

Zwischenbericht (Sachbericht)

Förderinstrument:	Sondermaßnahmen
Impulsfonds-Förderkennzeichen	IK-Ch-002
Projekttitel	Investigation of Metallic Glasses under Stress by Synchrotron Radiation Techniques
Federführende/r Wissenschaftler/in	Dr. H. Franz
Helmholtz-Zentrum	Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY
Berichtszeitraum (=Kalenderjahr)	01/2012-12/2012

Hinweis:

Sondermaßnahmen sind Einzelförderungen außerhalb von Ausschreibungen zur Sicherung herausragender Exzellenz. Ziele, Arbeitsprogramm, Finanzplan etc. sind individuell im jeweiligen Antrag beschrieben. Dieses Muster ist nicht für alle Projekte ideal. Bitte machen Sie nach Möglichkeit Angaben zu allen nachfolgenden Punkten; wo dies nicht möglich ist, geben Sie es bitte explizit an.

<p>1) Fortschritt des im Antrag beschriebenen Arbeitsprogramms <i>Berichten Sie kurz und allgemeinverständlich über die wesentlichen Ergebnisse. Waren Abweichungen vom Arbeitsprogramm notwendig?</i></p>
<p>Siehe Anhang</p>
<p>2) Meilensteine <i>Welche wichtigen Meilensteine konnten im Berichtsjahr erreicht werden?</i></p>
<p>Alle im Projektantrag aufgeführten Ziele wurden erreicht.</p>
<p>3) Finanz-/Zeitplan <i>Können Sie Finanz- und Zeitplan einhalten oder sind Anpassungen notwendig?</i></p>
<p>Der Finanzplan wurde im Wesentlichen eingehalten, einige Mittel mussten von 2011 auf 2012 übertragen werden da eine Doktorandenstelle nicht rechtzeitig besetzt werden konnte. Der Zeitplan ist eingehalten.</p>
<p>4) Strategischer Mehrwert <i>Welchen strategischen Mehrwert für die Helmholtz-Gemeinschaft hat das Vorhaben bisher erreicht oder inwieweit ist er absehbar?</i></p>
<p>Durch das Forschungsprojekt wird die Zusammenarbeit mit der Volksrepublik China, einem der strategische Partner der Helmholtz Gemeinschaft, gestärkt. Durch den regelmäßigen Austausch werden Beziehungen zu den Kollegen und der Zhejiang Universität gepflegt, aber auch Kontakte zu anderen Universitäten z.B. in Nanjing oder Harbin geknüpft. Längerfristige Besuche chinesischer Kollegen am DESY tragen zur erfolgreichen Durchführung von Forschungsprojekten bei. Das wird auch durch eine Anzahl von gemeinsamen Publikationen und die erfolgreiche Zwischenbegutachtung dokumentiert. Durch das gemeinsame Projekt haben wir Zugang zu den Präparationslabors an der Universität Zhejiang, und können deren Expertise in der Entwicklung von massiven metallischen Gläsern nutzen. Langfristig trägt diese</p>

Kollaboration mit chinesischen Wissenschaftlern zu einer Intensivierung der wissenschaftlichen Zusammenarbeit bei, die vor allem im Hinblick auf die Beteiligung Chinas am Europäischen XFEL von großer strategischer Bedeutung ist.
5) Nachhaltigkeit <i>Inwieweit ist Nachhaltigkeit des Vorhabens bereits abzusehen oder eine Weiterführung nach Auslaufen der Förderung geplant?</i>
Eine Weiterführung des Projektes wird derzeit diskutiert. Unabhängig davon wird es auf informeller Basis eine wissenschaftliche Zusammenarbeit auch in Zukunft geben.
6) Drittmittel <i>Wurden Drittmittel eingeworben? Wenn ja, von wem und in welcher Höhe?</i>
...
7) Patentanmeldungen <i>Wurden Patente angemeldet bzw. erteilter? Ggf. wie viele?</i>
...
8) Publikationen <i>Im Zwischenbericht bitte nur die wichtigsten bzw. Anzahl aufführen (peer reviewed, andere)</i>
Siehe Anhang

Activity report for IK-Ch-002 2011

Much effort has been put into the study of plastic deformation mechanisms of metallic glasses (MGs), attempting to elucidate the origin of their high fracture strength. Yet little attention is paid to the elastic deformation of MGs. Our results reveal that an atomic reorientation happens in the first nearest-neighbor shell due to the elastic deformation. This reorientation subsequently leads to a drop in the local stress, which further results in a cooperative shift of surrounding atoms to counterbalance this change in the local stress level. A concordant region is formed as a result. The relation between this concordant region and the yield strength is thoroughly discussed in terms of its size and the stress level in this region. It is proposed that this concordant region could be the missing part that bridges the macroscopic yield strength and the microscopic atomic structure.

In situ tensile deformation tests provided detailed information about the mechanical properties of the $\text{Fe}_{72.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_2\text{Mo}_2\text{Si}_{15.5}\text{B}_7$ metallic glass. Analyzing series of two-dimensional XRD patterns in reciprocal space yielded strain tensor components of the amorphous alloy providing insight about its deformation mechanisms. Comparing tensile tests performed at different temperatures indicates that the deformation mechanism gradually changes from purely elastic to completely plastic regime. The Poisson ratio of the investigated alloy

increases with increasing deformation temperature, however the fracture strength shows opposite behavior.

The deformation behavior of $\text{Cu}_{45}\text{Zr}_{46.5}\text{Al}_7\text{Ti}_{1.5}$ bulk metallic glass (BMG) under bending was investigated in-situ using high-energy X-ray synchrotron diffraction. Samples were bent using two different benders with radii of 10 and 20 mm. The components of the strain tensor were determined from the change of positions of the first maximum of the diffracted intensity in reciprocal space. The procedure of data treatment was improved by the introduction of direct beam off-center correction. Comparing results for the two different bending radii, we found that the zero stress region does not necessarily lay within the central part of the specimen. Bending with smaller radius resulted in symmetric strain distribution, whereas a larger bending radius revealed strong asymmetry. Furthermore, bending with a smaller radius (10 mm) shows steeper strain gradients as compared with the situation in which the larger bending radius (20 mm) was used. Using a smaller bending radius implies reaching higher tensile/compressive stresses and reveals the signs of the plastic deformation, which are demonstrated as a saturation of elastic strains.

Constant-rate heating experiments using a fast X-ray camera (time resolution of 2.7 s) revealed detailed information about the thermal stability of $\text{La}_{62}\text{Al}_{14}(\text{Cu}_{5.6}\text{Ag}_{1.6})_{14}\text{Ni}_5\text{Co}_5$ (at.%) bulk metallic glass. Analyzing diffraction patterns in reciprocal space yields the thermal expansion of the amorphous alloy providing insight into the thermally activated relaxation effects and kinetics of the glass transition. The glass transition appears as a break in the value of the coefficient of volume thermal expansion. Furthermore, real space analysis based on the reduced pair distribution function $G(r)$ allows one to follow *in situ* the changes in the local atomic structure of the amorphous material during constant-rate heating.

The critical size of bulk metallic glasses is always the bottleneck in their use as structural material. In 2011, ZU successfully developed a new Zr-based alloy which can be cast into amorphous rods of 73 mm diameter by copper mould casting. This finding is linked with our understanding of the atomic structure of those metallic glasses. The high glass forming ability of this alloy is closely related to Be addition, which not only suppresses the phase separation happening in the as-cast Be-free BMG but also sustains the low Gibbs free energy difference for crystallization. This finding will stimulate more interest in developing BMGs and their industrial applications. Furthermore, we successfully fabricate an intrinsic plastic BMG (also Zr-based) with excellent bending and compressive properties in contrast to the poor plasticity that is usually observed in bulk metallic glasses. We suggest that the superior compressive and bending plastic strain can be attributed to a large amount of randomly distributed free volume. The mechanical, corrosion and thermal expansion properties, as well as elastic constants for the newly developed BMG have been investigated in detail.

PUBLICATIONS in 2011

1. X. Wang, Q.P. Cao, Y.M. Chen, K. Hono, C. Zhong, Q.K. Jiang, X.P. Nie, L.Y. Chen, X.D. Wang, J.Z. Jiang, *A plastic Zr-based bulk metallic glass*, *Acta Mater.* **59**, 1037 (2011)
 2. X.D. Wang, Q. P. Cao, J.Z. Jiang, H. Franz, J. Schroers, R.Z. Valiev, Y. Ivanisenko, H. Gleiter, H.-J. Fecht, *Atomic level structural modifications induced by severe plastic shear deformation in bulk metallic glasses*, *Scripta Mater.* **64**, 81 (2011)
 3. H.B. Lou, X.D. Wang, F. Xu, S.Q. Ding, Q.P. Cao, K. Hono, J.Z. Jiang, *73 mm-diameter Bulk Metallic Glass Rod by Copper Mould Casting*, *Appl.Phys.Lett.* **99**, 051910 (2011)
 4. J. Bednarcik, M. Sikorski, C. Curfs, X.D. Wang, J.Z. Jiang, H. Franz, *Thermal expansion of a La-based bulk metallic glass: insight from in-situ high-energy X-ray diffraction*, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 254204 (2011)
 5. J. Bednarcik, S. Michalik, H. Franz, *In situ tensile deformation of Fe-rich metallic glass at elevated temperatures using hard X-ray diffraction*, *J. Alloys and Compounds* **509**, S92 (2011)
 6. M. Stoica, V. Kolesar, J. Bednarcik, S. Roth, H. Franz, J. Eckert, *Thermal stability and magnetic properties of partially Co-substituted $(\text{Fe}_{71.2}\text{B}_{24}\text{Y}_{4.8})_{96}\text{Nb}_4$ bulk metallic glasses*, *J.Appl.Phys.* **109**, 054901 (2011)
 7. S. Michalik, J. Gamcova, J. Bednarcik, R. Varga, *In situ structural investigation of amorphous and nanocrystalline $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{38}\text{Mo}_4\text{B}_{18}$ microwires*, *J. Alloys and Compounds* **509**, 3409 (2011)
 8. C. Hostert, D. Music, J. Bednarcik, J. Keckes, V. Kapaklis, B. Hjörvarsson, J. M. Schneider, *Ab initio molecular dynamics model for density, elastic properties and short range order of Co-Fe-Ta-B metallic glass thin films*, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 475401 (2011)
-

Conferences and workshops in 2011

In 2011 Zhejiang University organized the “Second International Conference on Mechanical Properties of Materials ICMPM” in Hangzhou with participation of members of the project.

Talks on conferences in 2011

J. Bednarcik, Soft Magnetic Amorphous Alloys in Synchrotron Light
PNI-Workshop Magnetism, Berlin, Germany (01/17/2011-01/18/2011)

J. Bednarcik, BMGs in Synchrotron Light: insights from in-situ experiments
Department of Materials Science and Engineering, Shanghai University,
Shanghai, China (05/01/2011-05/04/2011)

J. Bednarcik, High-energy X-ray diffraction: Introduction
Harbin Institute of Technology, Harbin, China (05/07/2011)

J. Bednarcik, *Structure of metallic glasses: Insights from Hard X-ray Diffraction*,

Harbin Institute of Technology, Harbin, China (05/10/2011)

J. Bednarcik, *Thermal and mechanical stability of BMGs*

Harbin Institute of Technology, Harbin, China (05/13/2011)

I. Kaban, P. Jóvári, M. Stoica, **J. Bednarcik**, B. Beuneu, N. Mattern, J. Eckert, *Structural study of Fe-Nb-B metallic glasses by XRD, ND, EXAFS and RMC*
Euromat 2011, Montpellier, France (09/12/2011-09/15/2011)

J. Bednarcik, *Synchrotron radiation, its production and use in studying of the atomic structure of matter*, Week of science and Technology in Slovakia 2011, Ruzomberok, Slovakia (10/04/2011)

J. Bednarcik, *Mechanical and thermal stability of metallic glasses: Insights from in-situ high-energy X-ray diffraction*, Swiss Light Source, PSI, Villigen, Switzerland (10/06/2011)

J.Z. Jiang, *Unusual behaviors in Ce-bearing metallic glasses*

HASYLAB seminar (08/18/2011)

H. Franz, *Synchrotron Radiation Investigations of Advanced Materials*

ICMPM2011, Hangzhou, China
(06/12/2011-06/14/2011)