



Pressemeldung

Reale Materialien aus dem Computer

Physiker am Max-Planck-Institut für Eisenforschung können Eigenschaften von Werkstoffen und opto- und mikroelektronischen Halbleitermaterialien mit bisher unerreichbarer Genauigkeit vorhersagen

Punktdefekte wie zum Beispiel das Fehlen einzelner Atome bestimmen maßgeblich die Leistungs- und Widerstandsfähigkeit moderner Materialien. Dabei spielt die Anzahl der Defekte eine wichtige Rolle. Selbst geringste Defektkonzentrationen von 1:100.000 können maßgeblich die Widerstandsfähigkeit von mikroelektronischen Halbleitern, wie Prozessoren und Solarzellen, und Strukturmaterialien, wie Stahl, beeinflussen. Hierbei bestehen alle Materialien aus Atomen, die im Falle von sogenannten kristallinen Materialien, in Gittern angeordnet sind¹. Die einzelnen Atome sitzen jedoch nicht perfekt auf den Gitterplätzen, sondern vibrieren mit extrem hohen Geschwindigkeit um diese Plätze—Wissenschaftler sprechen daher von Gitterschwingungen.

Um Defekte in einem Material zu untersuchen und damit Rückschlüsse auf die Widerstandsfähigkeit zu ziehen, gab es bisher zwei Herangehensweisen. Theoretische Physiker berechneten die Energie der Gitterdefekte, eine Größe, die sehr genau zeigt wie viele Defekte im Material vorhanden sind; ihre Berechnungen funktionierten aber nur am sogenannten absoluten Nullpunkt, das heißt bei ca. -273°C (0 Kelvin). Experimentelle Physiker dahingegen konnten im Gegensatz zu ihren theoretischen Kollegen anhand von Experimenten Defekte ausschließ-

¹ Im Gegensatz zu kristallinen Materialien existieren zum Beispiel auch amorphe Materialien, deren Atome keine geordnete Struktur aufweisen.

17. März 2014

**Max-Planck-Institut
für Eisenforschung GmbH
Max-Planck-Straße 1
D-40237 Düsseldorf**

Referentin für

Presse- und Öffentlichkeitsarbeit

Yasmin Ahmed Salem, M.A.

Telefon +49 (0)211-6792-722

FAX +49 (0)211-6792-218

E-Mail y.ahmedsalem@mpie.de

Geschäftsführung

Prof. Dr. G. Dehm

Prof. Dr. J. Neugebauer

Prof. Dr. D. Raabe

Prof. Dr. M. Stratmann

Dr. K. de Weldige

Handelsregister B 2533

Amtsgericht Düsseldorf

USt-Id.-Nr.: DE 11 93 58 514

Steuernummer: 105 5891 1000

Deutsche Bank

IBAN DE10 7007 0010 0402 1077 00

BIC DEUTDEMM

Landesbank Hessen-Thüringen

Girozentrale

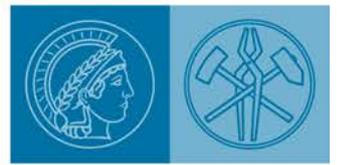
IBAN DE30 3005 0000 0003 1882 16

BIC WELADED3

Postbank Essen

IBAN DE65 3601 0043 0018 3104 32

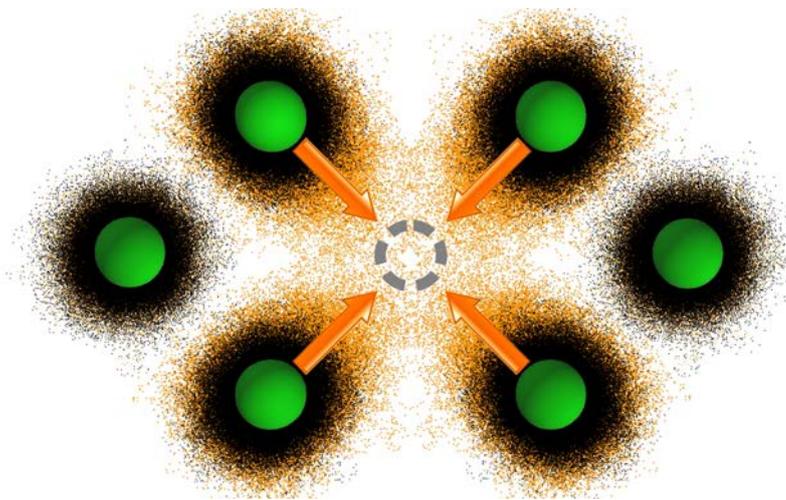
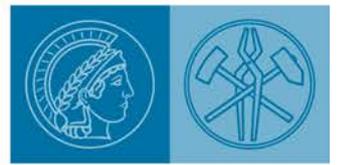
BIC PBNKDEFF



lich bei sehr hohen Temperaturen (327-727°C; 600-1000 Kelvin) messen. Es bestand also ein großes Temperaturintervall ohne jegliche Daten. Genau dieses fehlende Intervall ist aber wichtig bei der Berechnung von Defekten in Materialien, die bei Raumtemperatur angewendet werden.

Physikern in der Abteilung ‚Computergestütztes Materialdesign‘ am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE) ist nun der Durchbruch in der Computersimulation von Defekten in genau diesem, fehlenden Temperaturintervall gelungen. „Bisherige Berechnungen der Energien von Gitterdefekten konnten die komplexe Wechselwirkung von Gitterschwingungen nicht einbeziehen. Dank methodischer Durchbrüche gelang es uns, die Wechselwirkung der Gitterschwingungen und deren Temperaturabhängigkeit in unsere Berechnungen vollständig mitzunehmen und zu zeigen, dass diese maßgeblich die Anzahl der Defekte im Material beeinflusst“, so Albert Glensk, Doktorand am MPIE. „Alle bisherigen Ergebnisse über Defekte in kristallinen Materialien müssen nun korrigiert werden. Unsere Rechnungen zeigen, dass die bisher verwendeten Defektenergien um bis zu 20% niedriger ausfallen als angenommen. Zum ersten Mal wird nun die Lücke zwischen Theorie und Experiment überbrückt. Alle experimentellen Ergebnisse können nun auch theoretisch beschrieben werden“, so Glensk.

Mit dieser neuen Einsicht können Wissenschaftler nun viel genauer berechnen und vorhersagen, wie viele Defekte im Material vorhanden sind, um dadurch Aussagen über die Widerstandsfähigkeit des Materials zu treffen. Mit anderen Worten: es wird zukünftig besser möglich sein Werkstoffe auf dem Computer zu optimieren und Materialversagen vorzusehen und dadurch besser in Produktionsabläufe einzuplanen.



Das Bild zeigt die atomare Verteilung in einem Kupfer-Kristall. Die grünen Bälle zeigen die Positionen der Atome am absoluten Nullpunkt. Der grau-gestrichelte Kreis in der Mitte ist eine sogenannte Leerstelle, eine Stelle bei der ein Atom in der Gitterstruktur fehlt. Bei höheren Temperaturen vibrieren die Atome aufgrund von Gitterschwingungen um ihre Position am absoluten Nullpunkt. Dies wird durch die schwarze Wolke angedeutet, die die Verteilung der Atome bei der Schmelztemperatur von Kupfer (1084 °C) zeigt.

Die Erkenntnisse der Max-Planck-Wissenschaftler über die Wechselwirkung zwischen den Gitterschwingungen und deren Temperaturabhängigkeit, zeigen nun eine deutlich andere Verteilung (orangene Wolken) auf. Bei steigender Temperatur vibrieren die Atome immer näher an der Leerstelle. Dies führt zu signifikanten Änderungen der Energie und Anzahl von Leerstellen und somit zu einer höheren Defektkonzentration und damit verbundener Materialversagen.

Originalveröffentlichung:

A. Glensk; B. Grabowski; T. Hickel; J. Neugebauer: *Breakdown of the Arrhenius Law in Describing Vacancy Formation Energies: The Importance of Local Anharmonicity Revealed by Ab initio Thermodynamics*. Physical Review X 4 (2014) 011018. American Physical Society.
DOI: 10.1103/PhysRevX.4.011018

Am MPIE wird moderne Materialforschung auf dem Gebiet von Eisen, Stahl und verwandten Werkstoffen betrieben. Ein Ziel der Untersuchungen ist ein verbessertes Verständnis der komplexen physikalischen Prozesse und chemischen Reaktionen dieser Werkstoffe. Außerdem werden neue Hochleistungswerkstoffe mit ausgezeichneten physikalischen und mechanischen Eigenschaften für den Einsatz als high-tech Struktur- und Funktionsbauteile entwickelt. Auf diese Weise verbinden sich erkenntnisorientierte Grundlagenforschung mit innovativen, anwendungsrelevanten Entwicklungen und Prozesstechnologien. Das MPIE wird zu gleichen Teilen von der Max-Planck-Gesellschaft und dem Stahlinstitut VDEh finanziert.