Kopfkreisdurchmesser	d _{k2}	=	75.96 mm
Fusskreisdurchmesser	d _{f2}	=	73.96 mm
Wirkkreisdurchmesser	d ₀₂	=	76.54 mm
Drehzahl	n ₂	=	75.00 1/min
Umfangsgeschwindigkeit	v ₂	=	0.30 m/s
eingreifende Zähnezahl	z _{e2}	=	44.00
Umschlingungswinkel	β ₂	=	200.45 °

Zahnriemendaten

Teilung	t	=	3.00 mm
Riemenlänge	L _B	=	399.00 mm
Riemenbreite bei Sicherheit = 1	b _{S=1}	=	0.76 mm
Riemenbreite gewählt	b	=	10.00 mm
Sicherheit des Seilzuges	S _{Seil}	=	11.46
Sicherheit der Zahnfestigkeit	S _{Zahn}	=	13.11
Vorspannkraft der Trumlänge	F _v	=	26.08 N
Trumkraft max.	F _{Trum max.}	=	52.26 N
Frequenz	f	=	149.59 Hz

Synchroflex - Zahnriemen 10.0 AT3/399.0-GenIII

15. Juli 2016



Version 3.34