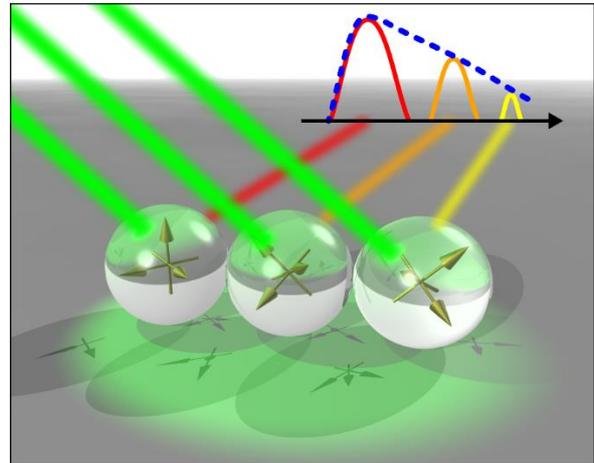


IC-MPPE
Integrated Computational
Materials Process and Product
Engineering.

Programm: COMET – Competence
Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekttyp: Origin of relaxor
behaviour in Ba-based lead-free
perovskites (FWF Project 29563-
N36), 2017-2021



Das Raman-Spektrum einer Keramik setzt sich aus den Spektren der individuellen Körner zusammen. Bild: MCL

EINE ERHELLENDE METHODE FÜR ELEKTROKERAMIKEN

EINE NEUE THEORETISCHE METHODE HILFT, TIEFERE ERKENNTNISSE AUS RAMAN-MESSUNGEN VON KERAMIKEN FÜR ENERGIESPEICHER ZU GEWINNEN.

Wenn man an Keramik denkt, kommen einem oft als erstes Töpferwaren, feines Porzellan, Dach- und Bodenfliesen und sogar Ziegelsteine in den Sinn. Keramische Werkstoffe werden jedoch auch in allen Arten von elektronischen Geräten verwendet, die uns umgeben. Keramik wird vor allem in Kondensatoren verwendet, einem der Grundbausteine elektrischer Schaltkreise, deren Aufgabe es ist, Ladung und letztlich Energie zu speichern.

Es werden laufend Anstrengungen unternommen, die keramischen Materialien für die Energiespeicherung zu verbessern, um die Grenzen ihrer Leistungsfähigkeit zu erweitern und sie umweltfreundlicher zu machen, z. B. durch die Suche nach neuen Zusammensetzungen, die kein Blei enthalten. Hier ist ein tiefes Verständnis der Chemie und der Struktur bis hinunter auf die atomare Ebene von

entscheidender Bedeutung. Dieses Wissen lässt sich mit Hilfe der Raman-Spektroskopie in Verbindung mit theoretischen Methoden zur Vorhersage von Raman-Spektren gewinnen. Bei diesem Ansatz wird die untersuchte Keramik mit Laserlicht bestrahlt und das gestreute Licht analysiert. Letzteres enthält eindeutige Informationen über die chemische Zusammensetzung und die Art und Weise, wie die Atome aneinander gebunden sind.

Strukturelle Eigenschaften wie Phasen, atomare Defekte und Eigenspannungen hinterlassen im Raman-Spektrum ihre "Fingerabdrücke" in Form von speziellen spektralen Merkmalen. Die eindeutige Zuordnung eines gemessenen Merkmals zu einer bestimmten Struktureigenschaft ist jedoch sehr anspruchsvoll. Hier kann die Berechnung von Raman-

SUCCESS STORY

Spektren mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT) einen unschätzbaren Beitrag leisten.

Bislang wurde dieser Ansatz hauptsächlich für die Vorhersage von Spektren für Einkristalle entwickelt. Keramische Materialien bestehen jedoch aus kleinen Kristalliten, so dass ein Mittelungsverfahren erforderlich ist, um die Spektren angemessen vorherzusagen. Der bisher verwendete Standardansatz berücksichtigte außerdem nicht die wichtigen Merkmale polarer Materialien, die für die Elektrokeramik von großer Bedeutung sind. Daher wurde am Materials Center Leoben (MCL) eine neue Methode namens "Spherical Averaging Method" entwickelt.

Diese Methode hat die Vorhersagekraft der theoretischen Raman-Spektroskopie erheblich verbessert, insbesondere wenn sie auf polare ferroelektrische Keramiken wie Bariumtitanat (BaTiO_3) angewendet wird. Abb. 1 zeigt ein Beispiel für den Nachweis atomarer Defekte in BaTiO_3 mit unserer Methode. Wenn dieses Material mit Niob (Nb) dotiert ist, ändern sich die gemessenen Spektren. Die mit unserer neuen Methode vorhergesagten Raman-Spektren ermöglichen eine eindeutige Identifizierung des atomaren Ursprungs dieser Veränderungen: Sie stammen von Ti-Leerstellen, die durch die Nb-Dotierung entstehen.

Projektkoordination (Story)

Marco Deluca, Priv.-Doz. Dr.
Deputy Group Leader Sensor Solutions
Materials Center Leoben Forschung GmbH
T +43 (0) 3842 45922-0
marco.deluca@mcl.at

Projektpartner

- CNR-ICMATE, Italien

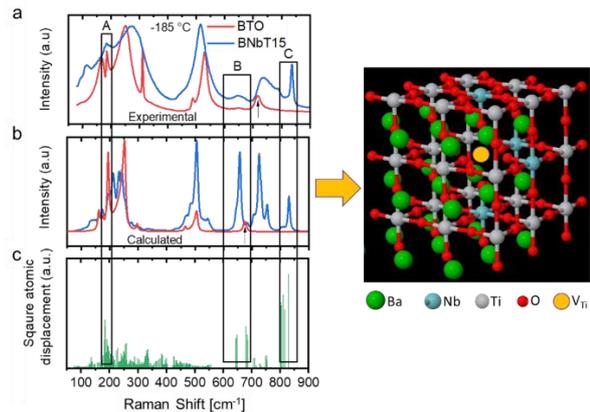


Abb. 1. Identifizierung eines atomaren Defekts in reinem und Nb-dotiertem BaTiO_3 durch Kombination von Raman-Messungen mit DFT-Vorhersagen. <https://doi.org/10.1002/aelm.20210081>

Wirkungen und Effekte

Die am MCL entwickelte Methode erweitert die Möglichkeiten der theoretischen Raman-Spektroskopie keramischer Materialien. Sie ermöglicht es, komplexen Spektralmerkmale, z. B. die Peak-Asymmetrie, zu entschlüsseln und setzt die gemessenen Merkmale eindeutig mit den strukturellen Eigenschaften in Beziehung. Darüber hinaus wurde eine Computersoftware - der Spherical Raman Evaluator (SpheRaE) - entwickelt, um die Anwendung der Methode zu erleichtern und den Modellierungsablauf zu automatisieren.

IC-MPPE / COMET-Zentrum

Materials Center Leoben Forschung GmbH
Roseggerstrasse 12
8700 Leoben
T +43 (0) 3842 45922-0
mclburo@mcl.at / www.mcl.at

- Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Tschechien

Diese Success Story wurde von der Zentrumsleitung und den genannten Projektpartnern zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMAW, und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt. Weitere Informationen zu COMET: www.ffg.at/comet