

MM 6: Diffusion I

Time: Monday 10:15–11:30

Location: H 0111

MM 6.1 Mon 10:15 H 0111

Fast ionic mobility in cryolite studied by quasielastic neutron scattering — ●SANDRO JAHN¹, JACQUES OLLIVIER², and FRANZ DEMMEL³ — ¹GeoForschungsZentrum Potsdam, Telegrafenberg, 14473 Potsdam — ²Institut Laue-Langevin, BP 156, 38042 Grenoble Cedex 9, France — ³ISIS Facility, Chilton, OX11 0QX, UK

The relation between ionic mobility and conductivity at high temperature of the perovskite fluoride cryolite, Na_3AlF_6 , is studied by quasielastic neutron scattering (QENS). Up to $T = 880$ °C the conductivity is dominated by jump diffusion of Na ions. At higher temperatures, a considerable broadening of the QENS spectra and the development of a liquid-like diffraction peak is observed. In the temperature range between $T = 880$ °C and the melting point ($T_m = 1013$ °C), the presence of about one percent of partial melt, that is expected from the phase diagram, causes a high mobility of almost all F ions of the system. The Q -dependence of the line width suggests a set-in of translational diffusion of fluorines at this temperature. This additional degree of translational movements could reason the jump-like increase in the ionic conductivity observed macroscopically.

MM 6.2 Mon 10:30 H 0111

Atomistic simulation of grazing incidence diffuse x-ray scattering from point defects — ●RUSLAN KURTA, VLADIMIR BUGAEV, MELISSA DELHEUSY, ANDREAS STIERLE, and HELMUT DOSCH — Max-Planck-Institut für Metallforschung, Heisenbergstr.3, D-70569 Stuttgart, Germany

The investigation of defects in the vicinity of surfaces and interfaces is a current challenge, because such defects control important phenomena in the subsurface region, such as chemical reactions, ion conduction, performance of superconducting cavities. The challenge here is to understand microscopically the coupling of the defect-induced strain field to the interfaces. The goal of our project is the x-ray study and theoretical modeling of the strain field of point defects close to interfaces. Here, in particular, we present the results of an investigation of dissolved interstitial oxygen in the subsurface region of Nb (110), which plays a key role in the performance of high frequency cavities. The x-ray data were obtained from the diffuse x-ray scattering experiments under glancing-angle conditions. We use a semi-phenomenological Kanzaki-Krivoglaz approach to calculate the strain field around the point defect. For modeling of the diffuse x-ray scattering distribution in the vicinity of a surface we use a fully atomistic real-space “large-sphere” method. This allows one to obtain quantitative information about the defect distribution close to a surface. On the basis of the depth-resolved x-ray data we determined the subsurface concentration profile of the dissolved oxygen.

MM 6.3 Mon 10:45 H 0111

Frühe Ausscheidungsstadien in Al-Cu-Mg-Legierungen – EXAFS/XANES Messungen an der Cu k-Kante — ●TORSTEN E.M. STAAB¹, BENEDIKT KLOBES¹ und ESTHER DUDZIK² — ¹Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik, Universität Bonn, D-53115 Bonn, Germany — ²Hahn-Meitner-Institut Berlin/Bessy, Albert-Einstein-Str. 15, D-12489 Berlin, Germany

Größe und Verteilung nanoskaliger Cluster — sogenannter Guinier-Preston- (GP) oder Guinier-Preston-Bagaryatsky-Zonen (GPB) — bestimmen die Festigkeit von Aluminiumlegierungen. Diese Cluster behindern die Bewegung von Versetzungen. Al-Legierungen für den Flugzeugbau (AA2024) enthalten Kupfer und Magnesium als Hauptlegie-

rungsbestandteile. EXAFS/XANES-Messungen an der Cu k-Kante zeigen, dass sich die atomare Umgebung der Cu-Atome schon während der ersten Stunden bei Raumtemperatur-Lagerung ändert. Durch den Vergleich mit ab-initio Rechnungen können wir die Änderungen der Spektren der Bildung von Cu-Mg-Clustern (GPB-Zonen) zuordnen. Während des weiteren Alterungsprozesses der Legierung ändert sich die chemische Zusammensetzung und die Gitterstruktur der Ausscheidungen hin zur stabilen S-Phase (Al_2CuMg), was sich in der lokalen atomaren Umgebung des Legierungselementes Kupfer widerspiegelt.

MM 6.4 Mon 11:00 H 0111

Frühstadien der Ausscheidungsbildung in Al-Mg-Cu-Legierungen - Simulationsrechnungen zu Positronenannihilationssignalen — ●BJÖRN KORFF und TORSTEN STAAB — Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Nußallee 14-16, D-53115 Bonn, Germany

Nach Abschrecken lösungsgeglühter Al-Mg-Cu-Legierungen (AA 2024) bilden sich schon bei Raumtemperatur Ausscheidungen. Diese Agglomerate weniger Atome werden als Frühstadien bezeichnet. Sie erreichen nach einer Auslagerung von fünf Tagen bei Raumtemperatur eine Größe von 1-2 nm und sind für die Härte des Materials verantwortlich. Die Struktur dieser frühen Ausscheidungen ist im Gegensatz zur Gleichgewichtsphase, die erst bei höheren Temperaturen erreicht wird, noch nicht endgültig geklärt.

Zur Untersuchung der Ausscheidungsbildung wurden in Simulationsrechnungen die Positronenannihilationsparameter für verschiedenen Atomkonfigurationen berechnet. Ein Vergleich mit Positronenmessung an den Legierungen gibt dann Hinweise über die Struktur der Ausscheidung. Die Atomkoordinaten der getesteten Strukturen wurden mit Hilfe des ab-initio Codes SIESTA relaxiert. Die Methode der Positronenannihilation ist besonders empfindlich für Leerstellen, in denen die Positronen stark lokalisiert werden. So erhält man Informationen über den Entstehungsprozess der Ausscheidungen, da die Diffusion der Fremdatome bei Raumtemperatur über eingeschreckte Leerstellen vermittelt wird.

MM 6.5 Mon 11:15 H 0111

Early stages of precipitation in AlMgSi alloys: an investigation by positron annihilation — ●BENEDIKT KLOBES, TORSTEN E. M. STAAB, MATZ HAAKS, and KARL MAIER — Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik, Nußallee 14-16, D-53115 Bonn

Aluminium alloys on the basis of AlMgSi, the so-called 6000 series, are commonly used in a wide range of industrial applications due to their good mechanical properties as well as their weldability. These properties are induced by the precipitation of nanoscaled agglomerates of Mg and Si atoms which are formed during specific heat treatments. Although these alloys have been the object of intense investigations, it has been impossible to reveal the atomic structures of these precipitates up to now. Thus, the understanding of the precipitation sequence remains incomplete. Measuring the positron lifetime and the Doppler broadening of the annihilation radiation directly after solution heat treatment and quenching we recently observed a significant change of the mean positron lifetime as well as the momentum distribution during subsequent storage at room temperature. The first stages of precipitation could be investigated in both high purity alloys and a commercial alloy AA6013 this way. With these results we hope to throw a little light on the controversially discussed precipitation sequence of AlMgSi alloys.