

Atomare Defekte mit makroskopischer Wirkung

Atomic Defects – Small in Size but Big in Effect

Wolfgang Sprengel, Werner Puff, Roland Würschum

Materialien wie Metalle und Keramiken bestehen makroskopisch betrachtet aus dichtest gepackter Materie. Auf atomistischer Skala jedoch sind sehr wohl freie Gitterplätze (Leerstellen) oder aber im Fall von amorphen Materialien bzw. Gläsern auch freie Volumen¹ vorhanden. Diese Defekte, zu denen im weitesten Sinn auch Versetzungen oder Grenzflächen gehören, sind jedoch keineswegs unerwünscht. Sie können im Vergleich zum perfekten Festkörper die physikalischen Eigenschaften signifikant verbessern, wenn sie gezielt eingesetzt werden.

Atomare Defekte im Kristallgitter wirken zum Teil plastischer Verformbarkeit entgegen und können so eine Erhöhung der Festigkeit bewirken. Für das Verständnis solcher Phänomene bedarf es experimenteller Methoden, die spezifisch für atomare Defekte sind. Die Art und die Kinetik dieser Defekte, wie sie am Institut für Materialphysik untersucht werden, können durch eine einzigartige Kombination zweier direkter Methoden, der Messung der makroskopischen Längenänderung (Dilatometrie)^{1,2} und der atomistischen Methode der Positron-Elektron-Zerstrahlung, gezielt bestimmt werden, wie jetzt erfolgreich gezeigt werden konnte³.

Die oben beschriebenen Defekte sind im Vergleich zum perfekten Festkörper stets mit einem zusätzlichen Volumen verknüpft, sodass man die Konzentration und die Kinetik dieser Defekte studieren kann, indem man sie durch thermische Behandlung wieder aus dem Festkörper in Richtung auf einen perfekten Festkörper hin ausheilen lässt. Diese Prozesse sind mithilfe der Dilatometrie, also direkt über eine makroskopische Längenänderung, messbar (Abb. 1). Eine weitere Methode, die spezifisch für atomare Volumen ist, ist die Positron-Elektron-Zerstrahlung. Wenn Positronen, die Antiteilchen der Elektronen, im zu

Viewed on a macroscopic scale, materials such as metals or ceramics appear as closely packed matter. From an atomistic viewpoint, however, unoccupied lattice sites (vacancies) or in the case of amorphous materials such as glasses, free volume can also exist inside a solid material¹. These kinds of atomic defects also comprising dislocations and interfaces are by no means detrimental to a material's properties. Compared to the perfect crystal lattice, these defects can enhance some of a material's physical properties significantly.

Deliberately induced atomic defects and/or imperfection in the lattice structure such as dislocations or interfaces can, for instance, inhibit plastic deformation and thus strengthen the material. For the study of such phenomena, experimental methods are required that are sensitive and specific to atomic defects. The type and the kinetics of such defects can be studied by a unique combination of two direct experimental techniques: by macroscopic length change measurements (dilatometry)^{1,2} and by the atomistic techniques of positron-electron annihilation, as has been demonstrated recently³.

Compared to the perfect solid material, the above-described atomic defects always induce additional volume, so-called excess volume. The type of defect and its kinetics can be studied during thermal heat treatment. Then this additional volume is removed when the solid again approaches the ideal, defect-free state. These processes can be directly studied by macroscopic length change measurements (Fig. 1). Another also very effective method, specific to atomic volume, is based on positron-electron annihilation. When a positron, the antiparticle of the electron, annihilates with an electron inside a solid, analysis of the annihilation radiation gives detailed information about the atomic defects³ (Fig. 2). For statistically

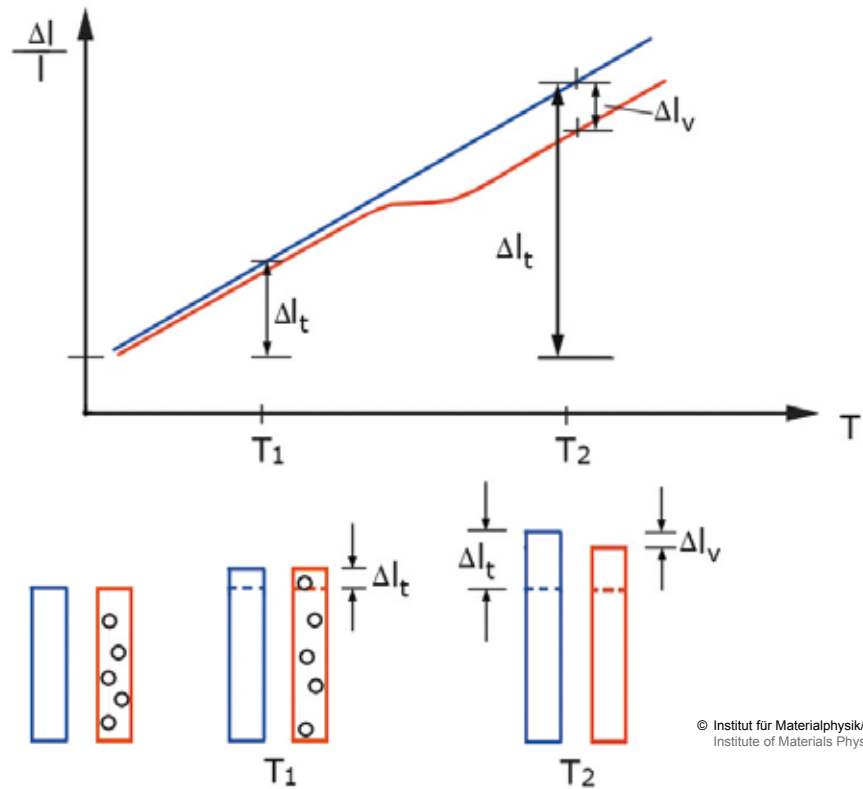


Wolfgang Sprengel arbeitet am Institut für Materialphysik auf dem Gebiet der Physik strukturell komplexer Materialien, zu denen neben nanostrukturierten Materialien auch intermetallische Verbindungen und metallische Gläser zählen.

Wolfgang Sprengel is with the Institute of Materials Physics and is working in the field of physics of structurally complex materials which besides nanostructured materials also comprises intermetallic compounds and bulk metallic glasses.

Abb. 1: Bei einer Temperaturbehandlung heilen in realen Materialien (rot) atomare Defektvolumen aus, was eine Schrumpfung Δl_v bewirkt, die der linearen thermischen Ausdehnung überlagert ist. Im Vergleich zu einer perfekten Referenzprobe (blau) sind somit das Ausheilen der Defekte und deren Kinetik direkt messbar.

Fig. 1: In real materials (red) excess volume associated with atomic defects anneal out upon heating. This produces a shrinking of the specimen Δl_v which is superimposed to the linear thermal expansion. Thus, in comparison with a perfect, defect-free reference specimen (blue) the atomic defects and their kinetics can directly be measured.



© Institut für Materialphysik/
Institute of Materials Physics



Werner Puff leitet das Arbeitsgebiet Nukleare Festkörperphysik am Institut für Materialphysik.

Er befasst sich schwerpunktmäßig mit der Untersuchung atomarer Defekte mit Methoden der Positron-Elektron-Annihilation.

Werner Puff is in charge of the research topic on nuclear solid-state physics at the Institute of Materials Physics. His focus is on the study of atomic defects by means of methods of positron-electron annihilation.

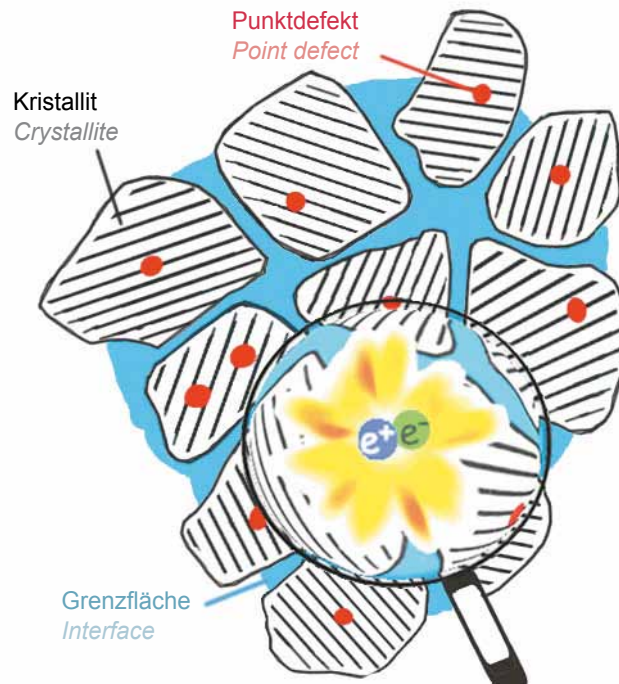
untersuchenden Material mit den dort vorhandenen Elektronen zerstrahlen, kann eine Analyse der Zerstrahlung detailliert Auskunft über die atomaren Defekte geben (Abb. 2). Um statistisch gesicherte Aussagen zu bekommen, benötigt man Millionen solcher Positron-Elektron-Zerstrahlungsereignisse, was im Labor Messzeiten von Stunden bedeuten kann. Zur Charakterisierung stabiler Zustände ist das unproblematisch. Reale Prozesse in Materialien aber, wie etwa Verformung oder Bruch, laufen im Bereich von Sekunden oder Minuten ab. Zu deren Untersuchung reichen dann die Intensitäten von Positronenquellen, so wie sie im Labor standardmäßig genutzt werden und die einen radioaktiven Zerfall ausnutzen, nicht mehr aus.

Das Institut für Materialphysik hat nun in einer Kooperation mit Kollegen des Forschungsreaktors FRM II der TU München den dortigen Positronenstrahl mit der weltweit zurzeit höchsten Intensität nutzen können, um die schnelle Kinetik atomarer Defekte in neuartigen, nanostrukturierter Metallen zu untersuchen³ (Abb. 2). Die nanokristallinen Massivmetalle wurden mit dem Verfahren der Hochdruck-Torsion erzeugt, bei dem ein Metall unter einer sehr hohen Last langsam verdreht wird. Das ist ein spezielles Verfahren, das am Erich Schmid Institut für Materialwissenschaft in Leoben weiterentwickelt wurde. Die Forschungsarbeiten der TU Graz-Wissenschaftler und -Wissenschaftlerinnen sind daher auch eng

relevant results, millions of such annihilation events have to be analysed, which easily can add up to several hours of measurement time in the laboratory. This fact is not critical for the analysis of static, stable conditions inside the material. However, real processes in solids, such as deformation or fracture occur in the range of seconds or minutes. For the study of such phenomena, positron sources conventionally used in the laboratory and the exploitation of certain radioactive decay events do not show high enough intensity. For this reason, in a successful collaboration with colleagues of the research reactor FRM II at TU München, which has the world's highest-intensity positron beam capability, the Institute of Materials Physics carried out a study of fast atomic defect kinetics in novel nanocrystalline bulk metals (Fig. 2). The nanocrystalline bulk metals have been produced by methods of high-pressure torsion where a metal is subjected to slow mechanical distortion under a high axial load; this special technique has been further developed and up-scaled at the Erich Schmid Institute, Leoben. Thus, the TU Graz researchers are also in close collaboration with a national research network (NFN) of the Austrian Science Fund (FWF) on bulk nanocrystalline metals where besides the Erich Schmid Institute in Leoben, the University of Vienna, Karl Franzens University Graz and TU Vienna are also involved. In a joint effort the researchers are elucidating the secrets of the en-

Abb. 2: Wenn in einem Festkörper ein Positron (e^+) und ein Elektron (e^-) aufeinandertreffen, löschen sie sich gegenseitig aus. Eine genaue Analyse der bei der Zerstrahlung entstehenden Gammastrahlung gibt spezifische Informationen über den Zerstrahlungsort und somit über die Materialdefekte. So lassen sich die atomaren Prozesse, an denen fehlende Atome (Punktdefekte), eingeschobene Gitterebenen (Versetzungen) oder aber auch Grenzflächen zwischen den Kristalliten beteiligt sind, genau untersuchen.

Fig. 2: When a positron (e^+) encounters an electron (e^-) inside a solid, both annihilate. Detailed analysis of the resulting gamma-radiation yields specific information about the annihilation site and thus about the defect situation inside the material. By this method atomic processes can be studied which are based on missing atoms (point defects), additional lattice planes (dislocation) or interfaces between crystallites.



verknüpft mit einem nationalen Forschungsnetzwerk (NFN) zu nanokristallinen Massivmetallen, an dem neben dem Erich Schmid Institut auch die Universitäten Wien und Graz sowie die TU Wien beteiligt sind. Gemeinsam versucht man, dem Geheimnis dieser eigenartigen Materialien auf die Spur zu kommen. Dabei wird schnell klar, dass die bei der starken plastischen Verformung eingebrachten atomaren Defekte eine nicht unerhebliche Rolle spielen. Auf Grazer Seite sind an dieser Kooperation auch die Jungwissenschaftlerin Eva-Maria Steyskal im Rahmen ihrer Masterarbeit und der Jungwissenschaftler Bernd Oberdorfer im Rahmen seiner Dissertation beteiligt. Die Arbeit wird durch den Wissenschaftsfonds (FWF) unterstützt (P21009-N20).

Am Institut für Materialphysik wird weiterhin auch Grundlagenforschung an neuartigen, funktionellen und strukturellen Materialien wie nanoporösen Metallen mit durchstimmbaren elektrischen und magnetischen Eigenschaften im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen durchgeführt^{4,5}.

hanced mechanical properties of these materials. It is already obvious that the small atomic defects have a big impact on these properties. At Graz University of Technology, two young scientists are taking part in this collaboration: Eva-Maria Steyskal in the framework of her master's thesis and PhD candidate. Bernd Oberdorfer. This work is funded by the FWF (P21009-N20). At the Institute of Materials Physics basic research is also performed on novel functional and structural materials, such as nanoporous metals with tunable electrical and magnetic properties^{4,5}, in collaboration with national and international partners.



Roland Würschum ist Leiter des Instituts für Materialphysik. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Nanokristalline und nanoporöse Materialien sowie atomare Defekte.

Roland Würschum is head of the Institute of Materials Physics. His main area of research covers nanocrystalline and nanoporous materials as well as atomic defects.

¹ F. Ye, W. Sprengel, R.K. Wunderlich, H.-J. Fecht and H.-E. Schaefer: *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)* 104 (2007) 12962

² B. Oberdorfer, B. Lorenzoni, K. Unger, W. Sprengel, M. Zehetbauer, R. Pippan, R. Würschum, *Scripta materialia* 63 (2010) 452

³ B. Oberdorfer, E.-M. Steyskal, W. Sprengel, W. Puff, P. Pikart, C. Hugenschmidt, M. Zehetbauer, R. Pippan and R. Würschum, *Physical Review Letters* 105 (2010) 146101

⁴ M. Sagmeister, U. Brossmann, S. Landgraf and R. Würschum: *Physical Review Letters* 96 (2006) 156601

⁵ P. Wahl, T. Traußnig, S. Landgraf, H.-J. Jin, J. Weissmüller, and R. Würschum: *Journal of Applied Physics* 108 (2010) 073706