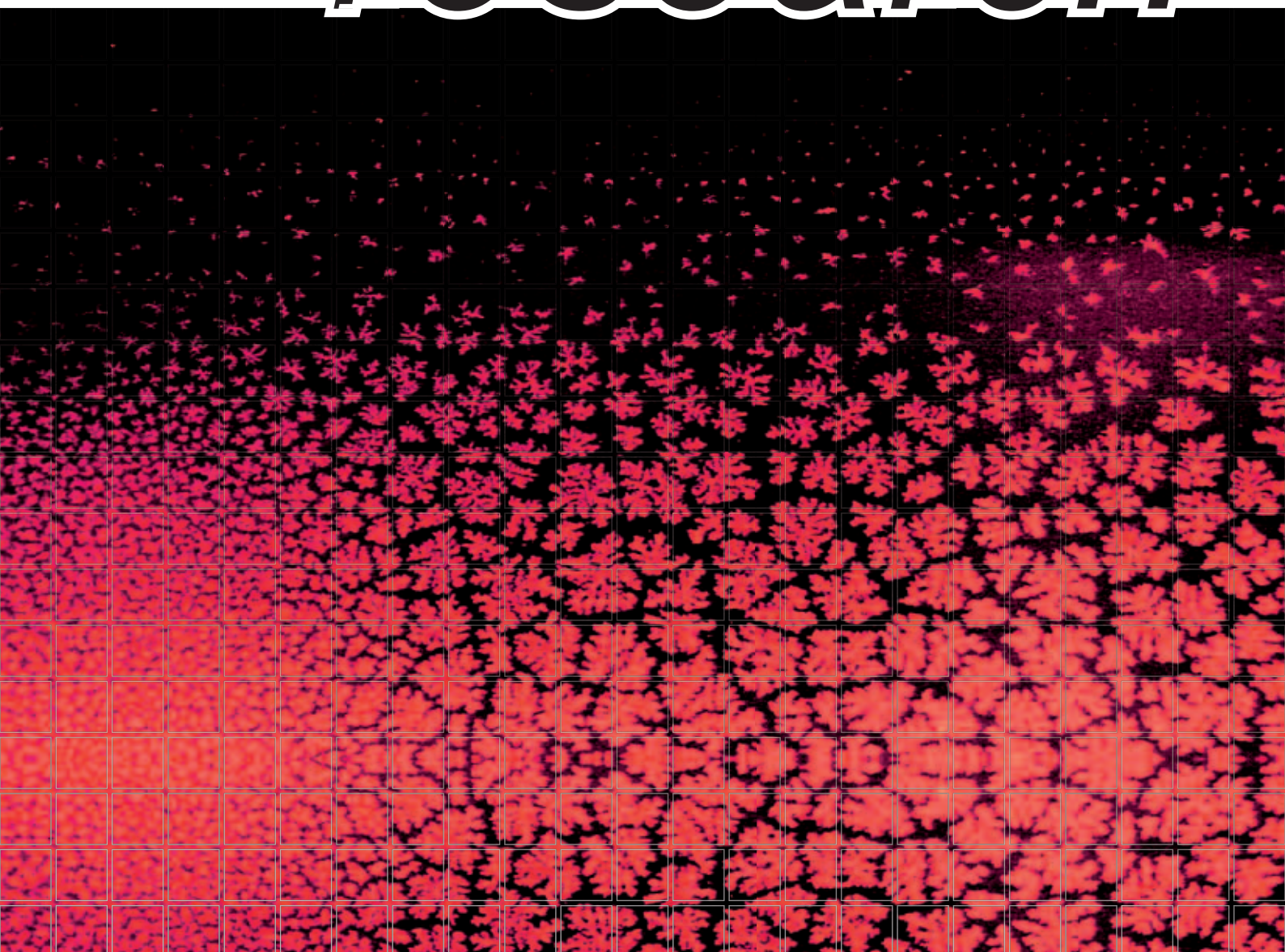


# ***TU GRAZ** research*



Smarte Werkstoffe –

Advanced Materials Science an der TU Graz

Smart Materials –

Advanced Materials Science at Graz University of Technology

# Contents

<b>Preface</b>	p. 4
----------------	------

## ■ Face to Face

*We ask well-known experts for a statement on our current topic of focus*

Through Knowledge to Innovation	p. 6
An interview with Georg Kügerl, Executive Vice President of EPCOS OHG and Chief Technology Officer of the Piezo and Protection Devices Business Group of the TDK Group	
Ines Hopfer-Pfister	

## ■ Focus: Advanced Materials Science

*Scientists present selected projects and research areas in the framework of the Field of Expertise Advanced Materials Science*

Understanding Organic Semiconductors: From the Quantum-Level to Macroscopic Devices	p. 10
Karin Zojer, Egbert Zojer	
Electrochemical Energy Storage Beyond the Horizon	p. 13
Stefan Freunberger	
Functional Nanostructures via Focused Electron Beams	p. 16
Harald Plank	
The NanoTecCenter Weiz Forschungsgesellschaft mbH – Nanotechnology, Printed Electronics, Rapid Prototyping, Smart System Integration and Sensor Technology	p. 19
Emil J. W. List-Kratochvil, Andreas Klug	
The JOIN4+ Network of Excellence for Joining Technologies	p. 22
Norbert Enzinger, Christof Sommitsch	
Chemical Vapor Deposition for Technological Applications	p. 25
Anna Maria Coclite	

## ■ Life

*Research and technology in everyday life: how results of research affect our lives and can improve them*

Improving the Biocompatibility of Medical Implants using Electron-Beam Surface Treatment	p. 28
Johannes Tändl, Fernando Warchomicka, Coline Béal, Tarun Goswami, Christof Sommitsch	

## ■ Cooperations

*Conducting research and development together: how interdisciplinary cooperation between experts leads to success and further development*

In Union, there is Strength	p. 32
Cecilia Poletti, Christof Sommitsch	

## ■ Innovation in Teaching & Research

*What's new in teaching and research: how Graz University of Technology is proving and distinguishing itself as a hotbed of ideas*

Top Electron Microscope at Graz University of Technology	p. 36
Ferdinand Hofer, Gerald Kothleitner, Werner Grogger	

<b>Imprint</b>	p. 40
----------------	-------

TU Graz research



# Inhalt

<b>Vorwort</b>	S. 4
<hr/>	
<b>■ Face to Face</b> <i>Wir bitten namhafte Expertinnen und Experten um ein Statement zum Schwerpunktthema</i>	
Mit Wissen zur Innovation Ein Interview mit Georg Kügerl, Mitglied der Geschäftsleitung der EPCOS OHG und Chief Technology Officer der Piezo and Protection Devices Business Group des TDK Konzerns <i>Ines Hopfer-Pfister</i>	S. 6
<hr/>	
<b>■ Fokus: Advanced Materials Science</b> <i>Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler präsentieren ausgewählte Projekte und Forschungsbereiche im Rahmen des Field of Expertise „Advanced Materials Science“</i>	
Organische Halbleiter verstehen: von der Quantenwelt zu makroskopischen Bauelementen <i>Karin Zojer, Egbert Zojer</i>	S. 10
Elektrochemische Energiespeicherung von morgen <i>Stefan Freunberger</i>	S. 13
Funktionelle Nanostrukturen mittels fokussierter Elektronenstrahlen <i>Harald Plank</i>	S. 16
Die NanoTecCenter Weiz Forschungsgesellschaft mbH – Nanotechnologie, gedruckte Elektronik, Rapid Prototyping, Smart System Integration und Sensorik <i>Emil J. W. List-Kratochvil, Andreas Klug</i>	S. 19
Das Kompetenznetzwerk für Fügetechnik JOIN4+ <i>Norbert Enzinger, Christof Sommitsch</i>	S. 22
Chemische Gasphasenabscheidung für technologische Anwendungen <i>Anna Maria Coclite</i>	S. 25
<hr/>	
<b>■ Life</b> <i>Forschung und Technik im Alltäglichen – Wie Forschungsergebnisse auf unser Leben wirken und es verbessern können</i>	
Verbesserung der Biokompatibilität von medizinischen Implantaten durch Elektronenstrahl-Oberflächenbehandlung <i>Johannes Tändl, Fernando Warchomicka, Coline Béal, Tarun Goswami, Christof Sommitsch</i>	S. 28
<hr/>	
<b>■ Cooperations</b> <i>Gemeinsam forschen und entwickeln – Wie spezialisierte interdisziplinäre Zusammenarbeit in Erfolg und Weiterentwicklung resultiert</i>	
In der Einheit liegt die Stärke <i>Cecilia Poletti, Christof Sommitsch</i>	S. 32
<hr/>	
<b>■ Innovation in Teaching &amp; Research</b> <i>Neues aus dem Bereich Lehre und Forschung – Wie sich die TU Graz als erfolgreiche „Ideenschmiede“ bewährt und auszeichnet</i>	
Elektronenmikroskop der Superlative an der TU Graz <i>Ferdinand Hofer, Gerald Kothleitner, Werner Grogger</i>	S. 36
<hr/>	
<b>Impressum</b>	S. 40

Liebe Kolleginnen und Kollegen,  
sehr geehrte Forschungspartnerinnen und  
-partner und an unserer Forschung Interessierte!  
Dear colleagues, research partners and those  
interested in our research,



*Horst Bischof,  
Vizerektor für Forschung.*

*Horst Bischof,  
Vice Rector for Research.*

Vorab möchte ich an dieser Stelle Thomas Pock gratulieren, der es geschafft hat, seit 12 Jahren wieder einmal einen START-Preis an die TU Graz zu holen! Der START-Preis ist ein vom FWF ausgelobter Preis für Jungwissenschaftlerinnen und -wissenschaftler und ist mit bis zu 1,2 Millionen Euro dotiert. Thomas Pock erhält den Preis für das Projekt „Bilevel Learning for Computer Vision“, das an der Schnittstelle zwischen Computer Vision und maschinellem Lernen und Optimierungsverfahren angesetzt ist.

Diese Ausgabe von TU Graz *research* ist dem Field of Expertise (FoE) „Advanced Materials Science“ gewidmet. Materialien sind die Grundlage jedes technischen Fortschritts und reichen von der Elektronik bis hin zum Maschinenbau. Es ist daher nicht weiter verwunderlich, dass dies ein äußerst kompetitives Forschungsthema ist. Es freut mich ganz besonders, dass die TU Graz im internationalen Vergleich ganz vorne mitspielen kann. Dieses Heft zeigt einige Highlights, die wir in diesem Bereich zu bieten haben. Zum Beispiel gelten organische Halbleiter als die Zukunft im Bereich der Photovoltaik oder im Bereich der Displays, wo OLEDs im Mobiltelefonbereich schon recht weitverbreitet sind. Allerdings ist hier noch sehr viel an Grundlagenforschung zu leisten. Ein anderes Beispiel finden wir im Bereich der Batterieforschung. Im Bereich Elektrochemie hat die TU Graz eine langjährige Tradition und gerade jetzt erfährt die Batterieforschung wieder einen erheblichen Auftrieb. Im CD-Labor von Martin Wilkening wird unter anderem an neuen Materialien für Batterien geforscht. Im Batteriebereich sind wir dabei, einen Schwerpunkt in der Forschung in Graz zu setzen. So ist unter anderem ein neues COMET K1-Zentrum, ein Forschungs- und Testzentrum für mechanische Batterietests und ein Research-Studio geplant. Sollten wir dies alles wie geplant realisieren können, dann haben wir hier ein Zentrum, das weit über die Grenzen von Österreich sichtbar ist.

First of all, I'd like to take this opportunity to congratulate Thomas Pock, who has managed to pick up a START award for Graz University of Technology for the second time in 12 years. The START prize is an award for young scientists sponsored by FWF to the tune of 1.2m euros. Thomas Pock was awarded the prize for the project Bilevel Learning in Computer Vision, which is situated at the interface of computer vision, machine learning and optimization methods.

This issue of TU Graz *research* is dedicated to the Field of Expertise (FoE) Advanced Materials Science. Materials are the basis of all technological progress and range from electronics to mechanical engineering. It is therefore not surprising that this is an extremely competitive research field, and it gives me great pleasure that Graz University of Technology can play a part on the world stage at the leading edge. This issue showcases several highlights we have to offer in this field. For example, organic semiconductors are regarded as the future of photovoltaics and displays, and OLEDs are already fairly common in mobile telephone displays. However, there is still much to be done in fundamental research in this field. Another example can be found in the field of battery research. Electrochemistry has a longstanding tradition at Graz University of Technology, but right now battery research is once again experiencing a significant boost. Research is being undertaken in materials for batteries in the CD Laboratory of Martin Wilkening, and we are in the process of establishing a research focus in the field of batteries in Graz. Plans are being made for a new COMET K1 centre, a research and test centre for mechanical battery tests, and a research studio, among other things. If we are able to bring all these to fruition as planned, then we'll have a centre with international visibility far beyond the borders of Austria.

Competitive research infrastructure is particularly of decisive importance in materials research. Two

Gerade in der Materialforschung ist eine kompetitive Forschungsinfrastruktur von entscheidender Bedeutung. Zwei Beispiele finden Sie in diesem Heft. Im Bereich der Elektronenmikroskopie konnten wir im Jahr 2011 das ASTEM installieren. Dieses Mikroskop der Superlative gewährt Einblicke in den atomaren Aufbau von Materialien und erlaubt der TU Graz, an vorderster Front in den Materialwissenschaften mitzuforschen. Ganz ähnlich verhält es sich mit der Elektronenstrahlschweißanlage, die wir letztes Jahr in Betrieb nehmen durften. Damit ist es unter anderem möglich, völlig verschiedenartige Materialien zu verbinden, aber auch im Bereich der Implantate ganz neue Oberflächen zu schaffen, die vom Körper viel besser aufgenommen werden. Hier gibt es eine schöne Brücke des FoE „Advanced Materials Science“ zu BioTechMed, der interuniversitären Zusammenarbeit zwischen Karl-Franzens-Universität Graz, der Medizinischen Universität Graz und der TU Graz an der Schnittstelle von Mensch, Technik und Medizin.

In diesem Heft finden Sie aber noch sehr viele andere Beispiele für die Vielfältigkeit, aber auch die Exzellenz in diesem so wichtigen Forschungsbereich. Leider ist in einem Heft nie genug Platz, um den ganzen Umfang der Forschungen darzustellen.

Die Weihnachtszeit naht und nach der hektischen Vorweihnachtszeit bleibt hoffentlich während der Feiertage auch etwas Zeit, in diesem TU Graz *research* zu schmökern. In diesem Sinne wünsche ich bei der Lektüre der vorliegenden Ausgabe viel Freude und Ihnen und Ihren Familien frohe Weihnachten und einen guten Rutsch.

examples of this can be found in this current issue. In the field of electron microscopy, we were able to install the ASTEM in 2011. This outstanding microscope grants insights into the atomic structure of materials and allows Graz University of Technology to undertake research at the front line of the materials sciences. It's a situation similar to the electron-beam welding machine which we commissioned last year. It allows us, among other things, to combine completely different materials and, in the field of implants, to create completely new surfaces which can be much better absorbed by the body. And right here is an impressive bridge leading from the FoE Advanced Materials Science to BioTechMed – the inter-university collaboration between the University of Graz, the Medical University of Graz, and Graz University of Technology at the interface of man, medicine and machine.

You'll also find in this current issue many other examples of diversity and excellence in this so important research area. Unfortunately, there is never enough space in one issue to represent the whole range of research.

Christmas is approaching and, after the hectic pre-Christmas rush, hopefully they'll be time to browse through TU Graz *research* during the holidays. In this spirit, I hope you enjoy reading this new issue, and I wish you and your families a merry Christmas and a very good new year.



Horst Bischof

# Mit Wissen zur Innovation Through Knowledge to Innovation

Ines Hopfer-Pfister

*Georg Kügerl studierte Technische Physik und promovierte 1989 an der TU Graz. Von 1987 bis 1992 war er Assistent am Institut für Theoretische Physik der TU Graz, unterbrochen durch einen einjährigen Forschungsaufenthalt am Cranfield Institute of Technology in Großbritannien. Heute ist Kügerl Mitglied der Geschäftsleitung der EPCOS OHG und Chief Technology Officer (CTO) der Piezo and Protection Devices Business Group des TDK Konzerns. In seiner Funktion als CTO ist der TU Graz-Absolvent für die allgemeinen Entwicklungsaktivitäten und das Innovationsmanagement der Business Group zuständig, unter anderem für die Materialentwicklung.*

**Im Interview mit TU Graz research gibt Georg Kügerl, Mitglied der Geschäftsleitung von EPCOS OHG, Einblick in die Forschungs- und Entwicklungsarbeit seines Unternehmens und berichtet über die langjährige Zusammenarbeit mit der TU Graz. Dank der Kooperation mit wissenschaftlichen Instituten, so der TU Graz-Absolvent, ist EPCOS stets auf dem neuesten Stand der Grundlagenforschung bzw. der Analysemethoden. Und dieses Know-how, so Kügerl, führt verlässlich zu Innovationen in der Material- und Prozessentwicklung.**

**Sehr geehrter Herr Kügerl, Sie sind Executive Vice President und Chief Technology Officer der Piezo and Protection Devices Business Group des TDK Konzerns, eines führenden Elektronikunternehmens mit Sitz in Tokio. Die in Deutschlandsberg ansässige EPCOS OHG ist eine Tochtergesellschaft von TDK. Wo liegt der Fokus des Standorts?**

Deutschlandsberg ist Stammsitz der Business Group Piezo- und Schutzbauelemente und damit das Kompetenzzentrum für die weltweiten Aktivitäten unseres Geschäftsbereichs. Am Standort entwickeln und fertigen wir elektronische Bauelemente basierend auf elektrokeramischen Werkstoffen – in unserem Fall Keramiken mit speziellen dielektrischen, piezoelektrischen oder halbleitenden Eigenschaften. Den Fokus legen wir auf die keramische Vielschichttechnologie, durch welche eine Parallelschaltung einzelner Bauelemente oder gar Kombinationen unterschiedlicher Bauelemente auf kleinstem Raum ermöglicht werden.

**Seit vielen Jahren besteht durch das Zentrum für Elektronenmikroskopie (ZFE) und im Rahmen des CD-Labors für Ferroische Materialien eine enge Zusammenarbeit zwischen EPCOS und der TU Graz. Welchen Part übernimmt hier Ihr Unternehmen?**

Wir sind industrieller Forschungspartner des CD-

*In interview with TU Graz research, Executive Vice-President of EPCOS OHG, Georg Kügerl, provides a glimpse into the research and development activities of his company and talks about the many years of co-operation with Graz University of Technology. According to the Graz University of Technology graduate, it is thanks to the co-operation with various scientific institutes that EPCOS is always up to date with the latest fundamental research and analysis techniques. And this know-how leads reliably to innovations in material and process development.*

**Mr. Georg Kügerl, you're Executive Vice President of EPCOS OHG and Chief Technology Officer of the Piezo and Protection Devices Business Group of the TDK Group, a leading electronics company with head office in Tokyo. EPCOS OHG is located in Deutschlandsberg and is a subsidiary of TDK. What exactly does EPCOS specialise in?**

Deutschlandsberg is the head office of the Piezo and Protection Devices Business Group and thus the competence centre for the worldwide activities in our business area. Our location specialises in the development and manufacture of electronic components based on electro-ceramic materials – in our case ceramics with special dielectric, piezoelectric and semiconductor properties. We focus on ceramic multilayer technology, which allows a parallel circuit of individual components or even combinations of different components to be accommodated in an extremely small space.

**There has been close co-operation between EPCOS and Graz University of Technology for many years through the Graz Centre for Electron Microscopy (ZFE) and CD Laboratory for Advanced Ferroic Oxides. What role does your company play?**

We are industrial research partners of the CD La-





© TU Graz/Lunghammer

Labors. Als solcher wirken wir insbesondere an der Themenfindung und der Evaluierung der Forschungsergebnisse mit. Das ZFE beauftragen wir mit Analysen, die sich aus der Zusammenarbeit mit dem CD-Labor oder der sonstigen internen Entwicklungstätigkeit ergeben. Unser Hauptpart ist es, das hierbei gewonnene Wissen in Innovationen, d. h. verkaufbare Produkte, umzusetzen.

**Welche Strategie verfolgt EPCOS bei der Auswahl von externen Kooperationspartnerinnen und -partnern?**

Auf der Entwicklungsebene brauchen wir Kooperationen, die für unsere Aufgabenstellungen geeignetes Know-how einbringen und die bereit sind, uns langfristig zu begleiten. Dazu zählt zum Beispiel das CD-Labor mit seiner Fokussierung auf Keramiken mit dielektrischen und piezoelektrischen Eigenschaften. Bei der Vergabe externer Analysen, wie zum Beispiel an das ZFE, zählt die Möglichkeit des raschen – sprich räumlich nahen – Zugriffs auf High-End-Analyseverfahren. Durch den engen Kontakt zu den genannten wissenschaftlichen Instituten sind wir stets auf dem letzten Stand der für uns relevanten Grundlagenforschung bzw. Analysemethoden.

laboratory and as such, we are involved in particular in the selection of topics and the evaluation of the research results. We commission the Austrian Centre for Electron microscopy with analyses deriving from the collaboration with the CD Laboratory or other internal development activities. Our main role is to turn hard-won knowledge into innovations, in other words – sellable products.

**What strategy does EPCOS follow in the selection of external co-operation partners?**

At the development level, we need collaborations which yield suitable know-how for our task formulations and which are prepared to accompany us in the long-term. Added to this, for example, is the CD Laboratory which focuses on ceramics with dielectric and piezoelectric properties. In awarding external analyses, such as, for example, to the Austrian Centre for Electron Microscopy, the possibility of a quick – in other words, geographically close – access to high-end analysis techniques counts for a lot. Due to the close contact with the mentioned scientific institutes, we are always up to date with the latest fundamental research and analysis techniques which are relevant for us.

*Abb. 1: Georg Kügerl im Interview mit TU Graz research.*

*Fig. 1: Georg Kügerl in interview with TU Graz research.*

*Die EPCOS OHG ist ein Unternehmen der TDK Corporation, eines führenden Elektronikkonzerns mit Sitz in Tokio/Japan. Weltweit beschäftigt TDK rund 80.000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, die EPCOS OHG in Deutschlandsberg 900.*

*EPCOS OHG belongs to the TDK Corporation, a leading electronics group with head office in Tokyo, Japan. TDK employs a workforce of some 80,000 worldwide. EPCOS OHG in Deutschlandsberg has a workforce of 900.*



**Sie sind Absolvent der TU Graz, wo sehen Sie die Stärken unserer Universität?**

Ich schätze an der TU Graz die Breite des technischen und wissenschaftlichen Angebots sowie das ständige Bemühen, dieses Angebot mit lokalen Unternehmen zur Anwendung zu bringen.

**Wie viel investiert EPCOS jährlich in Forschung und Entwicklung? Wo setzen Sie in Ihrem Unternehmen die Schwerpunkte?**

Die EPCOS OHG in Deutschlandsberg gibt jährlich rund 30 Millionen Euro für Forschung und Entwicklung aus, das sind rund 10 Prozent des Umsatzes am Standort. Diese Zahlen inkludieren eventuelle Sonderaufwendungen für den Anlauf der Serienfertigung neuer Produkte. Die Schwerpunkte unserer Entwicklungsarbeit, die zu einem Gutteil von TU Graz-Absolventinnen und -Absolventen verrichtet wird, sind die Materialforschung, die Neu- und Weiterentwicklung unserer Prozesstechnologien sowie die applikationsspezifische Produktentwicklung. Eine kleine Gruppe von Forschenden beschäftigt sich darüber hinaus mit Grundlagenforschung und mit Vorentwicklungen auf Technologiegebieten, die wir heute mit unserem Produktportfolio noch nicht abdecken, die aber künftig attraktive Geschäftsmöglichkeiten bieten könnten.

**Was sind Ihrer Meinung nach im Moment die „hot topics“ im Rahmen Ihrer Materialforschung?**

Diese Frage muss man auf drei Ebenen beleuchten. Erstens geht es um die Weiterentwicklung des Vorhandenen, d. h. die Effizienzsteigerung der bestehenden Materialien, um die Eigenschaften unserer Bauelemente zu verbessern oder sie bei gleichbleibenden Eigenschaften zu miniaturisieren. Zweitens sind wir gezwungen, umweltrelevante oder sehr teure Rohmaterialien auszudeSIGNen oder zumindest in ihrem Anteil zu minimieren, Stichwort bleifreie Materialien oder der Ersatz teurer Edelmetalle durch unedle Metalle wie Kupfer. Die dritte Ebene betrifft gänzlich neue Einsatzmöglichkeiten für Elektrokeramiken. Hier

**As a graduate of Graz University of Technology, what do you think are the strengths of our university?**

I value the range of technology and science that Graz University of Technology has to offer and its constant endeavours to turn it into practical applications using local companies.

**How much does EPCOS invest in R&D on an annual basis? And what are your core areas in R&D?**

EPCOS OHG in Deutschlandsberg lays out about 30m euros on research and development per year – that's about 10 percent of the location's annual turnover. These figures include possible special outlays for launching series productions of new products. The core areas of our development work, a considerable part of which is carried out by graduates of Graz University of Technology, comprise materials research, new and further development of our process technologies, and application-specific product development. Furthermore, a small group of researchers deals with fundamental research and advance developments in areas of technology which we do not yet cover with our product portfolio but which might offer attractive business possibilities in the future.

**In your opinion, what are the hot topics in the framework of your materials research at the moment?**

You have to examine this question at three levels. First of all, it is a matter of further developing what is already there. In other words, enhancing efficiency of existing materials to improve the properties of our components or miniaturising them while keeping the same properties. Secondly, we are compelled to fade out environmentally relevant or very expensive raw materials or at least to reduce their share, for instance – lead-free materials or the substitution of expensive precious metals for common metals such as copper. The third level involves completely new fields of application





sehen wir insbesondere den Bereich der Energiespeicherung und Energieumwandlung. Die Themen, mit denen wir uns in diesem Zusammenhang beschäftigen, reichen vom piezoelektrischen „energy harvester“ bis zur keramischen Vielschichtbatterie.

**Wenn wir in die Zukunft blicken: In welche Richtung wird sich die Materialforschung hin entwickeln? Wie reagiert Ihr Unternehmen bzw. die F&E-Abteilung in Deutschlandsberg darauf?**

Der Computer spielt für die Material- und Prozessentwicklung eine immer wichtigere Rolle. Wir versuchen schon heute, die Vorgänge in unseren Herstellprozessen wie z. B. die Gasströmung und die Temperaturverteilung in einem Sinterofen zu simulieren und dadurch zu optimieren. Daneben wird uns die Simulation der Materialeigenschaften auf atomarer Ebene ein besseres Verständnis der Bauelementeigenschaften ermöglichen. Solche Simulationen sind für Einkristalle schon heute weit verbreitet. Künftig wird es möglich sein, auch polykristalline Gefüge und Korngrenzphänomene auf atomarem Niveau zu simulieren. Diese theoretischen Betrachtungen sind parallel durch hochauflösende, quantitative Analyseverfahren zu begleiten. Eine unverzichtbare Rolle wird aber weiterhin das gute alte Materiallabor spielen, in dem Pulveransätze gemischt und erprobt werden. Das muss ja nicht bloß im „trial and error“ geschehen.

**Innovationen sind für viele Unternehmen überlebenswichtig, wie geht Ihr Unternehmen mit den Risiken und zeitlichen Horizonten von innovativen Themen um?**

Wir versuchen, die Treffsicherheit unserer Innovationsvorhaben durch entsprechende Vorarbeiten möglichst gut abzusichern. Die Zugehörigkeit zu einem Weltkonzern wie TDK bietet uns natürlich die Chance, langfristig und nachhaltig an ausgewählte Fragestellungen heranzugehen. ■

for electro-ceramics. Here, we're thinking in particular of the area of energy storage and energy conversion. The topics we deal with in this context range from piezoelectric “energy harvesters” to ceramic multilayer batteries.

**Looking into the future, what direction is materials research developing in? How is your company or the R&D department in Deutschlandsberg responding to this?**

Computers are playing an increasingly important role in material and process development. We are already attempting to simulate the procedures in our production processes, such as, for example, gas flow and temperature distribution in a sintering furnace and thus to optimise it. In addition, the simulation of the material properties at an atomic level will give us a better understanding of the properties of the components. Such simulations are very common today for monocrystals. In the future it will be also possible to simulate polycrystalline structures and grain boundary phenomena at an atomic level. These theoretical considerations can be accompanied in parallel by high-resolution, quantitative analysis techniques. But the old fashioned materials laboratory in which powder feedstocks are mixed and tried out will continue to play an indispensable role. But it doesn't just have to happen by trial and error.

**Innovations are vital for many companies. How does your company deal with the risks and scheduling of innovative topics?**

We try as best as possible to secure the accuracy of our planned innovations through suitable preliminary work. Belonging to a global corporation like TDK, of course, offers us the opportunity to approach selected problems sustainably and in the long-term. ■

## Organische Halbleiter verstehen: von der Quantenwelt zu makroskopischen Bauelementen

### Understanding Organic Semiconductors: From the Quantum-Level to Macroscopic Devices

Karin Zojer, Egbert Zojer



Karin Zojer beschäftigt sich mit der Simulation des Ladungstransports in organischen Bauelementen mit dem Ziel, das Wechselspiel zwischen der Bauelementarchitektur und den Eigenschaften der organischen Halbleitermaterialien bzw. ihrer Grenzflächen zu verstehen. Ihre Arbeit baut auf dem Know-how auf, das sie in Zusammenarbeit mit mehreren Studierenden in der Arbeitsgruppe von Ferdinand Schürer am Institut für Theoretische Physik und Computational Physics in den vergangenen Jahren generiert hat.

*Karin Zojer focuses on the simulation of charge transport in organic electronic devices to elucidate the interplay between device architecture and the properties of the organic semiconducting material with an emphasis on understanding the role of interfaces. The work builds on the know-how generated with several students while working in the group of Ferdinand Schürer at the Institute of Theoretical and Computational Physics.*

**Bildschirme auf Basis organischer Halbleiter sind mittlerweile Teil des Massenmarktes und die durch sie erzielbaren Umsätze werden für 2017 auf 17 Milliarden US-Dollar geschätzt.<sup>1</sup> Auch innovative Elektronikkonzerne erkennen dieses Potenzial. Dies zeigt beispielsweise die Übernahme von NOVALED (einer Spin-off-Firma der TU Dresden und wie wir Teil des gerade gestarteten THINFACE-Projekts) durch die Samsung Group und ihre Tochterunternehmen. Bevor es zu einem kommerziellen Einsatz organischer Halbleiter in anderen Bereichen wie elektronischen Schaltungen und Solarzellen kommt, müssen aber noch einige technologische Hürden genommen werden.**

Um dies zu erreichen, ist ein tiefgehendes Verständnis der physikalischen Eigenschaften dieser Materialien unerlässlich. Dieses lässt sich aber nur durch eine Kombination experimenteller Untersuchungen mit Multiskalensimulationen erreichen (vgl. Abb. 1; in Analogie zur Entwicklung theoretischer Modelle von „komplexen chemischen Systemen“, wofür im Jahr 2013 der Chemie-nobelpreis vergeben wurde). Tatsächlich folgen heutzutage Simulationen von Materialeigenschaften typischerweise einem Multiskalenansatz, der von der Quantenmechanik bis zu mesoskopischen Modellen reicht. Das Ziel unserer Forschungsaktivitäten ist es, einen entscheidenden Schritt weiterzugehen und eine nahtlose Integration von Material- mit Bauelementsimulationen zu schaffen. Dies soll durch die Kombination einer Bottom-up- mit einer Top-down-Strategie erreicht werden (Abb. 1).

#### Wissenschaftlicher Zugang

Erstere fußt auf der Erfahrung der Arbeitsgruppe von Egbert Zojer (vgl. Abb. 2a und b), welche sich

*Organic semiconductors (OSC) play an increasingly important role in the semiconductor world. OSC-based displays in particular have entered the market, and their revenues are expected to exceed 17 billion US dollars by 2017.<sup>1</sup> Such predictions are taken seriously by innovative electronics companies, as exemplified by the recent 260-million-euro take-over of TU Dresden spinoff NOVALED (one of our partners in the THINFACE project) by Samsung and its subsidiaries. Market expectations are also high for OSC-based solid-state lighting applications, while the full potential for electronic circuits and organic solar-cells has still to be realized.*

This requires deep insight into the fundamental physical processes occurring in such devices, and this can only be achieved by a combination of experimental studies and multi-scale simulations (see Fig. 1; analogous to the situation in “complex chemical systems”, where the development of the necessary modeling approaches was rewarded with the 2013 Nobel Prize in Chemistry). Indeed, nowadays, the commonly applied strategy to simulate materials properties starts from the quantum level and (cf. Fig. 1) proceeds to the mesoscopic scale via several intermediate steps. The long-term goal of our research is to go beyond that by seamlessly integrating materials simulations with device modeling, combining a bottom-up and a top-down strategy (cf. Fig. 1).

#### The scientific approach

The bottom-up approach builds on the experience in the E. Zojer group (cf. Fig. 2a and b) with the quantum-mechanical description of OSCs,<sup>2</sup> which in the past years has focused on fundamental properties of interfaces relevant for organic devices. To account for the crucial role of disor-

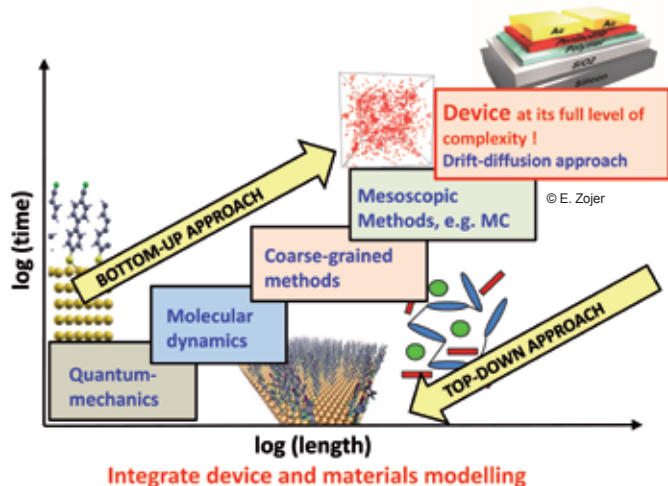


Abb. 1/ Fig. 1

in den letzten Jahren auf die quantenmechanische Simulation organischer Halbleiter spezialisiert hat.<sup>2</sup> Der Fokus lag dabei in den vergangenen Jahren auf der Beschreibung von für Bauelemente relevanten Grenzflächen. Um Unordnungseffekte modellieren zu können, werden diese Berechnungen mit Moleküldynamiksimulationen kombiniert. In Zukunft sollen auch makroskopische Ansätze einbezogen werden. Ziel dieser Aktivitäten ist es, mithilfe dieser „Computer-experimente“ fundamentale Materialeigenschaften zu verstehen, um so neuartige Materialien designen zu können. Dabei sind sowohl die neuesten methodischen Entwicklungen unserer Kooperationspartnerinnen und -partner als auch die langjährige Erfahrung mit verschiedensten experimentellen Techniken von großem Nutzen.

Die Top-down-Strategie startet von einem makroskopischen Drift-Diffusionsansatz, wie er von Karin Zojer, Ferdinand Schürer und den mit ihnen arbeitenden Studierenden in den vergangenen Jahren erfolgreich implementiert wurde. Damit gelang es beispielsweise, die Rolle von Phasenseparation in organischen Solarzellen und von Grenzflächen in organischen Transistoren (vgl. Abb. 2c) besser zu verstehen. Diese Studien werden einerseits im Rahmen eines Elise-Richter-Stipendiums, das Karin Zojer vom FWF zuerkannt wurde, fortgeführt, andererseits beginnen erste Arbeiten zur direkten, selbstkonsistenten Kombination der Drift-Diffusionssimulationen mit Monte-Carlo-Techniken zur mikroskopischen Beschreibung des Ladungsträgertransports (vgl. Abb. 1).

### Erfolgreiche Kooperationen

Um dieses Ziel zu erreichen, ist Zusammenarbeit auf verschiedenen Ebenen unerlässlich: Zentral sind dabei unsere aus exzellenten Studierenden bestehenden Arbeitsgruppen (Abb. 3). Daneben ist unsere Forschung eng mit weiteren Aktivitäten am

der in these systems, the applied “toolbox” has recently been extended to molecular dynamics simulations; in the future, more macroscopic techniques will also be included. The main aim in these studies is either to explain unexpected experimental observations or to predict materials with novel properties. The focus is on materials design aspects, building on the latest methodological developments in partner groups and on the extensive experience with various experimental techniques.

The top-down strategy starts from macroscopic drift-diffusion based calculations that have been performed during the past years by Karin Zojer, Ferdinand Schürer, and the students working with them. The simulations helped understanding the role of phase separation in hybrid solar cells, the mechanisms of charge-carrier injection into organic transistors (cf. Fig. 2c), and the processes underlying device-tuning approaches through interface modifications. These efforts will be continued, for example, in the framework of an Elise Richter grant awarded to Karin Zojer by the FWF. Current efforts also aim at the seamless combination of Monte Carlo type techniques aiming at a microscopic, statistical description of charge-transport into the drift-diffusion simulations (cf. Fig. 1).

### Successful collaborations

For achieving these goals, a team-effort is absolutely crucial and has to occur on different levels. Within our research groups, we can build on a team of highly skilled and motivated students (see Fig. 3); on a “Graz University of Technology level”, our work is closely linked to research activities at the Institutes of Solid State Physics and the Institute of Chemical Technology of Materials and is strongly supported by the Scientific Computing Department of the Graz University of Technology IT Services. Furthermore, we are well embedded in the Styrian research area

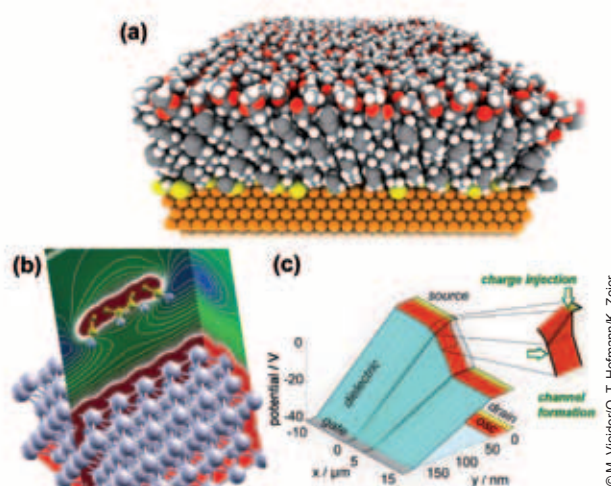


Abb. 2/ Fig. 2

Abb. 1: Schematische Darstellung der Bottom-up- und Top-down-Strategie, um eine tatsächliche Multiskalenbeschreibung organischer Bauelemente zu ermöglichen.

Fig. 1: Schematic representation of the bottom-up and top-down approaches to achieve a true multi-scale theoretical description of actual organic devices.

Abb. 2: a) Mithilfe einer Moleküldynamiksimulation bestimmte Unordnung in einer esterhaltigen selbstassemblierten Monolage aus Alkylthiolen.

b) Quantenmechanisch berechnete elektrostatische Energie an einer metall-organischen Grenzfläche.

c) Elektrostatisches Potenzial im Querschnitt eines organischen Dünnschichttransistors als Ergebnis einer Drift-Diffusionssimulation.

Fig. 2: a) Disorder in an ester-containing aliphatic self-assembled monolayer calculated by classical molecular dynamics.

b) Electrostatic potential energy distribution at a metal-organic interface determined by quantum-mechanical calculations.

c) Electrostatic potential in the cross-section of an organic thin-film transistor, as obtained by drift-diffusion based simulations.



Abb. 3: Arbeitsgruppe von Egbert

Zojer (v. l. n. r.): Veronika Obersteiner, David A. Egger, Elisabeth Verwüster, Egbert Zojer, Elisabeth Wruß, Gernot Kraberger, Iris Hehn, Bernhard Kretz.

Fig. 3: Group of Egbert Zojer (from left to right): Veronika Obersteiner, David A. Egger, Elisabeth Verwüster, Egbert Zojer, Elisabeth Wruß, Gernot Kraberger, Iris Hehn, Bernhard Kretz.



Egbert Zojer und seine Arbeitsgruppe am Institut für Festkörperphysik beschäftigen sich mit der atomistischen Simulation organischer Halbleiter. Ziel ist dabei die Etablierung zuverlässiger Zusammenhänge zwischen der chemischen bzw. morphologischen Struktur der Materialien und ihren elektronischen Eigenschaften, um Möglichkeiten zur Entwicklung neuartiger „Materialsysteme“ aufzuzeigen.

Egbert Zojer and his group at the Institute of Solid State Physics focus on the atomistic simulation of organic semiconductors. Their goal is to establish a firm understanding of the relation between the chemical and morphological structure of organic semiconductors and their electronic properties in order to portray strategies for the development of novel materials systems.

Institut für Festkörperphysik und am Institut für Chemische Technologie von Materialien vernetzt und wir profitieren sehr von der Unterstützung der Abteilung für Scientific Computing des Zentralen Informatikdiensts der TU Graz. Durch enge Kooperationen mit Joanneum Research und Kontakten mit dem NanoTecCenter Weiz, der Uni Graz und der Montanuniversität Leoben ist unsere Arbeit gut in den steirischen Forschungsraum eingebettet. Natürlich spielen auch internationale Kooperationen eine große Rolle. Unsere Zusammenarbeit mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftern des Georgia Institute of Technology, der Chinesischen Akademie der Wissenschaften, der Université de Mons und der Humboldt-Universität zu Berlin hat bereits Tradition. Aktuell spielen für uns die Kooperationen mit der Universität Heidelberg, dem Fritz-Haber-Institut, der Universität Chiba, der Universität Bologna, der Comenius-Universität Bratislava und dem Weizmann Institute of Science die Hauptrolle. Weitere gemeinsame Aktivitäten werden sich aus dem gerade begonnenen Marie-Curie-Projekt THINFACE ergeben, das aus dem PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials)-Netzwerk<sup>3</sup> hervorgegangen ist. Diesem ist die TU Graz auf Betreiben von Dekan Wolfgang Ernst im Jahr 2011 beigetreten. Es umfasst 14 europäische Universitäten und verleiht „mobilen“ Studierenden ein „Europäisches Doktorat“. ■

with close ties to Joanneum Research, the NanoTecCenter Weiz, and the Universities of Graz and Leoben. Naturally also, international collaborations play a crucial role. These involve(d) the Georgia Institute of Technology, the Chinese Academy of Sciences, the Université de Mons, the Humboldt Universität zu Berlin, and more recently especially the Universität Heidelberg, the Fritz-Haber Institute, Chiba University, the University of Bologna, Comenius University Bratislava, and the Weizmann Institute of Science. Additional joint activities are currently being established especially through the recently started Marie Curie Project THINFACE, an initiative that started within the PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials) network<sup>3</sup> that Graz University of Technology joined in 2011 due to an initiative of dean Wolfgang Ernst. PCAM joins 14 European universities and awards a “European Doctorate” to students actively pursuing research also in partner universities. ■

Literatur/References:

<sup>1</sup> [www.statista.com/statistics/267097/revenue-forecast-for-the-global-oled-tv-market-until-2015/](http://www.statista.com/statistics/267097/revenue-forecast-for-the-global-oled-tv-market-until-2015/)  
<sup>2</sup> <http://www.if.tugraz.at/web.php?10>  
<sup>3</sup> [www.pcam-doctorate.eu/](http://www.pcam-doctorate.eu/)

# Elektrochemische Energiespeicherung von morgen

## Electrochemical Energy Storage Beyond the Horizon

Stefan Freunberger

***Lithium-Batterien haben die mobile Elektronik revolutioniert und werden eine Schlüsselrolle bei der Elektrifizierung von Fahrzeugen spielen. Doch auch bei der Lithium-Ionen-Technologie wird man an die Grenzen einer möglichen Verbesserung stoßen und langfristig wird sie die Bedürfnisse nicht stillen können. Am Institut für Chemische Technologie von Materialien werden Grundlagen neuer Batterien erforscht, die über die Möglichkeiten von Lithium-Ionen-Batterien hinausgehen.***

Für den Übergang von fossilen zu erneuerbaren Energieträgern ist Energiespeicherung erforderlich. Li-Ionen-Batterien haben die mobile Elektronik revolutioniert, indem sie zumindest das 2,5-Fache an Energie pro Masse und Volumen im Vergleich zu jeder Alternative speichern können. Sie halten Einzug in Elektrofahrzeugen, werden jedoch nur unter der Voraussetzung massiver Fortschritte eine signifikante Rolle spielen können. Li-Ionen-Batterien, die auf Li<sup>+</sup>-Einlagerungsmaterialien, sogenannten Interkalationsmaterialien, basieren, werden hierbei weiterhin wichtig bleiben. Über deren Grenzen hinauszugehen, ist eine riesige Herausforderung; es bedarf neuer Konzepte, neuer Chemie und neuer Materialien. Langfristig benötigen hochvolumige Anwendungen eine bedeutende Verbesserung der Haltbarkeit, Energiedichte, Sicherheit, Nachhaltigkeit und Kosten. Eine schrittweise Verbesserung jetziger Technologie wird dies nicht erfüllen können. Radikal neue und ehrgeizige Ansätze sind nötig, die Forschung im Bereich „Batterien jenseits der Interkalation“ erfordern. Hier diskutiere ich Richtungen, die sich diesen Grundherausforderungen der Batterieforschung annehmen.

### Von jetzigen zu zukünftigen Lithium-Batterien

Jetzige Li-Ionen-Batterien bestehen aus einer positiven Li-Einlagerungsverbindung (Kathode),

*Lithium batteries have transformed portable electronics and will play a key role in electric vehicles. However, even the best that can be expected from improved Li-ion technology will be insufficient for society's long-term needs. At the Institute for Chemistry and Technology of Materials fundamental research targets new battery chemistries that go beyond the horizon of current Li-ion batteries.*

It is imperative that we reduce our dependence on fossil fuels if we are to combat climate change. This requires electrical energy storage. Lithium-ion batteries have revolutionized portable electronics by storing more energy by weight than competing technology. They are now on the verge of penetrating the electric vehicle market but will only succeed at a significant level under the condition that substantial improvements are achieved. Li-ion batteries based on intercalation materials will continue to be important in this respect. Reaching beyond the horizon of Li-ion batteries is a formidable challenge; it requires the exploration of new concepts, new chemistry and new materials. In the long term high-volume applications such as electric vehicles and the storage of electricity from renewables (e.g. for grid balancing) require a step change in long-term stability, energy density, safety, material sustainability and cost. Stepwise improvement of current Li-ion technology based on intercalation electrodes cannot hope to deliver this. Radical new approaches are required, motivating ambitious and potentially game-changing research 'beyond intercalation chemistries'. Here I discuss research directions dealing with the foremost challenges that lie ahead in battery research: to improve energy density, safety and sustainability and reduce cost.



Stefan Freunberger hat an der ETH Zürich promoviert und u.a. der University of St. Andrews geforscht. Seine Forschungsinteressen beinhalten elektrochemische Energiespeicher, insbesondere neue Konzepte, Reaktionsmechanismen und Materialien. Neben anderen Auszeichnungen erhielt er den „Young Investigator Award“ der Electrochemical Society und eingeladene Gastprofessuren in Frankreich und Großbritannien. Er ist Wissenschaftler am Institut für Chemische Technologien von Materialien.

Stefan Freunberger obtained his Ph.D. from ETH Zürich and did research at the University of St. Andrews. His research interests include electrochemical energy storage, in particular new concepts, mechanisms and materials. Amongst other distinctions he received the Young Investigator Award of The Electrochemical Society and invited guest professorships in France and the UK. He is currently Senior Scientist at the Institute for Chemistry and Technology of Materials.

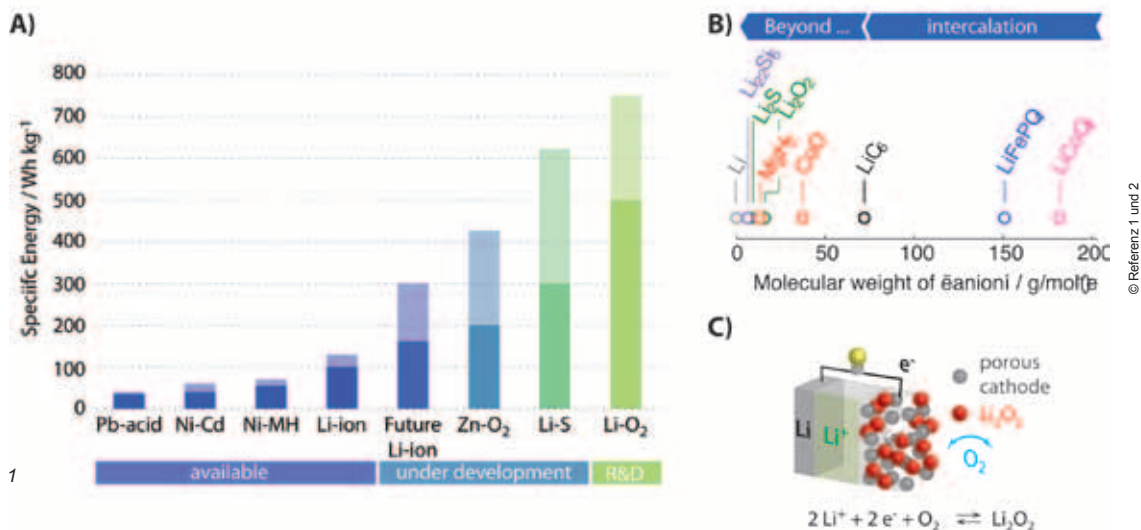


Abb. 1/ Fig. 1

Abb. 1:

- a) Abschätzungen praktischer spezifischer Energien zukünftiger Batteriekonzepte im Vergleich mit etablierten Technologien.
- b) Neben der Elektrodenspannung bestimmt auch vor allem das Äquivalentgewicht der Speicherverbindung je ausgetauschter Ladung die Speicherdichte.
- c) Schematische Darstellung der Li-O<sub>2</sub>-Batterie, die eine der höchsten theoretischen spezifischen Energien aufweist.

Fig. 1:

- a) Estimation of practical specific energy of future battery concepts in comparison to established technologies. b) The theoretical specific energy is governed next to the electrode potential by the equivalent weight of the storage material. c) Schematic representation of the Li-O<sub>2</sub> cell that exhibits amongst the highest theoretical energy.

z.B. LiCoO<sub>2</sub>, Graphit als negativer Elektrode und einem nichtwässrigen Elektrolyten. Dies ermöglicht ca. 100 bis 120 Wh/kg Energieinhalt, bezogen auf das Gesamtgewicht der Batterie, siehe Abb. 1a.<sup>1,2</sup> Eine signifikante Erhöhung der Energiedichte erfordert, die Zahl bzw. das Atomgewicht der Atome pro austauschbarem Li+-Ion zu verringern, siehe Abb. 1b. Beispiele solcher Batterien sind Li-Schwefel- und Li-O<sub>2</sub>-Batterien, Konversionsmaterialien (z. B. Li-Hydride) und Legierungen (z. B. mit Silizium). Gleichzeitig vermeiden solche Elektroden den Einsatz seltener und teurer Elemente, wodurch Batterien billiger und nachhaltiger werden. Ihre theoretische spezifische Energie übertrifft die von Li-Ionen-Batterien bis ums 10-Fache. Abb. 1a<sup>1,2</sup> vergleicht die praktisch erzielbare spezifische Energie für verschiedene Li-Batterietypen, wobei die Post-Li-Ionen-Technologien (Li-Schwefel, Li-O<sub>2</sub>), die im Grundlagenforschungsstadium sind, nur vorsichtig abgeschätzt wurden. An der TU Graz etabliert der Autor im Rahmen weiterer Batterieaktivitäten im Institut Forschung zu verschiedenen solcher neuer Batterietechnologien, u. a. der Li-O<sub>2</sub>-Batterie sowie Konversions- und Legierungsreaktionen. Basierend auf seiner bisherigen Arbeit an der britischen University of St. Andrews ist die Forschung an der Li-O<sub>2</sub>-Batterie zurzeit am weitesten gediehen.

Die wiederaufladbare Li-O<sub>2</sub>-Batterie könnte die elektrochemische Energiespeicherung revolutionieren, falls ihre theoretische spezifische Energie, die jene von Li-Ionen-Batterien bei Weitem übertrifft, realisiert werden kann. Beim Entladen bildet sich in der positiven Elektrode festes Lithiumperoxid, Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, (Abb. 2). Der Prozess wird beim Laden umgekehrt. Während das Grundprinzip, Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> elektrochemisch zu bilden/zersetzen, etabliert ist, bleiben viele praktische Hürden. Diese beinhalten die Stabilität von Elektrolyten und

## Lithium batteries – from the present to the future

Current lithium-ion batteries are composed of a positive intercalation electrode, typically LiCoO<sub>2</sub>, a negative electrode, typically graphite, and a non-aqueous organic liquid electrolyte. Cells are normally capable of supplying about 100-120 Wh/kg in respect to the total weight of the battery, (Fig. 1a<sup>1,2</sup>). Significantly increasing the energy density requires reducing the number and/or atomic weight of atoms per Li+ ion exchanged (see Fig. 1b). Examples for these “beyond intercalation chemistries” are the Li-sulphur and Li-O<sub>2</sub> battery, conversion materials (e.g. Li hydrides) and Li-alloys (e.g. with silicon or tin). At the same time these battery chemistries avoid the use of scarce and expensive elements making them “greener” and cheaper. Their theoretical specific energy exceeds the one of current Li-ion batteries by up to one order of magnitude. A comparison of practical specific energies for several rechargeable batteries is presented in Fig. 1a<sup>1,2</sup> with cautious projections for the ‘post-lithium-ion’ technologies (Li-sulphur and Li-O<sub>2</sub>) that are presently at the stage of basic research. At Graz University of Technology the author, embedded in the wider battery activities at the institute, is establishing research into a variety of such upcoming chemistries including the Li-O<sub>2</sub> battery, alloying and conversion reactions. Based on his previous work at the University of St. Andrews, UK, research on the Li-O<sub>2</sub> battery is currently the most advanced.

The rechargeable Li-O<sub>2</sub> battery could transform energy storage if its theoretical specific energy, which exceeds significantly that of lithium ion batteries, could be realised in practice. At the positive electrode on discharge, O<sub>2</sub> enters the pores of the electrode where it is reduced and combines with the Li+ ions from the electrolyte to form solid Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, (see Fig. 2). The process is reversed on



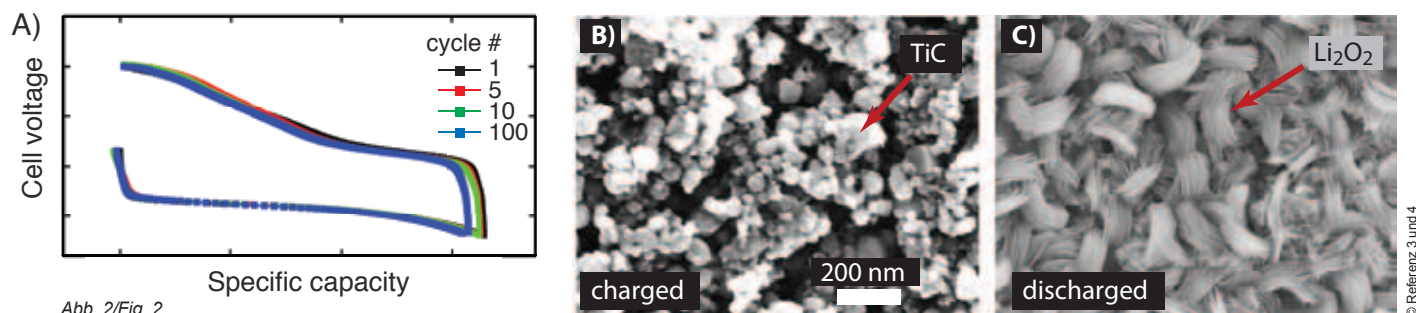


Abb. 2/Fig. 2

Elektrode, die zu Nebenreaktionen und Lebensdauerproblemen führen können, und die bisher ungenügende Ratenfähigkeit, d. h. Entladeleistung und Wiederaufladezeit. Diese Punkte werden in unserer aktuellen Forschung bearbeitet, wobei jüngste Highlights in Abb. 2 zusammengefasst sind.<sup>3,4,5</sup> Hoch korrosionsfeste Elektrodenmaterialien und verbesserte Elektrolyten erlauben Zyklisierbarkeit mit sehr hoher Kapazitätserhaltung.<sup>3,4</sup> Kürzlich konnten wir auch ein neues Ladungsträgerkonzept vorstellen, das massiv verkürzte Ladezeiten und verbesserte Energieeffizienz erlaubt.<sup>5</sup>

Trotz der mit den neuen Batteriereaktionen verbundenen Schwierigkeiten werden nur solche neuen Batterien die Bedürfnisse der Gesellschaft an Energiespeicherung erfüllen können. Mit entsprechendem Engagement kann Batterieforschung an der TU Graz hier an vorderster Front sein. ■

charging. While the principal possibility to electrochemically form and decompose Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in non-aqueous electrolytes is well established, many challenges remain towards practical application. These include stability issues of the electrolyte and the porous electrode that lead to side reactions and compromised cyclability. Moreover, the rate capability is typically too low for practical requirements. All these topics are being considered in current research with recent highlights shown in Fig. 2.<sup>3,4,5</sup> Using highly corrosion resistant electrode material and an improved electrolyte cyclability over many cycles at very high capacity retention was achieved.<sup>3,4</sup> Recently, we introduced a new charge transport concept that allows for greatly improved high rate capability and energy efficiency.<sup>5</sup>

Despite the difficulties, our society needs energy storage that may only be achieved with new battery chemistries. With the appropriate dedication Graz University of Technology's research may be in the forefront of this important field. ■

Abb. 2:

- a) Zellspannung während des Entladens und Ladens einer Li-O<sub>2</sub>-Batterie, die sehr gute Kapazitätserhaltung während wiederholter Zyklen zeigt.<sup>3</sup>
- b) Elektronenmikroskopische Aufnahme einer geladenen Titancarbid-basierten Elektrode.
- c) Dieselbe Elektrode nach der Entladung mit eingelagertem Lithiumperoxid.<sup>4</sup>

Fig. 2:

- a) Cell voltage upon discharge and then charge of a Li-O<sub>2</sub> battery as a function of capacity, shown for a number of cycles with very good capacity retention on cycling.<sup>3</sup>
- b) Electron micrograph showing a titanium carbide based cathode in the charged state.
- c) The same electrode in the discharged state showing Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.<sup>4</sup>

#### Literatur/References:

<sup>1</sup> N.-S. Choi, Z. Chen, S. A. Freunberger, et al., Challenges Facing Lithium Batteries and Electrical Double-Layer Capacitors. *Angew. Chem.* 51, 9994 (2012).

<sup>2</sup> P. G. Bruce, S. A. Freunberger, L. J. Hardwick, J.-M. Tarascon, Li-O<sub>2</sub> and Li-S batteries with high energy storage. *Nature Mater.* 11, 19 (2012).

<sup>3</sup> Z. Peng, S. A. Freunberger, Y. Chen, P. G. Bruce, A Reversible and Higher-Rate Li-O<sub>2</sub> Battery. *Science* 337, 563 (2012).

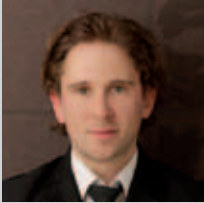
<sup>4</sup> M. M. Ottakam Thotiyil, S. A. Freunberger, Z. Peng, Y. Chen, Z. Liu, P. G. Bruce, A stable cathode for the aprotic Li-O<sub>2</sub> battery. *Nature Mater.* 12, 1050 (2013).

<sup>5</sup> Y. Chen, S. A. Freunberger, Z. Peng, O. Fontaine, P. G. Bruce, Charging a Li-O<sub>2</sub> battery using a redox mediator. *Nature Chem.* 5, 489 (2013).

# Funktionelle Nanostrukturen mittels fokussierter Elektronenstrahlen

## Functional Nanostructures via Focused Electron Beams

Harald Plank



**Während funktionelle Nanostrukturen einen essenziellen Teil moderner Technologie darstellen, ist die Herstellung derartiger Strukturen eine immer größer werdende Herausforderung. Die Verwendung von fokussierten Elektronenstrahlen ist in diesem Kontext ein Spezialbereich, welcher gegenwärtig die Wege von der Grundlagenforschung hin zur Applikation durchlebt.**

**While functional nanostructures represent an essential part of modern technology, the fabrication of such structures is an increasing challenge. In this context, the application of focused electron beams is a special field which is currently undergoing a transition from fundamental research to applications.**

Harald Plank ist Senior Scientist am Institut für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik, an welchem er die Arbeitsgruppe S<sup>3</sup> für fokussierte Ionenstrahlen (FIB) und Rasterkraftmikroskopie (AFM) leitet. Seine Forschungsinteressen liegen im Bereich der Grundlagenforschung und deren anwendungsorientierter Umsetzung in Hinblick auf elektronenstrahlinduzierte Abscheidung sowie der fokussierten Ionenstrahlprozessierung von weichen Materialien.

Seit der Einführung des ersten Rasterelektronenmikroskops („scanning electron microscope“, SEM) 1965 hat sich diese Technologie als essenzielles Analyseinstrument in Forschung und Entwicklung etabliert. Die Verwendung von Elektronen als untersuchende Partikel ermöglicht enorm hohe laterale Auflösungen bis hin in den Sub-Nanometer-Bereich. Obwohl die kontinuierliche Weiterentwicklung zu einer sehr hohen Evolutionsstufe geführt hat, behielten SEMs den Status einer analytischen Methode zur Charakterisierung von Oberflächen und deren Eigenschaften. Dies änderte sich durch die Einführung von sogenannten Zweistrahlmikroskopen („dual beam microscope“, DBM), welche über ein zusätzliches Ionenmikroskop verfügten. Die Verwendung eines fein fokussierten Ionenstrahls eröffnete eine Vielzahl neuer Möglichkeiten von der 3-D-Oberflächenstrukturierung über die analytische 3-D-Rekonstruktion bis hin zur Präparation von ultradünnen Lamellen für die Transmissionselektronenmikroskopie. Ursprünglich als notwendige Zusatzoption gedacht, wurden DBMs mit Gasinjektionssystemen ausgestattet, welche die Abscheidung von leitfähigen oder isolierenden Schichten ermöglichten (Schutzschichten, Lamellenfixierung, elektrische Verbindung bzw. Isolation). Im Zusammenspiel mit den massereichen und dadurch hochenergetischen Ionen ergeben sich jedoch massive Probleme hinsichtlich Materialabtrags, lokaler Temperaturen sowie Implan-

Since the introduction of the first scanning electron microscope (SEM) in 1965 this technology has been established as essential analytical instrument in science and technology. Using electrons as probing particles allows enormous lateral resolutions down to the sub-nm range. Although the continuous development led to a very high evolution state, the status of SEMs as analytical microscope for the characterization of surfaces and its properties remained the same. This changed with the introduction of so-called dual beam microscopes (DBM) providing an additional ion beam microscope. The use of a finely focused ion beam enabled a variety of new possibilities, such as 3D surface structuring, analytical 3D reconstruction and the preparation of ultrathin lamellas for transmission electron microscopy. Originally intended as required add-on, such DBMs have been equipped with gas injection systems, which allowed the deposition of conducting or insulating layers (protection layers, lamella fixation, electrical connections or insulation). Together with the high mass of the used ions and the entailed high-particle energy, crucial problems occurred regarding material removal, local temperatures and ion implantation. In contrast, electrons do not show any of these drawbacks but provide even higher lateral resolution which established the field of focused electron beam induced deposition (FEBID) about 10 years ago. This technique

Harald Plank is a senior scientist at the Institute for Electron Microscopy and Nanoanalysis where he coordinates the workgroup S<sup>3</sup> for Focused Ion Beams (FIB) and Atomic Force Microscopy (AFM). His research interests are fundamental research and its application-oriented implementation concerning electron beam induced deposition and focused ion beam processing of soft materials.

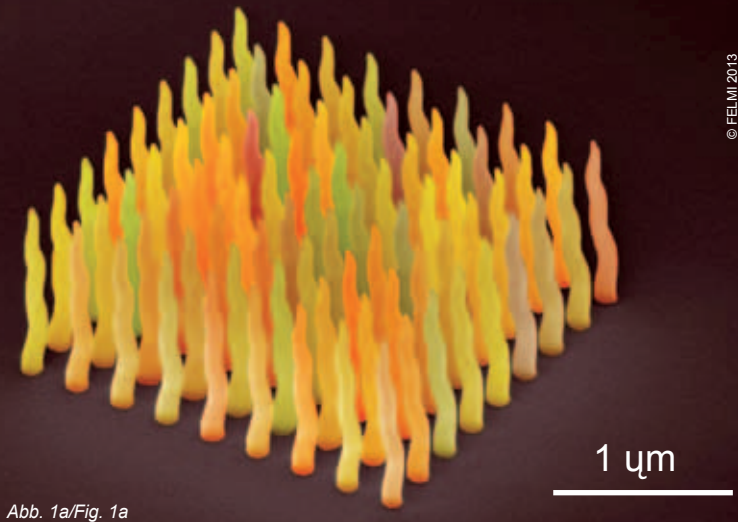


Abb. 1a/Fig. 1a

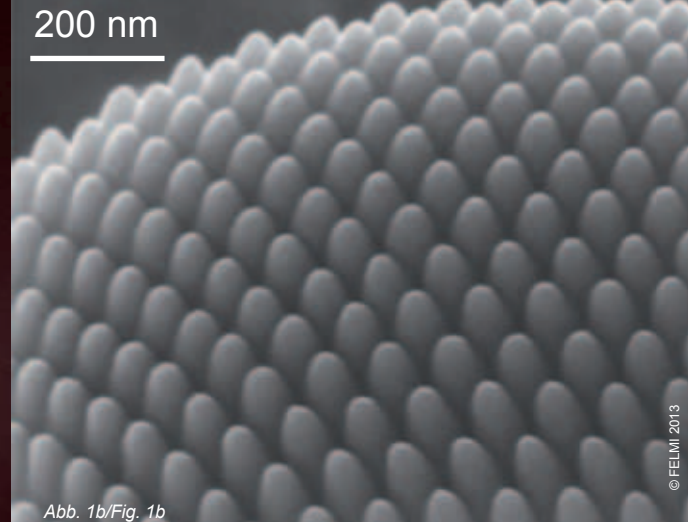


Abb. 1b/Fig. 1b

tation der verwendeten Ionen. Im Gegensatz dazu zeigen Elektronen keinen dieser Nachteile, weshalb vor etwas mehr als 10 Jahren die Methode „Abscheidung mittels fokussierter Elektronenstrahlen“ („focused electron beam induced deposition“, FEBID) entwickelt wurde. Bei dieser Technik werden funktionelle Moleküle in den Gaszustand gebracht und danach in die DBM-Probenkammer geleitet, wo sie an der Oberfläche adsorbieren, diffundieren und wieder desorbieren. Interagiert der Elektronenstrahl während der Diffusionsphase mit den Vorläufermolekülen (Precursor), werden diese in einen immobilisierten und einen flüchtigen Teil dissoziiert, welcher aus der Probenkammer abgepumpt wird. Durch die hochpräzise Kontrolle des Elektronenstrahls hinsichtlich Bewegung und lokaler Verweildauer ist es dadurch möglich, funktionelle 3-D-Strukturen selbst auf unebenen Oberflächen zu erzeugen (Abb. 1). Im Vergleich zu anderen Herstellungstechniken hat FEBID den Vorteil, dass weder eine Probenvorbereitung noch eine Nachprozessierung notwendig ist. Die Verwendung unterschiedlicher Precursor-Moleküle ermöglicht dabei die Herstellung von (halb-)leitenden, isolierenden oder magnetischen Strukturen mit Auflösungen im Sub-10-nm-Bereich. Durch die Fähigkeit, selbst komplexe Strukturen direkt zu „schreiben“ und gegebenenfalls sehr schnell auf notwendige Anpassungen der Prototypen zu reagieren, mutieren derartige Elektronenmikroskope zu Nanolaboren, in denen funktionelle Strukturen und sogar entsprechende Bauteile direkt erzeugt und charakterisiert werden können.

#### Von den Grundlagen zur Applikation

Durch den Aufbau eines der weltweit ersten DBMs am Institut für Elektronenmikroskopie (FELMI) vor 10 Jahren entwickelte sich ein starker Fokus auf dem FEBID-Grundlagenaspekt. Im Detail versucht die Arbeitsgruppe S<sup>3</sup> Struktur,

uses functional molecules in the gaseous state which are injected into the DBM vacuum chamber where they adsorb, diffuse and desorb again from the surface. The interaction between electron beam and precursor molecules during the diffusion state leads to chemical dissociation into immobilized and volatile products which are pumped away from the chamber. Due to the highly precise control of the electron beam regarding movement and local dwell time it is possible to create functional 3D nanostructures even on non-flat surfaces (Fig. 1). Compared to other techniques FEBID has the advantage that the samples do not require pre- or post-treatments. The application of different precursor molecules allows the fabrication of (semi-)conducting, insulating or magnetic structures with resolutions in the sub-10 nm range. Due to the capability of “writing” even complex structures in a direct way together with the possibility to react to required adaptations rapidly gives such electron microscopes the status of nanolabs in which functional structures and even full devices can be fabricated and characterized.

#### From fundamentals to applications

Due to the installation of one of the first DBMs at the Institute for Electron Microscopy (FELMI) 10 years ago, a strong focus on fundamental FEBID research has developed. In detail, the work group S<sup>3</sup> tries to understand structure, chemistry and functionality of the fabricated (nano)structures in order to manipulate them specifically afterwards. An essential detail is the incorporated carbon as the result of incompletely dissociated precursor molecules. While most scientific work groups tried to eliminate this carbon content, FELMI scientists developed an idea to use this carbon advantageously since e.g. FEBID-based Pt structures represent a defined metal-

**Abb. 1a: Frei stehende Pt-C-Nanostrukturen mit Durchmessern unter 100 nm auf SiO<sub>2</sub>, hergestellt mittels FEBID (nachkolorierte Rasterelektronenaufnahme in gekipptem Zustand).**

*Fig. 1a: Free-standing Pt-C nanostructures with diameters of less than 100 nm fabricated on SiO<sub>2</sub> via FEBID (post-coloured scanning electron microscopy image in tilted view).*

**Abb. 1b: 3-dimensionale Pt-C-Strukturen auf einer gekrümmten Oberfläche, welche mit alternativen Herstellungsmethoden nur sehr schwer realisierbar sind (Rasterelektronenaufnahme in gekipptem Zustand).**

*Fig. 1b: 3-dimensional Pt-C structures on a curved surface which is very complicated to achieve via alternative fabrication methods nm (scanning electron microscopy image in tilted view).*



200 nm



Abb. 1c/ Fig. 1c

Abb. 1c: Frei stehende, FEBID-basierte 3-D-Struktur, welche Durchmesser bis etwa 50 nm erlaubt (Rasterelektronenaufnahme in gekipptem Zustand).

Fig. 1c: Free-standing, FEBID-based 3-D structure allowing diameters down to about 50 nm (scanning electron microscopy image in tilted view).

Abb. 2: FEBID-basierter Gassensor auf Pt-Basis mit einer Schichtdicke von 20 nm (links, rasterkraftmikroskopische Aufnahme). Der große Vorteil der Herstellungsmethode ist die direkte Fabrikation einer definierten Metallmatrix-Struktur, welche aus rund 2 nm großen Pt-Kristallen besteht, die in einer isolierenden Kohlenstoffmatrix eingebettet sind (rechts, transmissionselektronenmikroskopische Aufnahme).

Fig. 2: FEBID-based gas sensor using Pt precursor with a layer thickness of 20 nm (left, atomic force microscopy image). The big advantage of this method is the direct write fabrication of a defined metal-matrix structure, consisting of ~ 2 nm Pt crystals which are embedded in an insulating carbon matrix (right, transmission electron microscopy image).

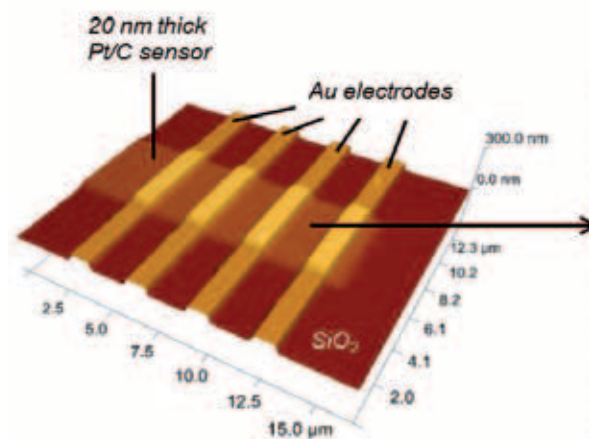
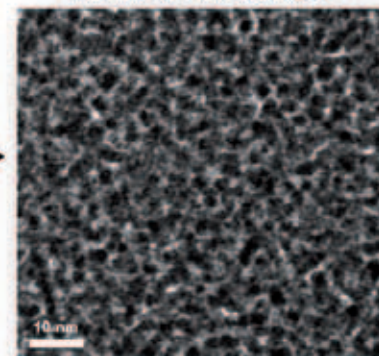


Abb. 2/ Fig. 2

Chemie und Funktionalität der hergestellten (Nano-)Strukturen zu verstehen, um sie danach gezielt zu verändern. Ein wesentlicher Punkt ist der implantierte Kohlenstoff, welcher sich teils über unvollständig dissoziierte Precursor-Moleküle in den Abscheidungen einbindet. Während die meisten Forschungsgruppen versuchten, diesen Kohlenstoff zu eliminieren, hat sich am FELMI die Idee entwickelt, diesen Kohlenstoff als Vorteil zu nutzen, da beispielsweise FEBID-basierte Platin-Strukturen ein definiertes Metallmatrix-System darstellen, in welchem rund 2 Nanometer Pt-Kristalle in einer isolierenden Kohlenstoff-Matrix dicht eingebettet sind (Abb. 2). Basierend auf der vorangegangenen Grundlagenforschung war es dadurch möglich, ein Konzept zu erarbeiten, welches die Kohlenstoffmatrix als Vermittler zwischen makroskopischer elektrischer Leitfähigkeit und oberflächenabsorbierten Molekülen verwendet. Dadurch erhält man einen schnellen, reversiblen und quantitativen Sensor für polare Gasmoleküle. Durch den FEBID-Ansatz reicht ein einzelner Fabrikationsschritt ohne jegliche Vor- oder Nachprozessierung. Durch erneute Investitionen zu Beginn des Jahres 2013, welche wie schon vor 10 Jahren durch die TU Graz unterstützt wurden, sind gegenwärtig weitere sensorische Konzepte in Entwicklung, welche versuchen, eine innovative Brücke zwischen Grundlagenforschung und Applikation zu schlagen. ■

sensor nanostructure:  
2 nm Pt grains (dark) embedded  
in a carbon matrix (bright)



© FELMI 2013

matrix system in which ~ 2 nm Pt crystals are densely embedded in a carbon matrix (Fig. 2). Based on previous fundamental research it was possible to develop a concept in which the carbon matrix acts as transducer between macroscopic electrical conductivity and surface-adsorbed molecules. By that one obtains a fast, reversible and quantitative sensor for polar molecules. Due to the advantages of FEBID only a single fabrication step is needed without any pre- or post-treatment. Based on further investigations, again supported by Graz University of Technology at the beginning of 2013, new sensing concepts are currently in development ranging from fundamental research to application. ■

#### Literatur/References:

H. Plank, D. A. Smith, T. Haber, P. D. Rack, F. Hofer, *Fundamental Proximity Effects in Focused Electron Beam Induced Deposition*. ACS Nano, 6, 1, 286, 2012.

H. Plank, G. Kothleitner, F. Hofer, S. G. Michelitsch, C. Gspan, A. Hohenau, J. Krenn, J. Vac, *Optimization of postgrowth electron-beam curing for focused electron-beam-induced Pt deposits*. Sci. Tech. B, 29, 051801, 2011.

H. Plank, T. Haber, C. Gspan, G. Kothleitner, F. Hofer, *Chemical tuning of PtC nanostructures fabricated via focused electron beam induced deposition*. Nanotechnology, 24, 1753052013, 2013.

F. Kolb, K. Schmoltner, M. Huth, A. Hohenau, J. Krenn, A. Klug, E. J. W. List, H. Plank, *Variable tunneling barriers in FEBID based PtC metal-matrix nanocomposites as transducing element for humidity sensing*. Nanotechnology, 24, 305501, 2013.

# Die NanoTecCenter Weiz Forschungsgesellschaft mbH –

Nanotechnologie, gedruckte Elektronik, Rapid Prototyping, Smart System Integration und Sensorik

# The NanoTecCenter Weiz Forschungsgesellschaft mbH –

Nanotechnology, Printed Electronics, Rapid Prototyping, Smart System Integration and Sensor Technology

Emil J. W. List-Kratochvil, Andreas Klug

**Die NanoTecCenter Weiz (NTCW) Forschungsgesellschaft mbH wurde 2006 als Tochter der TU Graz sowie der JOANNEUM RESEARCH Forschungsgesellschaft mbH gegründet und ist mittlerweile als erfolgreiche gemeinnützige außeruniversitäre Forschungseinrichtung für Nanotechnologie, gedruckte Elektronik, Rapid Prototyping, Smart System Integration und Sensorik weit über die Grenzen des Landes hinaus bekannt. Erfolgsfaktor ist neben dem hochmotivierten Team eine auf dem neuesten Stand der Technik befindliche F&E-Infrastruktur.**

## Nachhaltige Schlüsseltechnologien

Neue energiesparende, effiziente und kostengünstige Verarbeitungstechnologien wie z. B. Tintenstrahldruck, 3-D-Druck und andere Mikro- und Nanostrukturierungsmethoden zur Herstellung und intelligenten Integration von Bauelementen werden in naher Zukunft sehr interessante Möglichkeiten für industrielle Anwendungen molekularer Materialien eröffnen. Durch die Zuhilfenahme dieser neuen Technologien gelingt es, die Gesamtprozesskosten bei der Herstellung von elektronischen Applikationen zu senken, weil Produktionsschritte wie das Bestücken und Einlöten von Bauelementen entfallen, da die Bauelemente direkt durch Drucken oder Stempeln aufgebracht werden. Weiters kommt es zu einer drastischen Reduktion der benötigten Material-Ressourcen im Sinne des Nachhaltigkeitskonzepts, eines der Zukunftskonzepte neben der Anwendung zahlreicher Schlüsseltechnologien, denen sich die NTCW Forschungsgesellschaft mbH verschrieben hat. Das primäre Ziel der Forschungseinrichtung ist es, durch die Entwicklung und die Kombination von elektroaktiven Materialien mit geeigneten Strukturierungs- und Prozessierungsmethoden Anwendungen im Bereich der Sensorik, Photo-

**The NanoTecCenter Weiz (NTCW) Forschungsgesellschaft mbH was founded in 2006, as a subsidiary of Graz University of Technology and JOANNEUM RESEARCH Forschungsgesellschaft mbH, and is nowadays known as a successful non-profit research center for nanotechnology, printed electronics, rapid prototyping, smart system integration and sensors, far beyond the borders of the country. Success factors are, amongst others, the highly motivated team and the state-of-the-art R&D infrastructure.**

## Sustainable key enabling technologies

New, energy-saving, efficient and cost-effective processing technologies such as inkjet printing, 3D- printing and other micro- and nano-structuring methods for the production and integration of intelligent components will be opening very interesting possibilities for industrial applications of molecular materials in the near future. The use of these novel technologies will reduce overall costs in the production of electronic applications because production steps, such as assembling and soldering of components, are not necessary since the components are directly applied by printing or stamping. In addition, this leads to a drastic reduction of the required material resources in accordance with the "sustainability concept", one of the future concepts the NTCW has committed itself to, aside from the application of several "key enabling technologies". The primary goal of the research center is to develop scientific, technological and industrial applications in the fields of sensor technology, photovoltaics and optoelectronics through the development and combination of electroactive materials using appropriate structuring and processing methods.



Emil J. W. List-Kratochvil ist außerordentlicher Universitätsprofessor am Institut für Festkörperphysik an der TU Graz und Scientific Managing Director an der NTCW Forschungsgesellschaft mbH. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Struktur-Eigenschaftsbeziehungen von organischen Halbleitern, Bauelement-Herstellung und -Charakterisierung sowie Advanced Manufacturing Technologies, insbesondere Tintenstrahldruck.

Emil J. W. List-Kratochvil is associate professor at the Institute of Solid State Physics, Graz University of Technology and scientific managing director at NTCW. His research interests include structure-property relationships of organic semiconductors, device fabrication and characterization, and advanced manufacturing technologies, particularly ink-jet printing.

Abb. 1: Modulare Pilot- und Demonstrationsanlage mit Glove-Box-Cluster für Dünnschicht im ISO-zertifizierten Reinraum der NTCW sowie industrielle 2-D- und 3-D-Inkjet-Druck-Systeme.



Fig. 1: Modular pilot and demonstration plant with glove box cluster for thin film coating in ISO certified cleanroom of NTCW and industrial 2D and 3D inkjet printing systems.

Abb. 1/ Fig. 1

voltaik und Optoelektronik wissenschaftlich, technologisch und wirtschaftlich zu erschließen.

### Organische Halbleiter, gedruckte Elektronik und Sensorik

Für industrielle Applikationen bieten insbesondere organische Halbleiter aufgrund ihrer Eigenschaften und der Verfügbarkeit von kostengünstigen Verarbeitungstechniken interessante Möglichkeiten. Durch das chemische Anfügen von Seitenketten können konjugierte Moleküle löslich gemacht und so aus Lösungen verarbeitet werden. Dies führte vollständig oder zumindest teilweise mittels Tintenstrahldruck zu einer realisierten Herstellung vieler, in der Elektronik gebräuchlicher (opto-)elektronischer Bauelemente, wie z. B. organischer Feldeffekt-Transistoren (OFET), Leuchtdioden (OLED) oder Solarzellen (OPV). Darüber hinaus können mit diesen Halbleitern beinahe alle Typen von Sensoren (z. B. für Gase, Ionen, biologische Substanzen) realisiert werden. Im Vergleich zu ihren anorganischen Pendanten besitzen sie den Vorteil, dass ihre elektrischen und optischen Eigenschaften weitgehend durch die Struktur der Moleküle bestimmt sind. Durch den gezielten Einbau entsprechender funktioneller Gruppen können damit die chemischen und physikalischen Materialeigenschaften maßgeschneidert und so an die verschiedenen Sensoranforderungen (z. B. Sensitivität, Selektivität) angepasst werden. Dies ermöglicht in Kombination mit der einfachen Prozessierbarkeit die kostengünstige Herstellung moderner, intelligenter, flexibler Sensoren etwa für Gesundheitsdiagnostik, Raumklima- und Arbeitsplatzüberwachung oder Sicherheit. In diesem Zusammenhang ist es kürzlich im Rahmen des Projekts BioOFET 2 gelungen, mit einem neuartigen OFET-basierenden Ionensensor sehr kleine Konzentrationen von biomedizinisch relevanten Natrium-Ionen in wässrigen Medien

### Organic semiconductors, printed electronics and sensor technology

For industrial applications, in particular organic semiconductors provide interesting possibilities due to their characteristics and the availability of low-cost processing techniques. By the chemical attachment of side chains, conjugated molecules can be solubilized and thus processed from solution. This has resulted in the completely or at least partly ink-jet printed fabrication of many (opto-)electronic components commonly used in electronics, such as organic field-effect transistors (OFETs), light emitting diodes (OLEDs) and solar cells (OPV). In addition, almost all types of sensors (e.g. for gases, ions, and biological substances) can be realized with these semiconductors. Compared to their inorganic counterparts, they have the advantage that their electrical and optical properties are largely determined by the structure of the molecules. Consequently, by the selective incorporation of appropriate functional groups, the chemical and physical material properties can be tailored and thus adapted to the various sensor needs (e.g. sensitivity, selectivity). This allows, in combination with the ease of processability, the cost-effective production of advanced, intelligent, flexible sensors e.g. for health diagnostics, climate and workplace monitoring or security. In this context, in the BioOFET 2 project, we have recently succeeded in detecting selectively very small concentrations of biomedically important sodium ions in aqueous media using a novel OFET-based ion sensor. The work was published in the renowned journal "Advanced Materials".<sup>1</sup>

### Smart system integration and cooperation

Such sensors also provide ideal conditions for their integration with already existing, silicon chip-based RFID technology for wireless trans-



Andreas Klug ist stellvertretender F&E-Leiter an der NTCW Forschungsgesellschaft mbH. Er promovierte am Institut für Festkörperphysik der TU Graz zum Thema „Organische Feldeffekt-Transistoren – Prozessentwicklung, Stabilitätsaspekte und Sensoranwendungen“. Seine Forschungsinteressen liegen im Bereich der Gas- und Biosensorik sowie in der Smart System Integration. Außerdem macht er derzeit eine „Executive MBA“-Ausbildung in Wien und Minneapolis, USA.

Andreas Klug is deputy director of R&D at NTCW. He earned his doctorate at the Institute of Solid State Physics, Graz University of Technology on "Organic Field-Effect Transistors - Process Development, Stability Issues and Sensor Applications". His research interests are in the field of gas and biosensors as well as in Smart System Integration. In addition, he is currently doing an executive MBA education in Vienna and Minneapolis, USA.



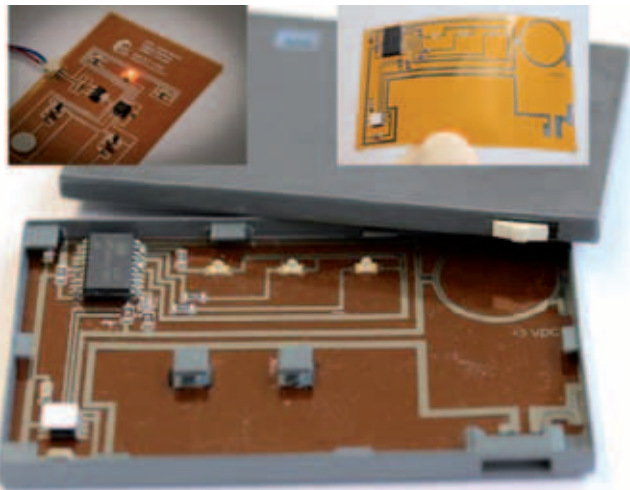


Abb. 2/ Fig. 2

© NTCW

selektiv zu detektieren. Die Arbeit wurde im renommierten Fachjournal „Advanced Materials“ veröffentlicht.<sup>1</sup>

### Smarte System-Integration und Kooperation

Derartige Sensoren bieten außerdem ideale Voraussetzungen zur Integration mit bereits bestehender, auf Silizium-Chip basierender RFID-Technologie zur drahtlosen Übermittlung bzw. Aufzeichnung von Messdaten in Sensor-Labels bzw. RF-Sensor Tags. Nicht zuletzt deshalb stellt auch der Druck von nanopartikulären Silber-, Kupfer- und Silizium-Tintensystemen ein wesentliches und hochaktuelles Forschungsgebiet an der NTCW Forschungsgesellschaft mbH dar. Neben der (3-D-)Integration von gedruckten Bauelementen und ICs in smarte Systeme werden dabei auch grundlegende Materialeigenschaften untersucht, mit besonderem Fokus auf Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, Degradationsprozessen und Zuverlässigkeit.

Das Unternehmen pflegt seit seinem Bestehen zahlreiche Kooperationen mit nationalen und internationalen Partnerinnen und Partnern aus Wissenschaft und Wirtschaft, insbesondere mit den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern der Gesellschafter TU Graz und JOANNEUM RESEARCH. Nicht nur in nationalen Förderprojekten, auch in EU-Projekten des 7. Rahmenprogramms (z. B. HYMEC, PLASMAS, COLAE) tritt die NTCW Forschungsgesellschaft mbH als technische Koordinatorin und Partnerin auf. ■

#### Literatur/References:

<sup>1</sup> Kerstin Schmoltner, Johannes Kofler, Andreas Klug, Emil J. W. List-Kratochvil: Electrolyte-Gated Organic Field-Effect Transistor for Selective Reversible Ion Detection, *Advanced Materials* 2013, DOI: 10.1002/adma.201303281.



Abb. 3/ Fig. 3

© NTCW

mission and recording of measurement data in sensor labels or RF sensor tags. This is one of the main reasons why printing nanoparticulate silver, copper and silicon ink systems is an essential and cutting-edge field of research at NTCW. Apart from the (3D-)integration of printed components and ICs for smart systems, fundamental material properties are also examined, with special focus on structure-property relationships, device degradation and reliability.

Since it was founded the company has maintained numerous collaborations with national and international partners from science and industry, especially with scientists of the shareholders Graz University of Technology and JOANNEUM RESEARCH. NTCW has assumed the role of technical coordinator and partner not only in national research projects, but also in EU projects of the 7th Framework Programme (e.g. HYMEC, PLASMAS, COLAE). ■

Abb. 2: Sensor-Label-Demonstratoren mit inkjet-gedruckten Leiterbahnen auf flexiblen Substraten und 3-D-gedrucktem Gehäuse.

Fig. 2: Sensor-label demonstrators with inkjet-printed conductors on flexible substrates and 3D-printed housing.

Abb. 3: 3-D-gedruckte Probenkammer für Ionensensor, basierend auf einem organischen Feldeffekt-Transistor.

Fig. 3: 3D-printed characterization chamber for ion sensor based on an organic field-effect transistor.

Kontakt/Contact: NanoTecCenter Weiz  
Forschungsgesellschaft mbH  
Franz-Pichler-Straße 32, A-8160 Weiz  
Tel./Phone: +43 316 876 8003  
Fax: +43 316 876 8040  
E-Mail: [ntcw@ntc-weiz.at](mailto:ntcw@ntc-weiz.at)  
Web: [www.ntc-weiz.at](http://www.ntc-weiz.at)

# Das Kompetenznetzwerk für Fügetechnik JOIN4+

## The JOIN4+ Network of Excellence for Joining Technologies

NorbertENZINGER, Christof SOMMITSCH



NorbertENZINGER ist Associate Professor am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik, habilitiert für Schweißtechnik und Schadensanalyse und ist operativer Leiter des K-Projekts JOIN4+.

NorbertENZINGER is associate professor at the Institute for Materials Science and Welding. He habilitated in welding and failure case analysis and is general manager of the K-Project JOIN4+.

**Am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik (IWS) liegt der Forschungsschwerpunkt Schweißtechnik derzeit maßgeblich im durch die FFG geförderten COMET K-Projekt „Kompetenznetzwerk für Fügetechnik JOIN4+“. Insgesamt sind 15 Firmen und sechs Forschungspartnerinnen und -partner an dem Projekt beteiligt. Die Konsortialführung wird vom IWS der TU Graz wahrgenommen.**

Inhaltlich gliedert sich das Projekt in zwei Hauptfelder, und zwar das Fügen moderner Werkstoffe sowie modernes Fügeverfahren und In-situ-Prozessüberwachung. Am IWS liegen die Schwerpunkte in der Untersuchung der mikrostrukturellen Veränderungen infolge angewendeter Schweißprozesse. Dabei kommen experimentelle und numerische Untersuchungsmethoden gleichermaßen und ergänzend zum Einsatz.

### Schweißen hochfester Stähle

Beim Schweißen hochfester Stähle, die z. B. im Kranbau zum Einsatz kommen, kommt es durch die lokale Wärmeeinbringung beim Schweißen zu einer je nach Herstellung des Stahles typischen Aufhärtung und/oder Erweichung in der sogenannten Wärmeeinflusszone. Diese weiche Zone hat starke Auswirkungen auf die Gebrauchseigenschaften des gefertigten Bauteils bei statischer und dynamischer Belastung. Daher ist es von großer praktischer Bedeutung, die Entstehungsmechanismen zu verstehen, um die Entstehung innerhalb zulässiger Grenzen zu kontrollieren. Dazu werden umfangreiche Schweißversuche und physikalische Simulationen durchgeführt. Die entstehende Mikrostruktur wird detailliert analysiert und charakterisiert. Zugleich werden teilweise bestehende mathematische Modelle weiterentwickelt und miteinander verknüpft. Damit ist es möglich, die Vorgänge im Ge-

**The Welding working group at the Institute for Materials Science and Welding (IWS) is at the moment mainly covered by the COMET K-Project Network of Excellence for Joining Technologies JOIN4+, which is funded by the Austrian Research Promotion Agency (FFG). In total 15 company partners and six research partners are involved in the project. The consortium is led by the IWS at Graz University of Technology.**

The research programme is divided into two main research areas: advanced materials joining, advanced joining processes and in-situ process control. At the IWS we focus on the investigation of microstructural changes caused by the welding processes applied. Both experimental and numerical methods are applied to mutually verify the findings.

### Welding of advanced high-strength steels

The welding of advanced high-strength steels, which are used e.g. in crane construction, leads to a typical hardening or softening in the heat-affected zone of the joint, depending on the steel type under consideration, due to local heat input during the welding process. This soft zone significantly influences the service properties of the product under static and fatigue load. Therefore it is of major importance to understand the underlying mechanism so as to control this behaviour and keep the degradation within acceptable limits. For this reason, numerous welding trials and physical simulations have been planned and conducted. The developed microstructure is analysed and characterised in detail. In parallel, some previously known mathematical models have been improved on, properly coupled and applied. Using such models it is possible to numerically simulate microstructural development, thus leading to a better understanding and conse-



Abb. 1: Verwendung der Pins zur Herstellung von Verbindungen zwischen artfremden Werkstoffen.

Fig. 1: Utilization of pins for the production of dissimilar joints.

füge detailliert zu simulieren, zu verstehen und somit die Eigenschaften besser zu kontrollieren. Die beschriebene Materialerweichung kann durch eine gezielte Reduktion der Wärmeeinbringung minimiert werden. Dazu eignet sich ein von Fronius entwickelter Schweißprozess namens Cold Metal Transfer (CMT). Die Weiterentwicklung dieses Prozesses kann für die Herstellung sogenannter Pins verwendet werden. Die Wirkung solcher Pins auf die Herstellung von Kunststoff-Metall-Verbindungen wird im Projekt „Pins“ untersucht. Mithilfe von gezielten Versuchen an einzelnen Pins und ganzen Verbindungen wird ein mechanisches Ersatzmodell erstellt, mit dem unterschiedliche Anordnungen auf ihre statische Festigkeit untersucht werden können.

### Reibschweißen von Ketten

Nach dem Bau einer Prototypanlage zum Reibschweißen von Ketten in einem Vorgängerprojekt werden aktuell grundlegende Untersuchungen durchgeführt. Durch die Anwendung des sehr stabilen Reibschweißprozesses ist es möglich, aus völlig neuen Werkstoffen, die als nicht schweißbar gelten, Ketten mit an die Belastung angepassten Querschnitten zu fertigen. In systematischen Versuchen konnte festgestellt werden, dass die Parameterkombination, die zu den besten Ergebnissen führt, zugleich auch durch die kürzeste Prozesszeit gekennzeichnet ist. Infolge der erarbeiteten Ergebnisse wurde bereits der international angesehene „raiser Innovationspreis Reibschweißen“

quently enabling us to control the final properties. The softening of the materials can be minimised by reducing the heat input. To achieve this, the cold metal transfer (CMT) process developed by Fronius can be utilized. A further development of this process can be used to produce so-called pins. The properties of these pins and their applicability for joining metals to polymers are being investigated in a further project named “Pins”. By special experiments on single pins and on developed joints, a simplified mechanical model can be developed to predict the static strength of a joint depending on the arrangement of different pins.

### Friction welding of chains

Basic research experiments are currently being conducted after a prototype machine for linear friction welding of chains was built in a previous project. By applying this very stable friction welding process, it is possible to produce chains from materials which have been hitherto judged not to be weldable. Furthermore, the cross section can be optimized. In systematic experiments it was found that optimised parameters yielding the highest strength simultaneously led to the shortest processing times. These results have already bagged the internationally recognized “raiser Innovationspreis Reibschweißen” award. At the moment, the design of the first series machine is in progress, and this could lead to a revolution in the chain manufacturing industry in the near future.



Christof Sommitsch leitet das Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik und ist wissenschaftlicher Leiter des K-Projekts JOIN4+. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Werkstoffentwicklung, Fügechnik und Modellierung.

Christof Sommitsch is head of the Institute for Materials Science and Welding and scientific head of the K-Project JOIN4+. His research focuses on materials development, joining technologies, and modeling.



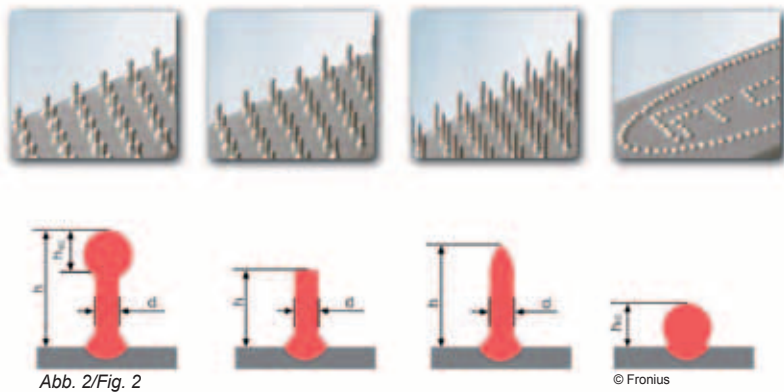


Abb. 2/ Fig. 2

© Fronius

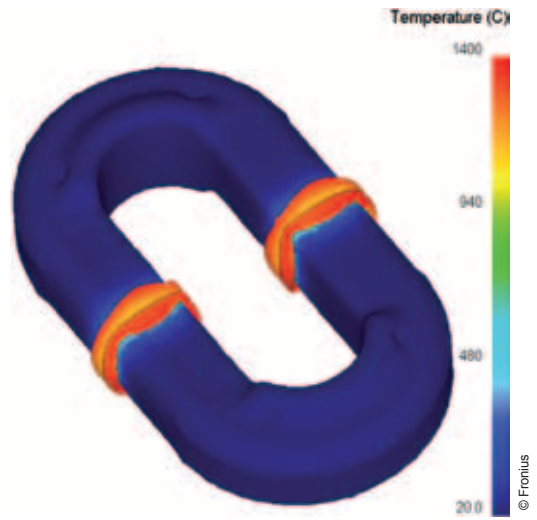


Abb. 3/ Fig. 3

© Fronius

Abb. 2: Verschiedene Pins.

Fig. 2: Different kinds of pins.

Abb. 3: Simulation des Temperaturfeldes beim Reibschweißen von Ketten.

Fig. 3: Simulation of the temperature field during friction welding of chains.

gewonnen und es wird an der ersten serientauglichen Schweißanlage gearbeitet, die in naher Zukunft die Kettenindustrie revolutionieren könnte.

### Kooperationsprojekt mit voestalpine

In einem weiteren Projekt mit der voestalpine Stahl Linz wird untersucht, wie man den Ab-brennstumpfschweißprozess optimieren kann. Ziel ist es, dass geschweißte Profile die geforderten Eigenschaften hinsichtlich Festigkeit und Zähigkeit für den nachfolgenden Umformprozess erhalten. Aus diesen Profilen werden unter anderem sicherheitsrelevante Bauteile für die Automobilindustrie gefertigt. Dazu wird der hochdynamische Prozess in einem komplexen Modell elektrisch, thermisch, mechanisch und metallurgisch gekoppelt berechnet. Die erzielten Ergebnisse werden mithilfe von gezielten Versuchen verifiziert.

Alle Einzelprojekte sind durch die organisierte, aber auch informelle Zusammenarbeit der beteiligten Personen sehr effizient und innovativ. In der Regel werden die Projekte durch Dissertanten operativ durchgeführt. Studierende werden im Rahmen von Bakkalaureats- und Masterarbeiten eingebunden.

Mit dem österreichweiten K-Projekt Kompetenznetzwerk für Fügetechnik JOIN4+ ist es gelungen, wesentliche Akteurinnen und Akteure im Rahmen der Fügetechnik in Österreich in einem Projekt zu vereinen und gemeinsam an aktuellen und herausfordernden Fragestellungen der Fügetechnik auf hohem wissenschaftlichem Niveau zu arbeiten. Dieses internationale Vorzeigeprojekt erhöht maßgeblich die Sichtbarkeit der österreichischen Forschung in der Fügetechnik und findet weit über die Grenzen hinaus Anerkennung. ■

### Cooperation project with Voestalpine

A further project with Voestalpine Linz as the main partner is focusing on the optimisation of the flush butt welding process. The main goal is to maximise not only strength but also ductility of the welded profiles, which is essential for the subsequent forming processes. Among other uses, these profiles are used for safety components in the automotive industry. This highly dynamic process is being numerically simulated in a complex electric, thermal, mechanical and metallurgical coupled model. The obtained results are verified by means of specially designed experiments.

All the single projects are being carried out together within an organized framework as well as informally by the involved persons and are thus highly efficient and innovative. Typically the projects are run by PhD students. Students in the course of their bachelor's or master's theses are also involved in the projects.

In this Austrian K-Project network of excellence for joining technologies JOIN4+, we successfully brought together the important Austrian actors in the field of welding in one project to work on current and challenging topics in welding technology at a high scientific level. This successful approach has garnered widespread international recognition for Austrian research into joining technology. ■

# Chemische Gasphasenabscheidung für technologische Anwendungen

## Chemical Vapor Deposition for Technological Applications

Anna Maria Coclite

**Methoden der chemischen Gasphasenabscheidung („chemical vapor deposition“, CVD) wurden kürzlich am Institut für Festkörperphysik der TU Graz eingeführt, um das breit gefächerte FoE „Advanced Materials Science“ zu ergänzen. Die Mikrofabrikationstechnologie profitiert stark von der CVD dünner Filme auf unterschiedlichen Materialien, die für neuartige Geräte-Applikationen wie flexible Optoelektronik, Sensorik, Mikrofluidik-Geräte und biomedizinische Geräte eingesetzt werden.**

Die Funktionalisierung von festen Oberflächen mit einer Dünnschicht-Beschichtung ist eine leistungsfähige Methode, mit der man die Interaktion des Materials mit der Umwelt ändert, ohne die Bulk-Eigenschaften des Materials wie zum Beispiel Leichtbau und Flexibilität zu beeinträchtigen. Die wünschenswerten Eigenschaften, die durch eine dünne Schichtbeschichtung hinzugesetzt werden können, umfassen Oberflächenenergieänderung, Umweltschutz, elektrische Leitfähigkeit und/oder chemische und biologische Spezifität.<sup>1</sup>

### „Grüne Technologie“

Eine der reproduzierbarsten und skalierbarsten Möglichkeiten, die Oberfläche von Materialien zu verändern, ist CVD. CVD ist eine vakuumbasierte Methode, die es ermöglicht, über eine einfache Änderung der Beschichtungsbedingungen dünne Schichten mit unterschiedlichen Eigenschaften zu erzeugen, wobei die Schichtdicke über den gesamten Film sehr einheitlich ist. CVD gilt als „grüne Technologie“ aufgrund der geringen Menge an Chemikalien (z. B. werden keine Lösungsmittel verwendet) und auch aufgrund der größeren Arbeitssicherheit. In einem einzigen Schritt kann die Dampfphase durch selektive Reaktionen in eine funktionale Beschichtung auf verschiedenen Arten von Substraten umgewandelt

*Chemical Vapor Deposition (CVD) methods have recently been set up at the Institute of Solid State Physics of Graz University of Technology to complement the wide research going on in the FoE Advanced Materials Science. Microfabrication technology strongly benefits from the CVD of thin films on different materials for novel device applications, such as flexible optoelectronics, sensors, microfluidic devices and biomedical devices.*

The functionalization of solid surfaces with a thin film coating is a powerful tool to modify the interaction of the material with the environment, leaving intact the bulk properties of the material (e.g. lightweight, flexibility). The desirable properties that can be added by a thin film coating include surface energy modification, environmental protection, electric conduction and/or chemical and biological specificity.<sup>1</sup>

### “Green technology”

One of the most reproducible and scalable ways to modify the surface of materials is CVD. It is a vacuum-based method that gives the possibility of obtaining films with different functionalities by easily tuning the deposition conditions with control over the coating thickness uniformity at large scale. CVD is considered “green” due to the low amount of chemicals involved (e.g. no solvents are used), and consequent worker safety.

In a single step, vapor-phase precursors can be transformed through selective reactions into functional coatings on different types of substrates. In particular low-temperature CVD techniques allow the modification also of labile and delicate substrates, such as paper, membranes, plastic foils, and fabrics.

We recently built two reactor chambers at the Institute of Solid State Physics (Fig. 1), one for Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition



Anna Maria Coclite ist derzeit Universitätsassistentin mit Doktorat am Institut für Festkörperphysik. 2010 promovierte sie in Chemie an der Università degli Studi di Bari Aldo Moro, Italien, und arbeitete als Postdoc in der Gruppe von Karen K. Gleason am Institut für Chemieingenieurwesen am Massachusetts Institute of Technology. Ihre Forschungsinteressen umfassen die Abscheidung dünner Schichten, Nanotechnologie und Oberflächenanalyse.

Anna Maria Coclite is currently assistant professor at the Institute of Solid State Physics. She received her PhD in Chemical Science from the University of Bari, Italy, in 2010 and worked as postdoctoral associate in Karen K. Gleason's group at Massachusetts Institute of Technology, Chemical Engineering Department. Her research interests include thin films deposition, nanotechnology, and surface analysis.

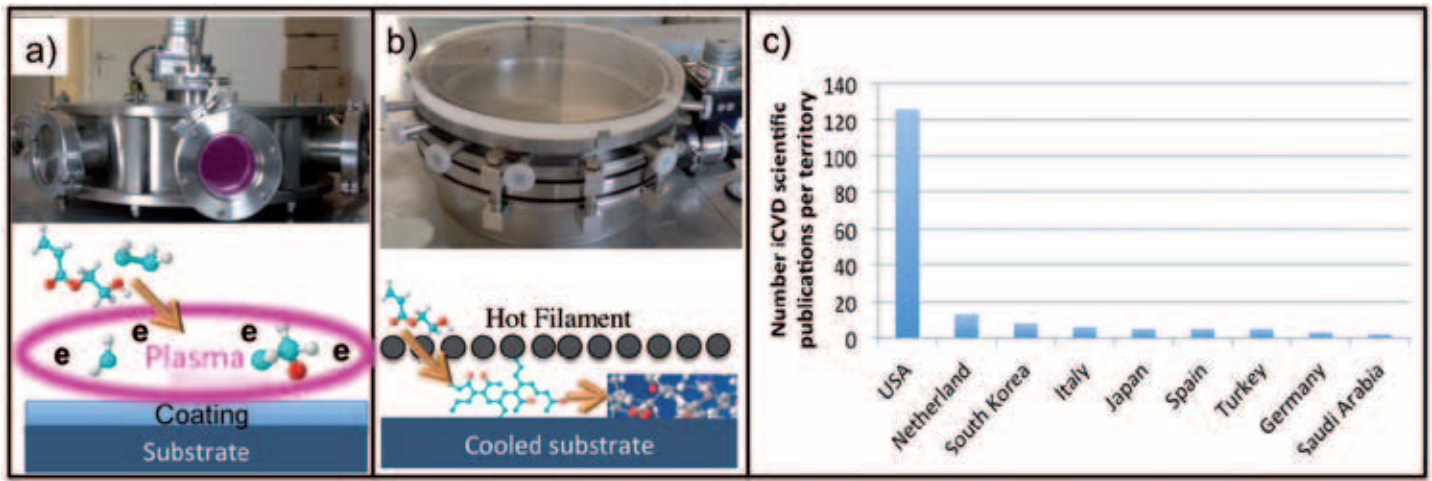


Abb. 1/ Fig. 1

Abb. 1: a) PECVD-Reaktorkammer und schematische Darstellung der Abscheidung. Die Plasmaphase ist aus Elektronen, geladenen Fragmenten und Radikalen aufgebaut, die an der Oberfläche adsorbieren und reagieren, wodurch die Beschichtung entsteht.

b) Bild von der iCVD-Reaktorkammer und schematische Darstellung der Abscheidung. Die Peroxid-Initiatoren fragmentieren mit dem heißen Filament und reagieren mit den Vinyl-Bindungen der Monomermoleküle, die auf der Oberfläche adsorbiert sind.

c) Verteilung der wissenschaftlichen Arbeiten über iCVD nach Gebiet aufgeteilt. Daten aus ISI Web of Knowledge.

werden. Insbesondere Niedertemperatur-CVD-Verfahren ermöglichen die Modifikation von labilen und empfindlichen Substraten, wie Papier, Membranen, Kunststoff-Folien und Textilien. Vor Kurzem haben wir zwei Reaktoren am Institut für Festkörperphysik (Abb. 1) gebaut, einen für das Verfahren „plasma enhanced chemical vapor deposition“ (PECVD) und den anderen für „initiated chemical vapor deposition“ (iCVD). Der PECVD-Prozess basiert auf der Zersetzung der Vorläufer durch Plasmaentladung. Im Plasma kollidieren die Elektronen mit den chemischen Teilen. Die Fragmente (Ionen und Radikale), die durch die elektronischen Kollisionen erzeugt werden, fungieren als Bausteine des Dünnsfilms. Sie adsorbieren auf der festen Oberfläche des Substrats, reagieren und bilden ein Netzwerk.

Die iCVD-Technologie wurde 1996 am Massachusetts Institute of Technology erfunden und seither von vielen anderen Forschungsgruppen (hauptsächlich aus den USA, siehe Abb. 1c) übernommen. Die TU Graz ist eine der wenigen europäischen Forschungseinrichtungen, die diese neue Technologie angenommen hat, und sicherlich die einzige in Österreich.

In iCVD werden die Bausteine durch Zersetzung eines Peroxids bei Temperaturen von 150 bis 300° C erzeugt. Eine Heizdrahtanordnung wird 1 bis 2 cm schwebend über dem Substrat installiert, das auf Raumtemperatur abgekühlt wird. Die reaktiven Fragmente (z. B. Radikale), die durch die Wärme erzeugt werden, reagieren mit den Doppelbindungen der Monomermoleküle, die auf dem Substrat adsorbiert sind, und initiieren das Wachstum der Polymerkette.

PECVD und iCVD sind komplementär einsetzbar und je nach Anwendung kann die eine Methode passender als die andere sein. PECVD ist besser geeignet für die Abscheidung von dichten, vernetzten Schichten bei Zimmertemperatur, bei de-

(PECVD) und eine für initiierte Chemical Vapor Deposition (iCVD). The PECVD process is based on the decomposition of the precursors through a plasma discharge. In the plasma, the electrons collide with the chemical species. The fragments (ions and radicals) generated by the electronic collisions act as building blocks of the thin film: they adsorb on the solid surface of the substrate and react forming a network.

The iCVD technology was invented at the Massachusetts Institute of Technology in 1996 and since then many other research groups (located mainly in the US, see Fig.1c) have adopted this technique. Graz University of Technology is one of the few European research institutions where this emerging technology has been adopted and certainly the only one in Austria.

In iCVD, the building blocks are created by the decomposition of a peroxide at temperatures in the range 150-300°C. A hot filament array is suspended 1-2 cm above the substrate, which is cooled to room temperature. The reactive fragments (i.e. radicals) created by the heat react with the double bonds of the monomer molecules adsorbed on the substrate, initiating the polymer chain growth.

PECVD and iCVD have complementary use and, depending on the application, one can be more appropriate than the other. PECVD is more suitable for the deposition of dense, cross-linked films at room temperature for applications where durable, smooth, and adhesive coatings are required. iCVD is quite valuable for producing functional organic coatings with a higher control than PECVD over the composition of the final product. The coatings deposited by iCVD have shown very good conformality (i.e. capacity for reproducing the original morphology of non-planar substrates with a uniform coating), which is difficult to achieve with other CVD techniques. Fig. 2 shows



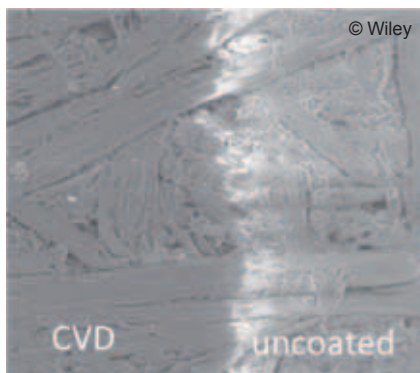


Abb. 2/Fig. 2

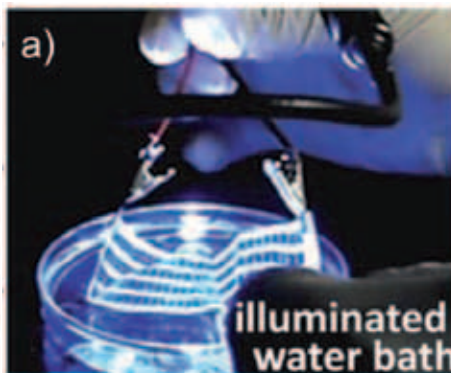
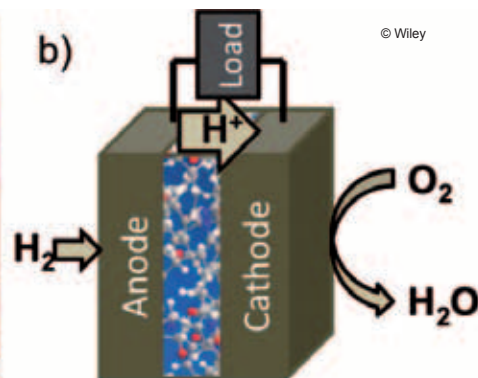


Abb. 3/Fig. 3



nen strapazierfähige, glatte und adhäsive Oberflächen erforderlich sind. iCVD ist sehr nützlich für die Herstellung von funktionellen organischen Schichten mit einer besseren Kontrolle über die chemische Zusammensetzung des Endprodukts als PECVD. Die Beschichtungen von iCVD zeigen sehr gute Konformalität (Fähigkeit, die ursprüngliche Morphologie von nicht ebenen Substraten mit einer gleichmäßigen Beschichtung wiederzugeben), die mit anderen CVD-Techniken nur schwer zu erreichen ist. Abbildung 2 zeigt die konforme Oberflächenmodifizierung von mikro- und nanostrukturierten Oberflächen auf Zeitungspapier.

Einige der Verwendungen von CVD-Beschichtungen sind in Abbildung 3 zu sehen.

### Forschungsergebnisse

Im Rahmen der TU Graz-internen Anschubfinanzierungen für das FoE „Advanced Materials Science“ wurden die ersten Forschungsschritte über die Abscheidung von protonenleitenden Polymeren, die durch iCVD hergestellt werden, finanziert. Protonenleitende Polymere können als Polymer-Elektrolyt-Membran (PEM) für Brennstoffzellen verwendet werden, um Protonen von der Anode, wo die Protonen erzeugt werden, zur Kathode, wo sie bei Reduktion von Sauerstoff zu Wasser verbraucht werden, zu transportieren. Vorläufige Ergebnisse mit CVD-PEM-Membranen haben gezeigt, dass ihre Protonenleitfähigkeit vergleichbar ist mit der Leitfähigkeit kommerzieller Membranen. Unser Ziel ist es, durch weitere Optimierung der CVD-PEM-Membranen eine kostengünstige Alternative zu derzeitigen kommerziellen Membranen zu erhalten. Aufgrund ihrer Skalierbarkeit kann die CVD-Technologie auch leicht in Fertigungslinien auf industrieller Ebene umgesetzt werden und so die Zusammenarbeit zwischen Wissenschaft und Industrie fördern. ■

the conformal surface modification of micro- and nano- structured surfaces on some newsprint.

### Results of research

Some of the exploited uses of CVD coatings are depicted in Fig. 3. The FoE Advanced Materials Science funded the initial research (start-up funding, first call) on the deposition of proton conductive polymers by iCVD. Proton conductive polymers can be used as polymer electrolyte membranes (PEM) for fuel cells to provide the transport of protons from the anode, where the protons are produced, to the cathode, where they are consumed by reduction with oxygen into water. Preliminary results on CVD-PEM have shown that proton conductivity is comparable to that of commercial membranes. We envision that further optimization of CVD-PEMs can result in a cost-effective alternative to the current commercial membranes.

Finally, due to its scalability, CVD technology can also be easily implemented in production lines at the industrial level and foster the collaboration between academia and industry. ■

### Literatur/References:

<sup>1</sup> G. Ozaydin-Ince, A. M. Coclite, K. K. Gleason, *Rep. Prog. Phys.* 2012, 75, 1–40.

<sup>2</sup> M. C. Barr, J. A. Rowehl, R. R. Lunt, J. J. Xu, A. N. Wang, C. M. Boyce, S. G. Im, V. Bulovic, K. K. Gleason, *Adv. Mater.* 2011, 23, 3500–3505.

Abb. 2: Beschichtung komplexer dreidimensionaler Strukturen kann mit iCVD leicht erreicht werden, wie z. B. die Beschichtung auf Zeitungspapier (Wiedergabe mit Genehmigung aus <sup>2</sup> Wiley, Copyright 2011).

Fig. 2: Coating of complex three-dimensional shapes can easily be achieved by iCVD, e.g. on newsprint (Reproduced with permission from <sup>2</sup> Wiley, Copyright 2011).

Abb. 3: a) Papiersolarzelle mit einer superhydrophoben Beschichtung, die in Wasser eingetaucht funktioniert (Wiedergabe mit Genehmigung aus <sup>2</sup> Wiley, Copyright 2011).

b) Schematische Darstellung einer Brennstoffzelle mit einem protonenleitenden CVD-Polymer als Protonenaustauschmembran.

Fig. 3: a) Paper solar cell encapsulated with a superhydrophobic thin film operates while immersed in water (Reproduced with permission from <sup>2</sup> Wiley, Copyright 2011).

b) Schematic diagram of a fuel cell with a proton conductive CVD polymer as proton exchange membrane.

# Verbesserung der Biokompatibilität von medizinischen Implantaten durch Elektronenstrahl-Oberflächenbehandlung

## Improving the Biocompatibility of Medical Implants using Electron-Beam Surface Treatment

Johannes Tändl, Fernando Warchomicka, Coline Béal, Tarun Goswami, Christof Sommitsch



Johannes Tändl ist seit 2012 am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik tätig. Schwerpunkte seiner Arbeit sind innovative Fügeprozesse und die Entwicklung neuer Werkstoffe.

Johannes Tändl has been at the Institute for Materials Science and Welding since 2012. His work focuses on innovative fusion processes and the development of new materials.



Fernando Warchomicka ist seit 2013 am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik tätig. Der Fokus seiner aktuellen Tätigkeit liegt auf dem Aufbau und der Entwicklung der Forschungsgruppe Biomaterialien.

Fernando Warchomicka has been at the Institute for Materials Science and Welding since 2013. His work focuses on the formation and development of the biomaterials research group.

**Medizinische Implantatwerkstoffe müssen eine Vielzahl an Voraussetzungen erfüllen, um eine entsprechende Biokompatibilität im menschlichen Körper zu erreichen. Die Bioadhäsion, also das Anwachsverhalten des Implantats im Körper, spielt dabei eine wichtige Rolle. Die Verwendung modernster Elektronenstrahlprozesse wird als vielversprechender Ansatz hinsichtlich einer Oberflächenmodifikation und damit einer Optimierung der Gewebsadhärenz gesehen.**

Das Ersetzen vollständiger Gelenke und die Behandlung von Knochenfrakturen mittels Implantaten wurden in den letzten Jahrzehnten in der modernen Medizin zum Stand der Technik. Um diese Behandlungen zu ermöglichen, werden Materialien entwickelt, die in biologischer Umgebung verwendet werden können und mit den lebenden Zellen und dem Gewebe interagieren. Es existieren dabei grundsätzlich zwei Arten von Biomaterialien, nämlich biokompatible und biologisch abbaubare. Biokompatibilität bedeutet im Wesentlichen Korrosionsbeständigkeit im Körper, Bioadhäsion am Interface Mensch-Material sowie Ähnlichkeit zu den mechanischen Eigenschaften des Knochens. Biokompatible Materialien werden für künstliche Gelenke wie zum Beispiel Hüfte, Knie, Knöchel oder Finger verwendet, um die Funktionalität des Skelettsystems zu gewährleisten. Da diese künstlichen Gelenke mit der Zeit verschleissen, müssen sich Patientinnen und Patienten nach 10 bis 15 Jahren einer weiteren Operation unterziehen. Das Entwicklungsziel für derartige Materialien ist daher eine möglichst lange Lebensdauer. Biologisch abbaubare Materialien hingegen lösen sich im Körper nach einiger Zeit auf. Werden diese als Implantatsmaterialien verwendet, unterstützen sie den Knochen bei der Lastaufnahme, lösen sich jedoch auf, sobald der Knochen geheilt ist. Dadurch wird eine weitere Operation zum Entfernen des Implantats vermieden.

**Medical implant materials need to meet various requirements to achieve appropriate biocompatibility in the human body. One important aspect in this context is the bio-adhesion at the human-material interface, which is determined by the ingrowth behavior of the implant in the body. The use of modern electron beam processes is a promising approach to modify the surface of the implants and optimize the tissue adherence.**

In recent decades total joint replacement as well as bone-fracture treatment using implants became state-of-the-art techniques in modern medicine. In order to facilitate these treatments, materials that can be used in a biological environment and interact with the living cells and tissue are being developed. Basically, there are two different types of biomaterials: those which are biocompatible and those which are biodegradable. Biocompatibility essentially refers to corrosion resistance inside the body, bio-adhesion at the human-material interface, and the similarity of mechanical properties to that of the bone. Biocompatible materials are used for artificial joints, for example, hip, knee, ankle, or finger to impart functionality to the skeletal system. Unfortunately, the artificial joints wear out with time and the patient has to return for new surgery every 10 to 15 years or earlier. The development target for such artificial joints, therefore, is to extend the durability as much as possible. Biodegradable materials, on the other hand, dissolve in the human body after a certain time. If used as implant material, for example, they will provide the bone with the support to bear load and once the bone heals, the material will begin to dissolve inside the body. Consequently, additional surgery to remove the implant after rehabilitation is not necessary.



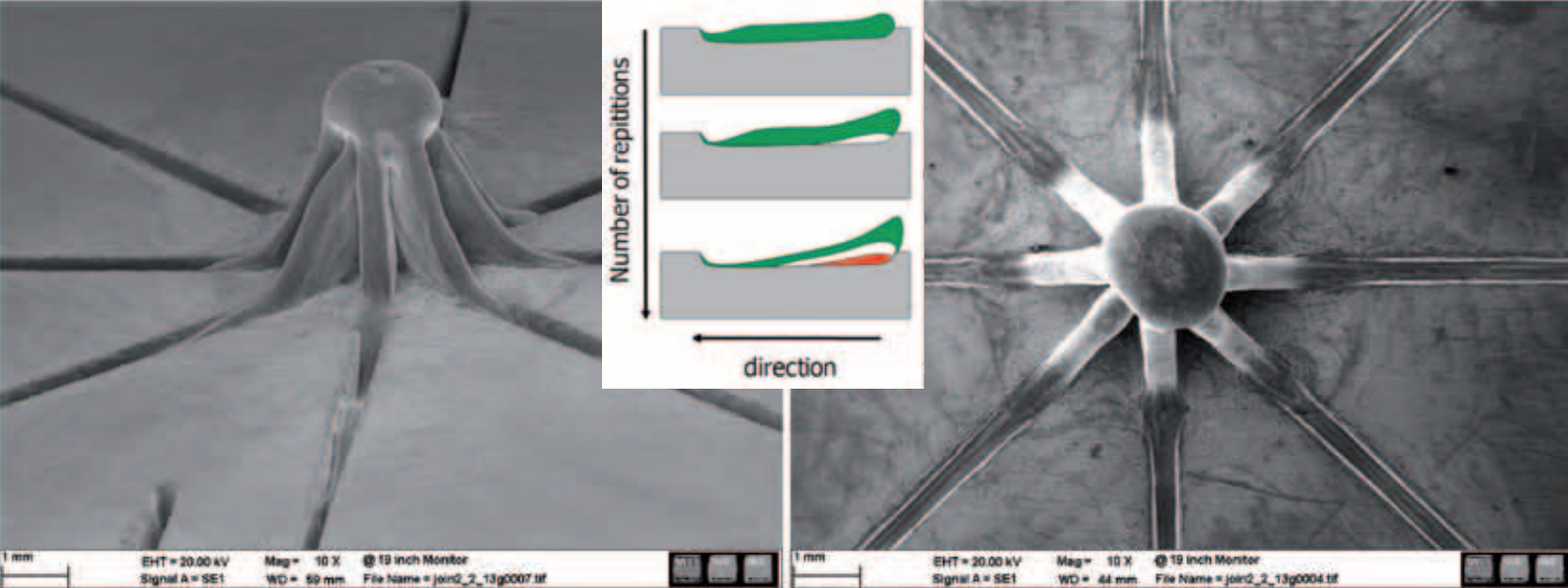


Abb. 1/ Fig. 1

© TU Graz/ Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik

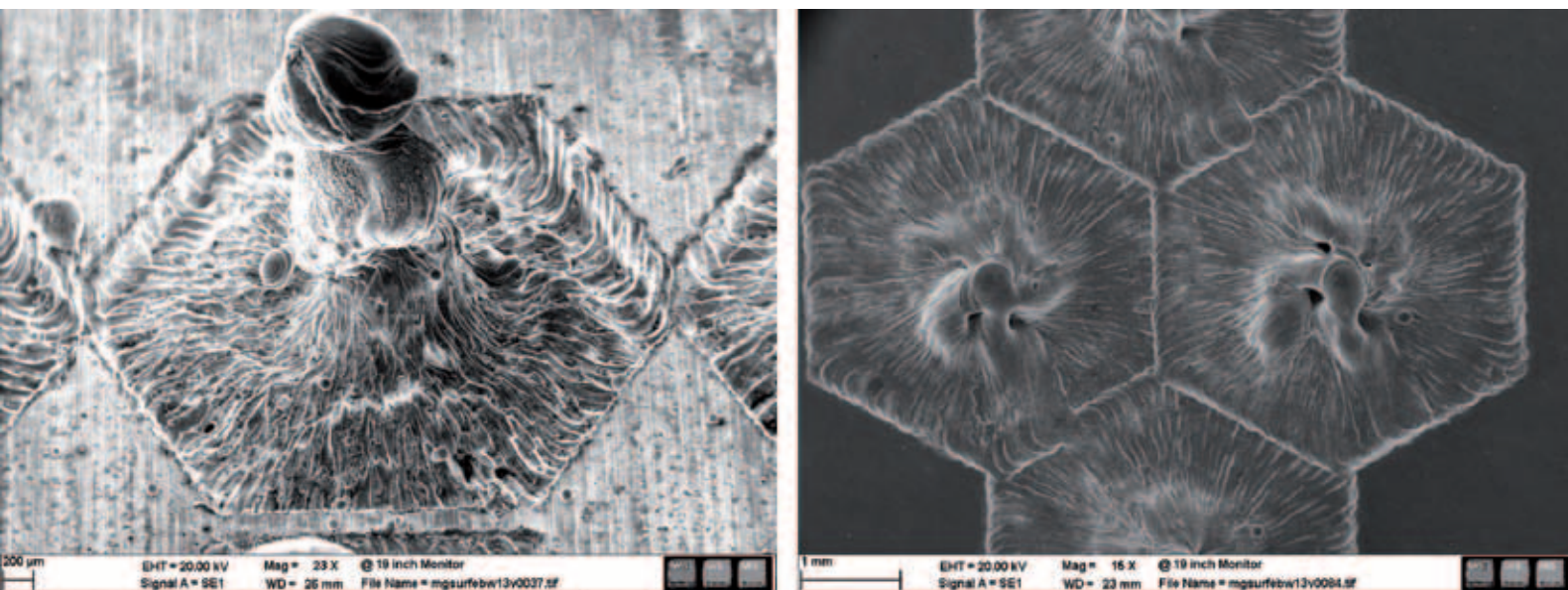


Abb. 2/ Fig. 2

### Mensch-Material-Interface

Einer der wichtigsten Aspekte bei der Minimierung von Entzündungsrisiken, der Reduktion von Verschleiß und schlussendlich auch der Rehabilitationsdauer ist die schnelle Integration des Implantats in die Knochenstruktur. Trotz der verbesserten Gewebeverträglichkeit moderner Biomaterialien bleibt das Problem des Implantat-Gewebe-Interface, weshalb ein besonderer Forschungsschwerpunkt auf die Oberflächenoptimierung gelegt wird. Ein vielversprechender Ansatz zur Verbesserung des Interface ist das gezielte Strukturieren des Implantats durch Elektronenstrahl-Oberflächenbehandlung. Dieser Prozess verwendet einen fokussierten, hochenergetischen Elektronenstrahl, um Strukturen auf metallischen Oberflächen im Mikro- und Millimeterbereich ohne Zusatzmaterial zu generieren. Als Resultat können verschiedenste Oberflächenformen und Rauigkeiten zur Verbesserung der Zelladhärenz geschaffen werden, was mit anderen bekannten Methoden nicht möglich ist.

### Human-material interface

One of the most important aspects of minimizing inflammation risks, reducing wear, and finally shortening rehabilitation time is facilitating a rapid integration of the implant into the bone structure. However, despite the benefits in the tissue compatibility of modern biomaterials, the problem at the implant-tissue interface persists, and this requires a specific research focus on surface optimization. One promising possibility to improve the human-material interface is the targeted structuring of the implant by means of electron-beam (EB) surface treatment. This process uses a focused, highly energetic beam to structure metallic surfaces in the micro and millimeter range without any supplementary material. As a result different surface shapes can be obtained and a desired roughness can be generated to improve the cell adherence, which is not feasible with any other method.

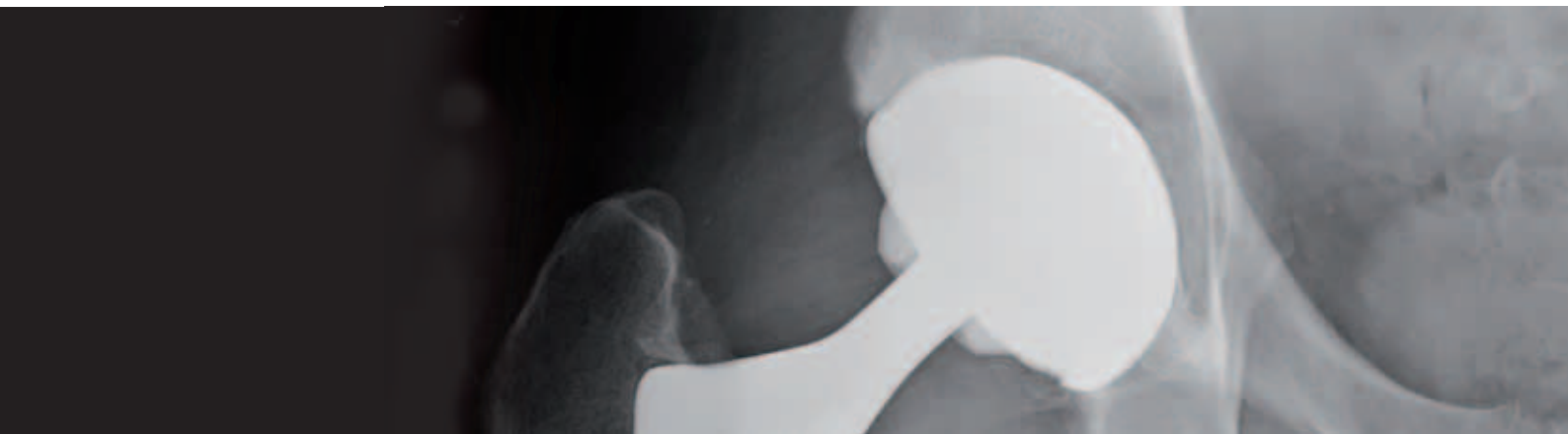
Abb. 1: Schematische Prozessdarstellung der EB-Oberflächenstrukturierung und simple Pinstrukturen.

Fig. 1: Schematic EB-surface structuring process and simple pin structures.

Abb. 2: Komplexe hexagonale Oberflächenstrukturen auf einer Mg-Legierung.

Fig. 2: Complex hexagonal surface features on a Mg-alloy.





Coline Béal arbeitet seit 2012 am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik. Als Leiterin der Forschungsgruppe Werkstoffentwicklung ist sie für die Entwicklung innovativer Materialien und für die Elektronenstrahlschweißanlage verantwortlich.

Coline Béal joined the Institute for Materials Science and Welding in 2012. As leader of the materials development group she is responsible for the development of innovative materials and for the electron-beam welding facility.



Tarun Goswami ist seit 2013 Gastprofessor am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik. Sein wichtigstes Forschungsthema im Rahmen der Biomedizintechnik ist die orthopädische Biomechanik.

Tarun Goswami has been visiting professor at the Institute for Materials Science and Welding since 2013. His research in biomedical engineering is mainly focused on orthopedic biomechanics.

### Elektronenstrahl-Oberflächenstrukturierung

Die Elektronenstrahl-Oberflächenstrukturierung nutzt die exzellente Steuerbarkeit eines Elektronenstrahls (EB) in einer modernen EB-Schweißanlage, um gezielt Protrusionen und Intrusionen an metallischen Oberflächen zu erzeugen. Der Prozess wird in Abbildung 1 gezeigt. Dabei wird ein Strahl von relativ geringer Energie wiederholt durch elektromagnetische Ablenkung in Richtung des dargestellten Pfeils bewegt. Die Interaktion des Strahls mit dem Werkstück führt zu lokalem Aufschmelzen, wobei einiges Material aufgrund der hohen Energiedichte des Strahls sogar verdampft und eine Dampfkapillare formt. Durch die Wechselwirkung mit der Dampfkapillare und aufgrund seiner Oberflächenspannung wird das flüssige Material entgegen der Strahlbewegung verdrängt. Durch entsprechende Programmierung des Strahlablenksystems ist es dadurch möglich, Strukturen mit bestimmter Form zu erzeugen. Die Geometrie wird dabei von der Strahlbewegung einerseits und den EB-Prozessparametern andererseits festgelegt. Letztere sind Strahlstrom, Beschleunigungsspannung, Bewegungsgeschwindigkeit des Strahls und Anzahl der Wiederholungen beziehungsweise Prozessdauer. Die Ergebnisse von Strukturierungen an einer Magnesium-Legierung sind in Abbildung 2 dargestellt.

### Materialien

Die laufende Forschung am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik hat ihren Schwerpunkt vorrangig in modernen Leichtlegierungen auf Titan- oder Magnesiumbasis.

#### ■ Biokompatible Titan-Legierungen

Titan und Ti-Legierungen erfüllen die Eigenschaftsanforderungen besser als jedes konkurrierende Material (z. B. rostfreier Stahl). Zusätzlich wird die Palette an mechanischen Eigenschaften durch mikrostrukturelle Modifikationen verbreitert.

### Electron-beam surface structuring

Electron-beam surface structuring is a process that uses the excellent controllability of an electron beam in a modern electron-beam welding machine to accurately produce protrusions and intrusions on metallic surfaces. The formation of surface features in such a process is illustrated in Fig. 1. An electron beam of rather low energy is electromagnetically deflected and moved repeatedly in the direction of the illustrated arrow. Due to the interaction of the beam with the surface of the work piece, the material becomes locally molten and, due to the high-energy density of the beam, some material even evaporates forming a vapor capillary. As a result of the interaction with this moved capillary and due to its surface tension, the molten material is displaced opposite to the beam's direction of travel. By programming the beam deflection system in a specific way, it is therefore possible to generate structures with corresponding shapes. The geometry of the surface features is controlled by the beam's path, on the one hand, and by the EB-processing parameters, on the other hand. The latter in descending order of significance are beam current, acceleration voltage, traveling speed of the beam, and number of swipe repetitions or processing duration, respectively. The results of surface structuring processes on Mg-alloys are illustrated in Fig. 2.

### Materials

The ongoing research at the Institute for Materials Science and Welding focuses mainly on modern light alloys based on either titanium (Ti) or magnesium (Mg).

#### ■ Biocompatible Ti-alloys

Titanium and titanium alloys fulfill the property requirements better than any competing material (e.g. stainless steel). In addition, the palette of mechanical properties is increased by micro-



© Fotolia.com

Dadurch können maßgeschneiderte Produkte für spezielle Einsatzzwecke geschaffen werden. Eine simple Knochenplatte, die nur geringe mechanische Festigkeit aufweisen muss, wird daher aus handelsüblichem Reintitan hergestellt, wohingegen ein Hüftgelenksimplantat, das erheblicher Ermüdungsbelastung ausgesetzt ist, aus Legierungen wie beispielsweise Ti-6Al-4V, Ti-6Al-7Nb, Ti-15Mo oder Ti-35Nb-7Zr-5Ta besteht.

■ **Biologisch abbaubare Magnesium-Legierungen**  
Magnesium und seine Legierungen sind die neuesten Biomaterialien. Magnesium ist ein essenzielles Element im menschlichen Organismus und ist natürlich im Knochengewebe vorhanden. Daher ist die Verträglichkeit des Materials im menschlichen Körper sehr gut und es besteht keine systematische Entzündungsgefahr. Der größte Vorteil dieser Werkstoffgruppe ist die biologische Abbaubarkeit in Verbindung mit mechanischen Eigenschaften ähnlich jenen von Knochen. Für orthopädische Anwendungen insbesondere für Kinder werden Reinformmagnesium und Legierungen mit Zusätzen von Aluminium, Zink, Calcium, Zirkonium, Mangan, Eisen und seltenen Erden (Yttrium) erforscht.

#### **Bevorstehende Untersuchungen**

In Kooperation mit der Universitätsklinik für Orthopädie und Orthopädische Chirurgie der Medizinischen Universität Graz wird der Einfluss der Oberflächenbehandlung auf die Gewebsadhäsion erforscht. Zuerst wird der Einfluss der Oberflächenmodifikationen auf das Zellwachstum an Biomaterialien in vitro untersucht. Sobald positive Resultate vorliegen, werden strukturierte Implantate in Labortiere eingesetzt und In-vivo-Tests durchgeführt. ■

structure modifications, which gives the possibility to create tailor-made products for specific purposes. Hence, a simple bone plate, which requires only limited mechanical strength is made of simple commercially pure titanium while, for example, a hip joint implant that has to withstand significant fatigue stresses may be made of alloys such as Ti-6Al-4V, Ti-6Al-7Nb, Ti-15Mo, or Ti-35Nb-7Zr-5Ta.

#### ■ **Biodegradable Mg-alloys**

Magnesium and magnesium alloys are the newest metallic biomaterials. Magnesium is an essential element in the human organism and is found naturally in bone tissue. It is thus well tolerated by the human body and does not induce systemic inflammatory reactions. The main advantage of this group of alloys is the biodegradability in combination with mechanical properties close to that of natural bones. Pure magnesium and alloys containing elements such as Al, Zn, Ca, Zr, Mn, Fe and rare earths (Y) are involved in the investigations for further application in orthopedics, in particular for children or athletes.

#### **Upcoming investigations**

The influence of the surface treatment on the tissue-adhesion will be investigated in cooperation with the Department of Orthopedic Surgery at the Medical University of Graz. In a first step, the influence of the surface modifications on cell growth on biomaterials will be examined in vitro. As soon as positive results are reported, in vivo investigations using structured implants in laboratory animals will be carried out. ■



*Christof Sommitsch ist Vorstand des Instituts für Werkstoffkunde und Schweißtechnik und Dekan der Fakultät für Maschinenbau und Wirtschaftswissenschaften. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Werkstoffentwicklung, Fügetechnik und Modellierung.*

*Christof Sommitsch is head of the Institute for Materials Science and Welding and the dean of the Faculty of Mechanical Engineering and Business Economics. His research focuses on materials development, joining technologies, and modeling.*

## In der Einheit liegt die Stärke In Union, there is Strength

Cecilia Poletti, Christof Sommitsch



Cecilia Poletti arbeitet seit 2011 am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik. Als Leiterin der Forschungsgruppe Werkstoffmodellierung und Simulation und Stellvertreterin des Institutes ist sie für die Entwicklung und Implementierung von Werkstoffmodellen und für physikalische und numerische Simulationen zuständig.

Cecilia Poletti joined the Institute for Materials Science and Welding in 2011. As leader of the Modelling and Simulation group and deputy of the institute she is responsible for the development and implementation of materials modelling and for physical and numerical simulations.

**Das „European Virtual Institute on Knowledge-based Multifunctional Materials AISBL (KMM-VIN)“ wurde als Exzellenznetz des 6. Rahmenprogramms unter der Schirmherrschaft der Europäischen Kommission in Form eines supranationalen Rechtsträgers gegründet. Das virtuelle Institut dient der Bündelung von Grundlagenforschung und angewandter Forschung, Bildung und Innovationstätigkeiten im Bereich wissensbasierter struktureller und multifunktionaler Werkstoffe.**

Durch die Schaffung einer starken Plattform für die Forschung, Entwicklung und industrielle Anwendung von Hochleistungswerkstoffen leistet KMM-VIN auch einen wichtigen Beitrag zur Erhöhung der Lebensqualität unserer Gesellschaft.

### Zielsetzung

Das Netzwerk arbeitet in den Bereichen Untersuchung, Verständnis, Gestaltung und Entwicklung neuer Hochleistungswerkstoffe mit dem Ziel, die Leistungsfähigkeit der Werkstoffe unter anspruchsvollen Belastungs- und Umweltbedingungen zu verbessern.

Eine Verbesserung der funktionalen Eigenschaften von keramischen, metallischen, metall-keramischen, intermetallischen oder funktional gradierten Werkstoffen ist durch folgende Punkte erzielbar:

- Verringerung der Dichte und Erhöhung der spezifischen mechanischen Eigenschaften
- Leistungssteigerung im Einsatz bei hoher Temperatur
- Erhöhung der Zähigkeit
- verlangsamte Materialermüdung während der Gebrauchsdauer
- Erhöhung von Verschleiß-, Korrosions- und Oxidationswiderstand
- Erzielung von Biokompatibilität für medizinische Anwendungen

**The European Virtual Institute on Knowledge-based Multifunctional Materials AISBL (KMM-VIN) was founded under the auspices of the European Commission within the 6th Framework programme Network of Excellence as a single legal entity with a supranational character. The virtual institute integrates basic and applied commercial research, and educational and innovation activities in the field of knowledge-based structural and multifunctional materials.**

The aim of KMM-VIN is to foster the creation of a powerful platform for research, development and industrial application of advanced materials, thus contributing to enhancing the quality of life of our society.

### Our objectives

The main objectives of this network are to study, understand, design and develop new advanced materials for enhanced performance in demanding loading and environmental conditions, such as thermo-mechanical and impact loading, high strain rates and temperature regimes, aggressive chemical environment, and a combination of these.

The functional properties and characteristics of ceramic, metallic, metal-ceramic, intermetallic, or functionally graded materials are enhanced by:

- reducing their bulk density, and increasing their specific mechanical properties,
- improving their performance on exposure to high temperatures,
- providing them with greater toughness,
- reducing fatigue during their service life,
- increasing their resistance to wear, corrosion and oxidation,
- furnishing them with biocompatibility, thus making them more suitable for medical applications.



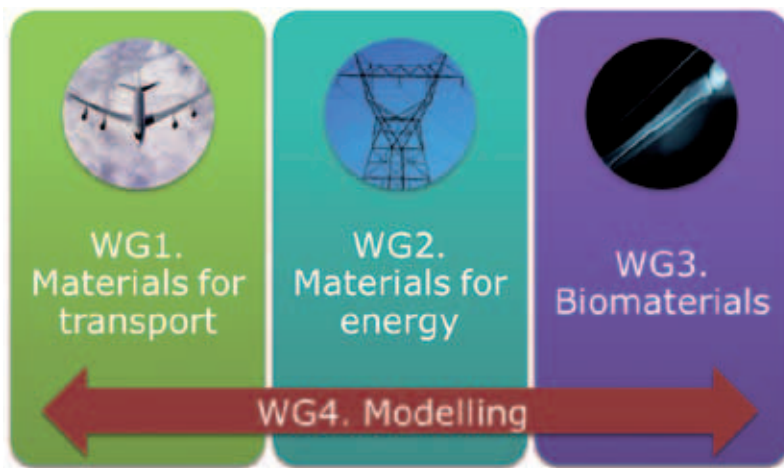


Abb. 1/ Fig. 1

Abb. 1: Arbeitsgruppenstruktur von KMM-VIN.

Fig. 1: Working Group structure of KMM-VIN.

Der Zweck des KMM-VIN besteht darin, gemeinsam Werkstoffforschung zu betreiben, Finanzierungsquellen für gemeinsame Projekte ausfindig zu machen und Synergien, die sich bei der Arbeit an verwandten Fragestellungen auf dem Wege des Ideen- und Wissensaustausches ergeben, zu nutzen.

#### Wie lässt sich das strukturell organisieren?

Im Rahmen des KMM-VIN sind Forscher aus den Bereichen Materialwissenschaft, Physik, Verfahrenstechnik, Maschinenbau und numerische Verfahren tätig, die durch die Bildung problemorientierter Arbeitsgemeinschaften umfassende und verifizierbare KMM-Lösungen entwickeln.

Das Netzwerk besteht aus insgesamt 68 Mitgliedern in drei Arbeitsgruppen (AG1, AG2, AG3, bzw. „working groups“ WG1, WG2, WG3) sowie einer disziplinübergreifenden Arbeitsgruppe (AG4/ WG4).

#### Arbeitsgruppenstruktur von KMM-VIN

##### Verkehr (AG1)

Diese Gruppe beschäftigt sich mit der Entwicklung von Werkstoffen für Mobilitätsanwendungen wie

- Eisen- und Nichteisenmaterialien, Metallmatrix-Verbundstoffen, Elastomeren, Thermoplasten und ultraleichten Hybridmaterialien, Metallpolymeren mit verbesserten mechanischen Eigenschaften
- mehrskaliger Mikrostrukturdiagnostik
- Fügetechnologien für artfremde Werkstoffe mit besonderem Schwerpunkt auf Elektronenstrahlschweißen und Rührreibschweißen
- neuen Beschichtungen für Hochleistungsmagnesiumlegierungen für reibungsarme aeronautische Getriebe, Ultraschallfahrzeuge oder marine Anwendungen

Koordination: Pedro Egizabal (TECNALIA, Spanien) und Thomas Weißgärber (IFAM Dresden, Deutschland)

The final aim of KMM-VIN is to carry out joint research on materials, seek funding for shared projects and take advantage of the synergy produced by collaborating in related topics and by sharing ideas and knowledge. To summarize, the main objective of the network is to cooperate to make materials research stronger.

#### Structure: how is it organized?

The researchers within the KMM-VIN members comprise specialists in materials science, physics, chemical engineering, mechanical engineering, and numerical methods who are capable of forming problem-oriented consortia to provide comprehensive and verifiable solutions in the KMM area.

The Network is composed of a total of 68 members, organized in three main working groups (WG1, WG2, WG3) and one transversal working group (WG4).

#### Working group structure of KMM-VIN

##### Transport (WG1)

This group focuses on materials development for transport applications, and includes:

- Ferrous and non-ferrous materials, metal-matrix composites, elastomer, thermoplastics and ultra-light hybrid materials metal-polymers with enhanced mechanical properties
- Multi-scale diagnostics of microstructure
- Joining technologies for dissimilar materials with special focus on electron beam welding and friction stir welding
- Advanced coatings for high performance magnesium alloys, low friction aeronautic gears, and ultrasonic vehicles for marine applications, etc.

Coordination: Pedro Egizabal (TECNALIA, Spain) and Thomas Weissgärber (IFAM-DD, Germany)



Christof Sommitsch ist Vorstand des Instituts für Werkstoffkunde und Schweißtechnik und Dekan der Fakultät für Maschinenbau und Wirtschaftswissenschaften. Seine Forschungsschwerpunkte umfassen Werkstoffentwicklung, Fügetechnik und Modellierung.

Christof Sommitsch is head of the Institute for Materials Science and Welding and the dean of the Faculty of Mechanical Engineering and Business Economics. His research focuses on materials development, joining technologies, and modeling.

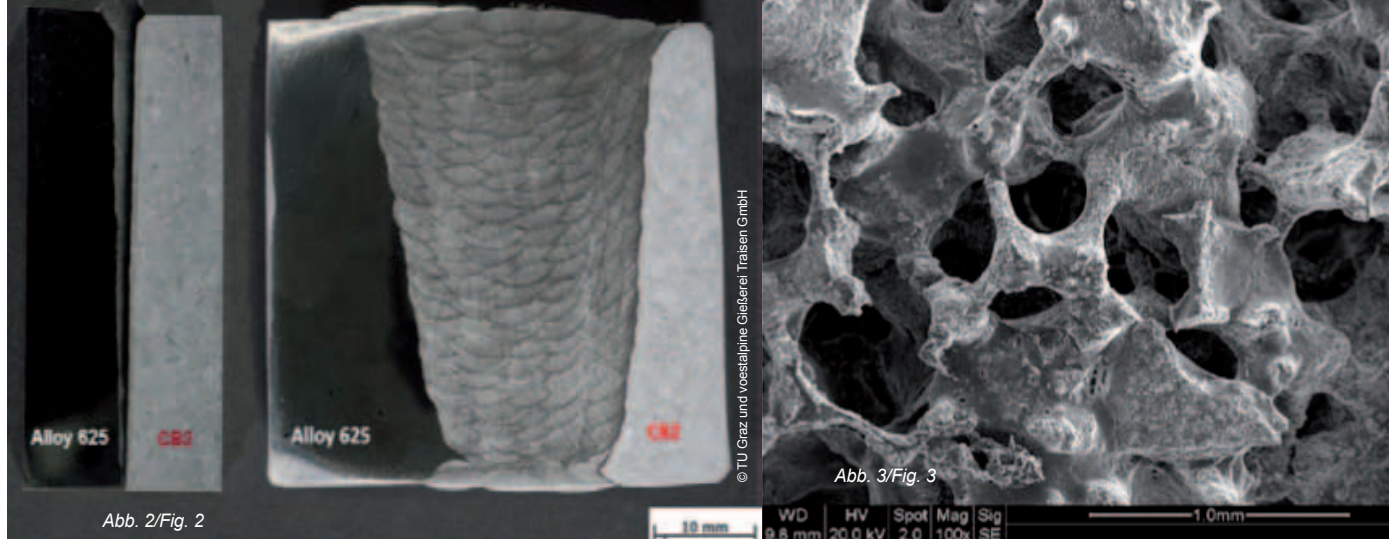


Abb. 2: Vergleich des Fügens der  
artfremden Gusswerkstoffe  
Nickelbasislegierung 625 und 9 %  
Cr-Stahl CB2. Links: ESS. Rechts:  
Lichtbogenschweißen.

Fig. 2: Comparison of dissimilar welds  
between cast nickel-based alloy 625  
and cast 9% Cr steel CB2 obtained  
with EBW (left) and arc welding  
(right).

Abb. 3: REM-Aufnahmen von  
Polycaprolacton-beschichteten  
Bioglas-Gerüsten.

Fig. 3: SEM micrographs of  
polycaprolactone coated Bioglass®-  
based scaffolds.

© Collaboration between the  
Institute for Mechanics of Materials  
and Structures, Vienna University of  
Technology (TUW) and the Institute of  
Biomaterials, University Erlangen-  
Nuremberg (FAU).

## Werkstoffe für Energie (AG2)

In AG2 arbeiten circa 35 Forschungszentren/Universitäten und 25 Firmen in den Bereichen Design, Herstellung und Charakterisierung von Materialien für die Energieerzeugung aus erneuerbaren Energiequellen, aus der Biomasseverfeuerung, Brennstoffzellen, Nuklearenergieanlagen und der petrochemischen Industrie. Die Arbeitsgruppe „Werkstoffe für Energie“ befasst sich unter anderem mit ferritischen und austenitischen Stählen, Superlegierungen auf Nickel-Basis, Legierungen auf Titanium-Basis sowie Keramik und Keramikmatrix-Verbundstoffen.

Koordination: Christof Sommitsch (TU Graz, Österreich) und Monica Ferraris (Politecnico di Torino, Italien)

## Biomaterialien (AG3)

AG3 besteht derzeit aus 22 KMM-VIN-Mitgliedern. Diese Gruppe verfügt in den folgenden drei grundlegenden Bereichen über konzentriertes Fachwissen:

- biomedizinische Werkstoffe: traditionelle Anwendungen
- biomedizinische Werkstoffe: Gewebe-Engineering, regenerative Medizin und Wirkstoffabgabe
- biomimetische und natürliche Materialien

Koordination: Aldo R. Boccaccini (Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland) und Christian Hellmich (TU Wien, Österreich)

## Modellierung (AG4)

Bei AG4 handelt es sich um eine disziplinübergreifende Gruppe, welche die Arbeitsgruppen Verkehr, Energie und Biomaterialien unterstützt. Bestehend aus 35 Forschungsgruppen ist sie thematisch wie folgt gegliedert: Strukturteile, Gewebe-Engineering, Pulververfahren, Schadensbilder bei Verbundstoffen, Metall-Keramik-Oberflächen, Verformbarkeit von Metall, multiskalige Modellierung, atomistische Modellierung, Opti-

## Materials for Energy (WG2)

WG2 is composed of around 35 research centres / universities and 25 companies working on the design, production and characterization of materials for energy production from renewable sources, biomass combustion, fuel cells, nuclear energy plants and petro-chemical industry. Materials for Energy group comprises, among others: ferritic and austenitic steels, Ni-based superalloys, Ti-based alloys, ceramics, ceramic matrix composites.

Coordination: Christof Sommitsch (Graz University of Technology, Austria) and Monica Ferraris (Politecnico di Torino, Italy)

## BioMaterials (WG3)

WG3 is presently composed of 22 KMM-VIN members. There is considerable expertise in this group in three fundamental areas:

- Biomedical materials: traditional applications
- Biomedical materials: tissue engineering, regenerative medicine and drug delivery
- Biomimetic and natural materials

Coordination: Aldo R. Boccaccini (University of Erlangen Nuremberg, Germany) and Christian Hellmich (Vienna University of Technology, Austria)

## Modelling (WG4)

WG4 is a horizontal group supporting the WGs of transport, energy and biomaterials. It is composed of 35 research groups and is divided into the following topics: structural parts, tissues engineering, powder processes, damage in composites, metal-ceramic interfaces, metal formability, multi-scale modelling, atomistic modelling, optimization/Inverse analysis, homogenization/effective properties, and simulation-based material characterization.

Coordination: Jerzy Rojek (Institute of Fundamental Technical Research, Poland), Cecilia Poletti (Graz University of Technology, Austria)



mierung/inverse Analyse sowie Homogenisierung/effektive Eigenschaften.

Koordination: Jerzy Rojek (Institut für Technische Grundlagenforschung, Polen), Cecilia Poletti (TU Graz, Österreich)

### Strategie und Finanzierung

KMM-VIN bietet Industriekunden finanzielle Unterstützung für F&E-Verträge, Prüfungen, Analysen, Beratungsleistungen und andere Tätigkeiten, die von KMM-VIN-Mitgliedern erbracht werden können. KMM-VIN finanziert sich einerseits über Mitgliedsbeiträge (aus der Industrie und Wissenschaft), andererseits über diverse Dienstleistungen (Europäische Projekte, Projektbeantragung und -management für Dritte, Ausrichtung von Konferenzen und Workshops, Internetzugriff auf KMM-VIN-Datenbanken, Zugang zu Büchern, Konferenzbänden, Werbung im KMM-VIN-Internet).

### Leistungen

KMM-VIN bietet folgende Leistungen:

- Forschung, Entwicklung und Innovation
- Aus- und Fortbildung
- E-Library
- Zugang zu KMM-VIN-Infrastruktur und Geräten

### Kontakt

Die TU Graz ist Kernmitglied von KMM-VIN. Wenn Sie Mitglied der TU Graz sind und teilnehmen möchten und/oder weitere Informationen über das laufende Programm wünschen, setzen Sie sich bitte mit Cecilia Poletti oder Christof Sommitsch in Verbindung. Wenn Sie nicht Mitglied der TU Graz sind, aber einen Antrag auf Mitgliedschaft im KMM-VIN stellen möchten, wenden Sie sich bitte an ► <http://www.kmm-vin.eu/>. Über die Aufnahme neuer Mitglieder entscheidet die KMM-VIN-Generalversammlung per Abstimmung. ■

### Strategy and funding

KMM-VIN supports R&D contracts, testing, analysis, consultancy and other activities for industrial clients that can be provided by the KMM-VIN members. KMM-VIN is funded by membership fees (from industry and science) on the one hand, and through a variety of services (European projects, project and management applications for third parties, organisation of conferences and workshops, internet access to KMM-VIN databases, access to books and conference proceedings, and advertising in the KMM-VIN internet) on the other hand.

### Services

KMM-VIN offers the following services:

- Research, development and innovation
- Education and training
- E-library
- Access to KMM-VIN infrastructure and equipment.

### Contact

Graz University of Technology is a core member of KMM-VIN. If you are member of Graz University of Technology and would like to participate and/or to have more information on the current programme, please contact Cecilia Poletti or Christof Sommitsch. If you are not a member of Graz University of Technology and wish to apply for membership of KMM-VIN, please contact ► <http://www.kmm-vin.eu/>. Admission of new members is decided by a vote at the KMM-VIN General Assembly. ■

*Abb. 4: Der 1. KMM-VIN-Industrie-Workshop über „Werkstoffe für Energie“ (IW1) fand am 10. 7. 2013 am Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA, KMM-VIN-Kernmitglied) in Torrejón de Ardoz (Madrid), Spanien, statt.*

*Fig. 4: The 1st KMM-VIN Industrial Workshop on Materials for Energy (IW1) was held on July 10, 2013 at Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA, KMM-VIN core member), Torrejón de Ardoz (Madrid), Spain.*

*Die nächste Jahresversammlung der KMM-VIN-Generalversammlung und Arbeitsgruppen findet vom 18. bis 19. Februar 2014 in Brüssel statt.*

*The next annual meeting of the KMM-VIN General Assembly and working groups will be held on 18-19 February, 2014 in Brussels.*



# Elektronenmikroskop der Superlative an der TU Graz

## Top Electron Microscope at Graz University of Technology

Ferdinand Hofer, Gerald Kothleitner, Werner Grogger



Ferdinand Hofer ist Leiter des Instituts für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik an der Fakultät für Technische Mathematik und Technische Physik und ist stellvertretender Leiter des FoE „Advanced Materials Science“.

Ferdinand Hofer is head of the Institute for Electron Microscopy and Nanoanalysis at the Faculty of Technical Mathematics and Technical Physics. He is also head of the Graz Centre for Electron Microscopy and deputy spokesman of the FoE Advanced Materials Science.

**Moderne Materialien wären ohne Elektronenmikroskopie nicht denkbar. Mit hochenergetischen Elektronen können Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler detaillierte Einblicke in den atomaren Aufbau und in atomare Prozesse von Festkörpern und Biomaterialien gewinnen. Auf diesem topaktuellen Forschungsgebiet kann die TU Graz mit dem im Jahr 2011 installierten Hochauflösungselektronenmikroskop ASTEM des Zentrums für Elektronenmikroskopie Graz (ZFE) im vordersten Bereich der Materialforschung mitmischen und bildet damit das österreichische Zentrum für atomar auflösende Elektronenmikroskopie und -spektroskopie auf international höchstem Niveau.**

*Electron microscopy is one of the key methods in materials science. By using high-energy electrons, scientists acquire detailed insights into the atomic structure and atomic processes in solids and biomaterials. The installation of the Austrian Scanning Transmission Electron Microscope (ASTEM) at Graz University of Technology in 2011 opened a new path at the forefront of nanoscience research. In cooperation with the Graz Centre for Electron Microscopy, Graz University of Technology now hosts the leading Austrian centre for atomically resolved electron microscopy and spectroscopy with international visibility.*

In einer berühmt gewordenen Rede vor der American Physical Society am 29. Dezember 1959 legte der amerikanische Physiker Richard P. Feynman seine Überlegungen zur Miniaturisierung der Naturwissenschaften und der Technik dar. Feynman erkannte, dass der Schlüssel dazu in einer entscheidenden Verbesserung der Elektronenmikroskope liegt. Er vertrat die Meinung, dass eine hundertfache Verbesserung der elektronenmikroskopischen Auflösung es möglich machen müsste, die einzelnen Atome klar und deutlich zu sehen. Zu diesem Zeitpunkt war bereits bekannt, dass elektromagnetische Rundlinsen, die in Elektronenmikroskopen verwendet werden, eine nachteilige Eigenschaft besitzen, die das Auflösungsvermögen der Elektronenmikroskope über Jahrzehnte deutlich einschränkte, und zwar die sogenannte sphärische Aberration (Öffnungsfehler). Elektronen, die die strahlformenden Linsen fern der optischen Achse durchlaufen, werden zu stark abgelenkt und bewirken „unscharfe“ Bilder. Erst aufgrund von bahnbrechenden Arbeiten von Harald Rose, Max Haider und Knut Urban in den Neunzigerjahren (hono-

In his famous talk to the American Physical Society on December 29, 1959, physicist Richard P. Feynman expounded his ideas on the future of miniaturization in the natural sciences and technology. He recognized that the key to this development lies in an essential improvement of electron microscopy. So he posed a challenge to physicists: „... is there no way to make the electron microscope 100 times better?“ It was already realized at this time that the resolution of electron microscopes was mainly limited by the spherical aberrations of the electromagnetic round lenses which are normally used in electron microscopes. Electrons which run far off the centre of the beam-forming lenses are more strongly bent back to the axis. As a result, the resolution of the electron microscope is degraded by the imaging process, thus delivering „unsharp“ images. This situation could not be improved over several decades. It was only due to the ground-breaking work of Harald Rose, Max Haider and Knut Urban in the 1990s that this important limitation could be solved by developing an electron-optical spherical aberration corrector (awarded the Wolf Prize in Physics in 2011). It thus became possible to

Abb. 1: Das ASTEM-Mikroskop FEI Titan 60–300 im Haus Steyrergasse 17 mit den Mitarbeitenden, die am Projekt maßgeblich beteiligt waren: Gerhard Birnstingl, Gerald Kothleitner, Ferdinand Hofer, Ulrike Stürzenbecher, Werner Grogger und Evelin Fisslthaler (v. l. n. r.).

Fig. 1: The ASTEM Microscope FEI Titan 60-300 in the basement of the building at Steyrergasse 17 with the key role players in the ASTEM project: Gerhard Birnstingl, Gerald Kothleitner, Ferdinand Hofer, Ulrike Stürzenbecher, Werner Grogger and Evelin Fisslthaler, from left to right.

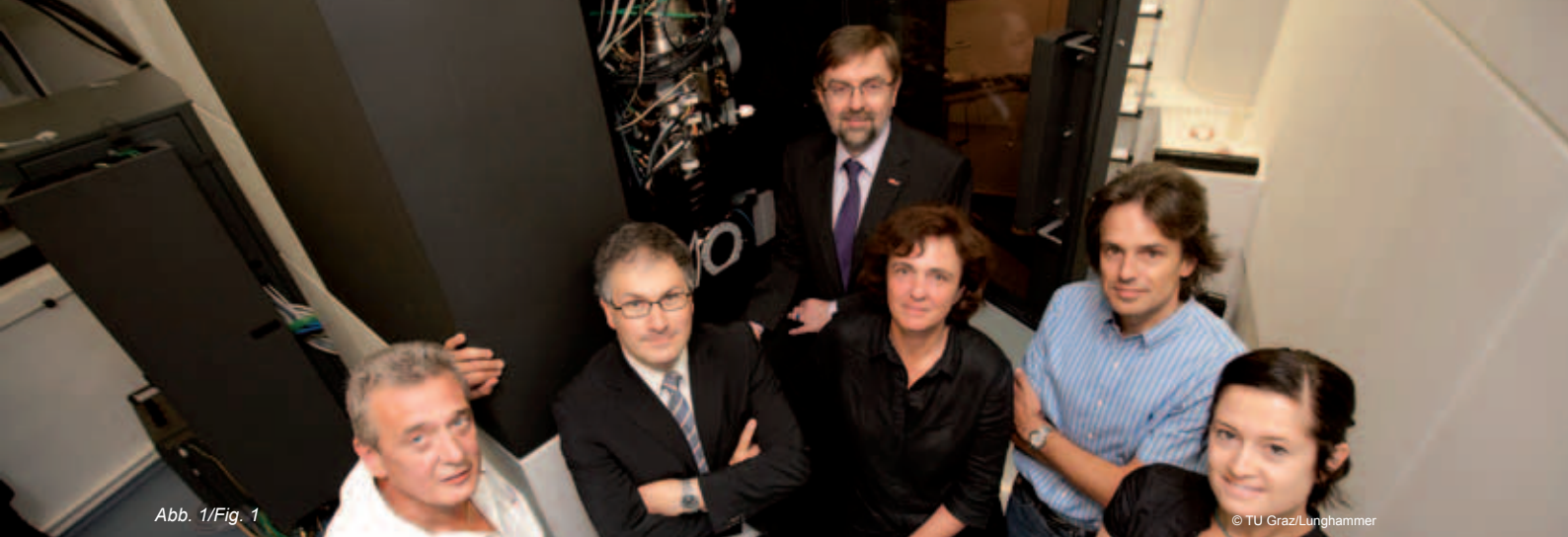


Abb. 1/ Fig. 1

© TU Graz/Lunghammer

riert mit dem Wolf-Preis für Physik 2011) konnte der Öffnungsfehler elektronenoptisch korrigiert und damit eine Auflösung von weniger als 0,1 Nanometer (1 Zehnmillionstel Millimeter) erzielt werden. Die aberrationskorrigierte Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) verbreitete sich weltweit sehr rasch, die ersten kommerziellen Geräte wurden vor etwa neun Jahren ausgeliefert. Inzwischen wurden bereits mehr als 300 aberrationskorrigierte Elektronenmikroskope weltweit installiert.

#### Das ASTEM

Die Bedeutung und die Vorteile der neuen Technologie wurden natürlich auch an der TU Graz erkannt und daher begann man bereits vor acht Jahren mit den Planungsarbeiten. Ein erster Projektantrag im Jahre 2008 wurde mit dem Argument abgelehnt, dass in Österreich zu wenig Bedarf an einem modernen Hochauflösungselektronenmikroskop bestehe. Da die aberrationskorrigierte Elektronenmikroskopie zu diesem Zeitpunkt aber bereits Stand der Technik war, wurde von den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des FELMI/ZFE eine weitere Initiative gestartet. Im Jahr 2008 wurde ein Projekt über die Förderungsschiene COIN-Aufbau der FFG eingereicht und mit Unterstützung der Austrian Cooperative Research (ACR) konnte die erste Ausbaustufe eines aberrationskorrigierten Transmissionselektronenmikroskops tatsächlich realisiert werden (Titan 60–300 der Firma FEI Company in Eindhoven, Niederlande). In rascher Folge konnte das Mikroskop mit weiteren Projektförderungen durch das Land Steiermark, die Steirische Wirtschaftsförderung, die Sparte Industrie der Wirtschaftskammer Steiermark und mit Mitteln des Vereins zur Förderung der Elektronenmikroskopie, der TU Graz und des Ministeriums für Wirtschaft, Familie und Jugend zu einem der weltbesten Transmissionselektronenmikroskope ausgebaut wer-

record electron microscopy images with a resolution of less than 0.1 nanometer (10 millionth millimeter), thus providing true atomic resolution. Given the high scientific potential of the new technique, several companies immediately developed microscopes with aberration correctors. The first commercial transmission electron microscopes (TEM) could be delivered about nine years ago and in the meantime, more than 300 aberration-corrected TEMs have been installed world-wide.

#### The ASTEM

The power and the advantages of aberration-corrected microscopes were also rapidly recognized at Graz University of Technology. Consequently, the first plans and discussions started more than eight years ago and resulted in a project proposal to establish such an advanced microscope in Graz in 2008. However, the proposal was rejected with the argument that there was not enough need in Austria for such an expensive instrument. At this time aberration-corrected TEMs were already state-of-the-art and therefore we developed a new project proposal. Finally in 2009, the FFG in Vienna funded our project application in "COIN-Aufbau", and with the support of Austrian Cooperative Research (ACR) it was possible to establish an aberration-corrected transmission electron microscope (Titan 60-300 by FEI Company, Eindhoven, The Netherlands). This microscope was rapidly extended by further project funding from the Styrian Provincial Government, the Styrian Business Promotion Agency (SFG), the Chamber of Commerce of Styria (industry section), the "Verein zur Förderung der Elektronenmikroskopie", Graz University of Technology and the Federal Ministry of Economy, Family and Youth in Vienna. This broad support helped to establish one of the best transmission electron microscopes in the world (Fig. 1). Due to the high investment sum of more than four million euros, it



*Gerald Kothleitner ist Leiter der Arbeitsgruppe für analytische Transmissionselektronenmikroskopie. Seine Forschungsarbeiten konzentrieren sich auf methodische Entwicklungen im Bereich der spektroskopischen Analytik und deren Anwendung auf materialwissenschaftliche Problemstellungen mit atomarer Auflösung, der Elektronentomographie sowie der Designverbesserung von Geräten.*

*Gerald Kothleitner is head of the working group for analytic transmission electron microscopy. His research includes methodological developments in the field of spectroscopic analysis and their application at atomic resolution in problems of materials science, electron tomography and the improvement of design of appliances.*

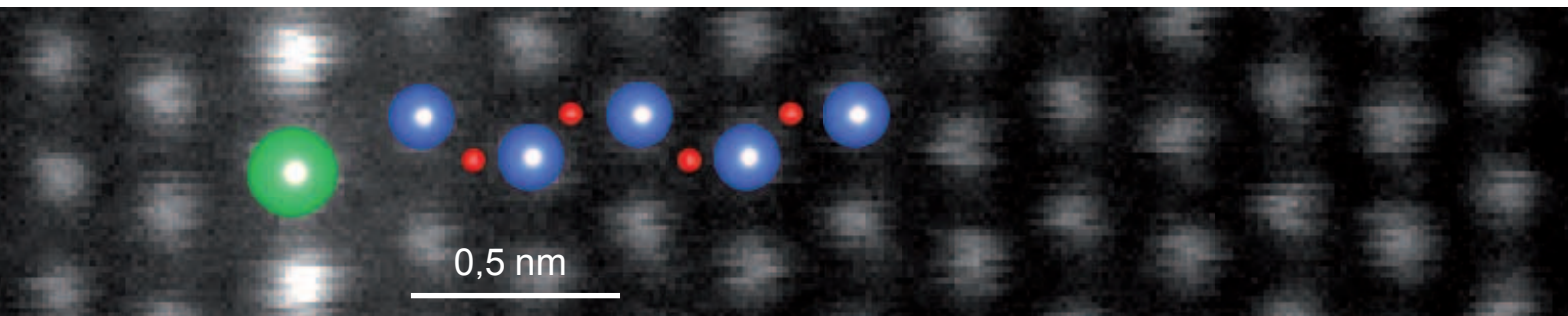


Abb. 2/ Fig. 2

© Velimir Radmilovic



Werner Grogger leitet die Arbeitsgruppe für bildgebende Verfahren der Transmissionselektronenmikroskopie. Seine Forschungsinteressen gelten der Strukturaufklärung mittels Phasenkontrast- und Beugungsverfahren, der Energiefilterung, der Bildsimulation und der Kryo-Elektronenmikroskopie.

Werner Grogger is head of the working group for imaging techniques in transmission electron microscopy. His research interests include structural elucidation using phase contrast microscopy and diffraction techniques, energy filtering, image simulation and cryo-electron microscopy.

den (Abb. 1). Aufgrund der hohen Investitionskosten von mehr als vier Millionen Euro handelt es sich um eine der größten Investitionen in wissenschaftliche Infrastruktur in Österreich.

### Was leistet das ASTEM?

Das ASTEM ermöglicht die Charakterisierung nanoskaliger Strukturen in Materialien, Werkstoffen und Baumaterialien – einschließlich ihrer Kristallographie und chemischen Zusammensetzung sowie ihrer physikalischen Eigenschaften – bis in atomare Dimensionen. Der Einsatzbereich erstreckt sich von der Erforschung von Defekten, Korngrenzen und Grenzflächen in Werkstoffen, Keramiken, Legierungen und organischen und anorganischen Bauelementen bis zur Analytik von Nanoteilchen und Biomaterialien.

Dazu werden im ASTEM Elektronen auf 300.000 Volt beschleunigt, um dünne Proben mit einer Dicke von 10 bis 100 Nanometern zu durchstrahlen. Die Präparation dieser Proben erfordert Spezialwissen, das an der TU Graz über viele Jahre aufgebaut wurde. Das ASTEM wird hauptsächlich im Rastermodus betrieben. Hierbei tastet ein fast unvorstellbar feiner Elektronenstrahl die dünne Probe ab und die durch Wechselwirkung mit den Probenatomen gestreuten Elektronen werden von speziellen Detektoren aufgefangen. Durch die Aberrationskorrektur des ASTEM kann der Strahldurchmesser auf weniger als 0,1 Nanometer reduziert und der Strahlstrom gegenüber konventionellen Systemen gleichzeitig um den Faktor 10 erhöht werden. Damit können die Messzeiten und das Signal-zu-Rausch-Verhältnis in den Bildern und bei spektroskopischen Daten entscheidend verbessert werden (Abb. 2).

Ein großer Vorteil von Raster-TEMs liegt darin, dass sich Strukturinformation und chemische Information mit hoher Auflösung kombinieren lassen. Das ASTEM war das erste Mikroskop, das sowohl mit einem völlig neuen Röntgendetektor

is probably one of the most expensive scientific items of infrastructure in Austria.

### The achievements of the ASTEM

The Austrian Scanning Transmission Electron Microscopy (ASTEM, Titan 60-300) will be used for the detailed characterization of nanoscale structures in all kinds of materials down to atomic resolution – including crystallography, chemical composition and physical properties. The application fields range from the analysis of defects, grain boundaries and interfaces in materials, ceramics, alloys and organic and inorganic circuits to structural studies of nanoparticles and biomaterials.

The electrons in the ASTEM are accelerated to 300,000 volts in order to provide better transmission through thin specimens. The preparation of specimens with thicknesses between 10 to 100 nanometers needs highly developed procedures which are already available at the institute.

The ASTEM is mostly operated in scanning mode, which means that a very finely focused beam of electrons moves across the specimen. Interactions between the beam electrons and specimen atoms generate scattered electrons which are collected with special electron detectors. The aberration corrector of the ASTEM reduces the beam diameter down to 0.1 nanometers and increases the beam current by 10 times when compared with conventional microscopes. This helps to improve the acquisition time and the signal-to-noise ratio in the images and spectra, thus providing superior data quality (Fig. 2). One of the principal advantages of the scanning TEM (STEM) is in enabling the simultaneous acquisition of signals such as scattered electrons, X-rays and energy-loss electrons.

The ASTEM was the first Titan microscope in the world to be equipped with both a completely new large-area x-ray detector from FEI Company and



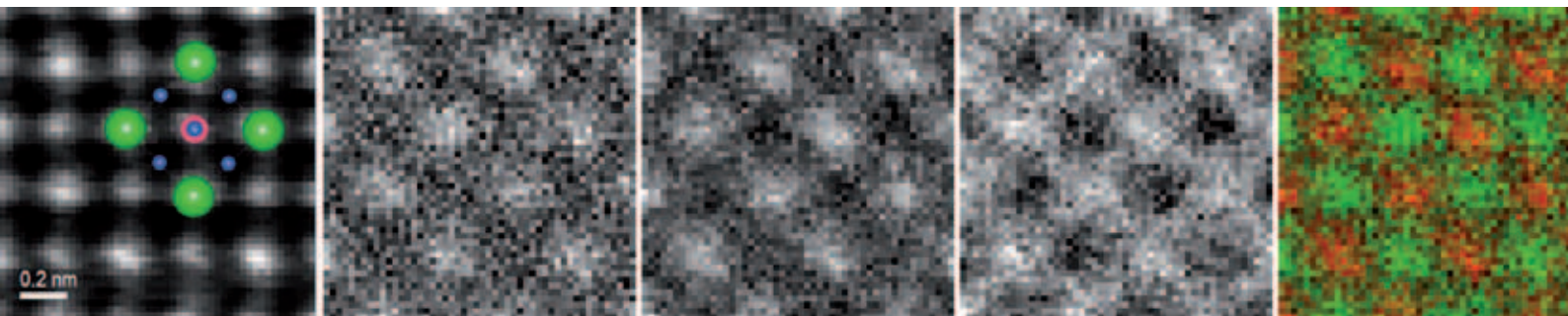


Abb. 3/ Fig. 3

© TU Graz/Kothleitner

von FEI Company als auch mit einem neu entwickelten abbildenden Energiefilter der US-amerikanischen Firma Gatan ausgestattet wurde. Aufgrund der engen Zusammenarbeit mit Gatan ist es weltweit zum ersten Mal gelungen, sowohl röntgenspektroskopische als auch elektronenspektroskopische Elementverteilungsbilder mit atomarer Auflösung und einer extrem hohen Rastergeschwindigkeit von mehr als 1.000 Spektren pro Sekunde aufzunehmen. Damit konnte die Arbeitsgruppe von Gerald Kothleitner atomar aufgelöste Elementverteilungsbilder eines  $\text{SrTiO}_3$ -Kristalls quantifizieren, d. h. die Anzahl der Atome in den einzelnen Atomsäulen exakt messen (Abb. 3). Die theoretische Interpretation dieser Ergebnisse erfolgt in Kooperation mit der Arbeitsgruppe von Professor Les Allen von der Universität Melbourne (Australien).

### Forschungskooperationen

Dank ASTEM ist die TU Graz nun auch im exklusiven Klub des Elektronenmikroskopie-Netzwerks ESTEEM (Enabling Science and Technology through European Electron Microscopy) vertreten. Das ESTEEM-Projekt vereinigt die Forschungsexpertise der 14 führenden elektronenmikroskopischen Labore in Europa und eröffnet europäischen Forschern den Zugang zu den besten Elektronenmikroskopen in Europa. Das Mikroskop wird bereits intensiv für Forschungsarbeiten im FoE „Advanced Materials Science“ und ebenso für Kooperationen mit der österreichischen Wirtschaft eingesetzt. ■

#### Literatur/References:

Toni Feder, *Electron microscope gets x-ray vision.*  
*Physics Today*, 64, 10 (2011) 28–29.

a newly developed energy-filter from the US-company Gatan. Due to our close collaboration with Gatan, it was also possible to establish a procedure for the simultaneous acquisition of elemental maps using X-rays and energy-loss electrons – for the first time at atomic resolution and at very high scanning rates (1000 spectra per seconds).

These developments have been essential for the group of Gerald Kothleitner to quantify atomically resolved elemental maps of a  $\text{SrTiO}_3$  crystal in order to capture the number of atoms in the atomic columns (Fig. 3). The theoretical interpretation of these results is done in collaboration with professor Les Allen from the University of Melbourne (Australia).

### Research cooperations

The launch of the ASTEM helped Graz University of Technology to become a member of the exclusive club of the electron microscopy network ESTEEM (Enabling Science and Technology through European Electron Microscopy). The ESTEEM project unites the research expertise of the 14 leading electron microscopy laboratories in Europe and provides access for the academic research community in the physical sciences to some of the most powerful microscopes. Additionally, the ASTEM is already intensively used for research work in the FoE Advanced Materials Science and also for collaborations with industrial partners. ■

Abb. 2: Hochaufgelöstes STEM-Bild eines Zinkoxid-Nanodrahtes, der mit Indium dotiert wurde, aufgenommen mit dem ASTEM im „high-angle annular dark-field“-Modus von Velimir Radmilovic. Zink-Atome bzw. Atomsäulen sind grau (blaue Markierung) und die Indiumatomsäulen erschienen hell (grüne Markierung).

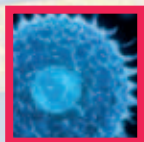
Fig. 2: High resolution STEM-image of a zinc oxide nanowire doped with indium; recorded with the ASTEM in high-angle annular dark field mode by Velimir Radmilovic; zinc atom columns appear grey (marked in blue) and the indium rich atom columns appear bright (marked in green).

Abb. 3: Atomar aufgelöste Elementverteilungsbilder von Strontiumtitanat ( $\text{SrTiO}_3$ ); ASTEM-Untersuchung mit einem 0,1 nm Elektronenstrahl, die Elementverteilungsbilder wurden mit der Elektronenenergieverlustspektroskopie aufgenommen; STEM-Bild mit Strukturmodell, Strontium-Verteilungsbild, Titan-Verteilungsbild, Sauerstoff-Verteilungsbild, RGB-Bild mit Strontium (grün) und Titan (rot).

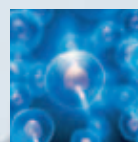
Fig. 3: Atomically resolved elemental maps of strontium titanate ( $\text{SrTiO}_3$ ); ASTEM investigation with a 0.1 nm electron beam, the elemental maps were recorded using electron energy-loss spectroscopy; STEM-image with structure model, strontium map, titanium map, oxygen map, RGB-image with strontium (green) and titanium (red).

Fünf zukunftssträchtige Bereiche in Forschung und Lehre bilden den unverwechselbaren Fingerabdruck der TU Graz auf dem Weg zur Exzellenz. Diese Fields of Expertise sind Kompetenzbereiche, die zu einzigartigen Markenzeichen der TU Graz im 21. Jahrhundert werden sollen. Gestärkt werden die Fields of Expertise durch thematisch neue Professuren und Investitionen sowie intensive Zusammenarbeit mit Industrie und Wirtschaft in Form von zahlreichen gemeinsamen Beteiligungen an wissenschaftlichen Kompetenzzentren und Forschungsnetzwerken. Kooperationen mit wissenschaftlichen Partnerinnen- und Partneereinrichtungen wirken als weiterer Motor zum Erfolg.

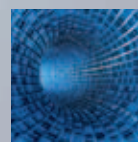
Five fields of the future in research and teaching go to form the unmistakable fingerprint of Graz University of Technology on its path to excellence. These fields of expertise will become distinctive hallmarks of Graz University of Technology in the 21<sup>st</sup> century. They will be strengthened by thematically new professorships and investments as well as intensive cooperation with industry and business in the form of numerous shared participations in scientific competence centres and research networks. Cooperations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.



Advanced Materials Science



Human- & Biotechnology



Information, Communication & Computing

# FOE

Fields of Expertise

Mobility & Production



Sustainable Systems



**Impressum:** Eigentümerin: TU Graz. Herausgeber: Vizerektor für Forschung. Chefredaktion: Ines Hopper-Pfister, Büro des Rektorates – Kommunikation, Rechbauerstraße 12/I, 8010 Graz. E-Mail: [TU-research@tugraz.at](mailto:TU-research@tugraz.at). Gestaltung/Layout/Satz: Christina Fraueneder, Thomas Schöberl. Druck: Steiermärkische Landesdruckerei GmbH. Auflage: 4.600 Stück. Wir danken den Autorinnen und Autoren für die Bereitstellung der Texte und Fotos. Geringfügige Änderungen sind der Redaktion vorbehalten. Titelbild: © TU Graz/FELMI (Ni Schicht auf Ag Sternchen). TU Graz *research* erscheint zweimal jährlich. ► [www.tugraz.at/research-journal](http://www.tugraz.at/research-journal)