

## Future Matter by APT

Designing advanced materials for the future – everything starts with an atom (probe)

<b>Programm / Ausschreibung</b>	F&E Infrastruktur, F&E Infrastruktur, F&E Infrastruktur 3. Ausschreibung	<b>Status</b>	abgeschlossen
<b>Projektstart</b>	01.04.2021	<b>Projektende</b>	31.03.2023
<b>Zeitraum</b>	2021 - 2023	<b>Projektlaufzeit</b>	24 Monate
<b>Keywords</b>	atom probe tomography; materials development; high-resolution techniques; materials science		

### Projektbeschreibung

Das Department Werkstoffwissenschaft an der Montanuniversität Leoben, Österreich, betreibt ein einzigartiges Portfolio an Geräten für das Design, die Synthese, die Charakterisierung und die Modellierung fortschrittlicher Materialien und Materialsysteme. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Untersuchung auf allen Längenskalen - von atomar bis makroskopisch. Um zukünftige Materialanwendungen und emissionsfreie Technologien während der Materialherstellung und -verarbeitung zu ermöglichen, müssen neue Designkonzepte auf atomarer Ebene beginnen. In Kombination mit atomistischer Modellierung und Anwendung von ab-initio Berechnungen werden neue Ansätze zur Entwicklung von Materialien im Bereich struktureller und funktioneller Materialien möglich sein. Die Verbindung dieser theoretischen Methoden mit experimentellen hochauflösenden Charakterisierungsmethoden, wie der Atomsonden-Tomographie verbessert die wissenschaftsbasierte Materialentwicklung und -anwendung.

Die Montanuniversität Leoben ist die einzige Forschungseinrichtung in Österreich die hochauflösende Atomsonden betreibt und nimmt damit eine einzigartige Position in der gesamten österreichischen Forschungslandschaft in der Materialwissenschaft ein. Leoben war eines der ersten Atomsonden-Zentren weltweit und erlangte in diesem Bereich einen internationalen Ruf, als vor fast 15 Jahren die ersten Atomsonden installiert wurden. In der Zwischenzeit hat sich die Technologie erheblich weiterentwickelt, insbesondere aufgrund der neuesten Generation von Geräten. Diese Atomsonden der neuesten Generation ermöglichen die Analyse geringer Konzentrationen von Spurenelementen und Korngrenzen-Segregationen aufgrund der enorm erhöhter Detektoreffizienz. Darüber hinaus ermöglicht die kleinere Wellenlänge des UV-Lasers die Analyse elektrisch nichtleitender Materialien, wie technischer Keramik und geologischer Materie. Dies würde neue Forschungsbereiche in den Bereichen Nanotechnologie und Mikroelektronik eröffnen und die Interdisziplinarität mit anderen Wissenschaften, wie z.Bsp. Geologie, Biologie und Medizin fördern.

Dies wird die Grundlage für zukünftige Materialentwicklungen bilden, die zu neuartigen Konzepten für produktionsoptimierte Strukturwerkstoffen, wie zum Beispiel von Hochleistungs-Stählen, Leichtbau-Werkstoffen für umweltfreundliche Antriebssysteme, schadensresistente Verschleißschutzbeschichtungen für Werkzeuge, selbstheilende Schichtsysteme für flexible Elektronik, antibakterielle und antivirale Oberflächen für medizinische Anwendungen, oder für nanoporöse Materialien für die Wasserstoffspeicherung führen.

## Abstract

The Department of Materials Science at the Montanuniversität Leoben, Austria, operates a unique portfolio of facilities and methods for the design, synthesis, characterization, and testing, as well as modelling of advanced materials and materials systems, with strong emphasis on bridging length scales from atomistic to macroscopic. For enabling future applications of materials, and zero-emission technologies during materials production and processing, new design concepts have to start at the atomic scale. In combination with atomistic modeling, applying ab initio calculations, new approaches for developing materials in the field of structural as well as functional materials will be possible. Connecting these theoretical methods to experimental high-resolution characterization methods, such as Atom Probe Tomography (APT), enhances knowledge-guided materials development.

Montanuniversität Leoben is the only research and academic institution in Austria that operates high-resolution atom probes, thus holding a unique position in the entire Austrian research landscape in materials science. Leoben was one of the very first centers for APT worldwide and obtained an international reputation in this area, when the first atom probes were installed almost 15 years ago. In the meantime, APT has developed significantly, especially due to the latest generation of devices that contain an UV laser and a superior detector design. These atom probes of the newest generation enable the analysis of low concentrations of trace elements and grain boundary segregations due to tremendously increased detector efficiency. Furthermore, the smaller wavelength of the UV laser allows the analysis of a wider spectrum of electrically non-conductive materials, such as technical ceramics and geologic matter. This would open new research areas in nanotechnology and microelectronics and promote the interdisciplinarity to other sciences, e.g. geology, biology and medicine.

Therefore, Montanuniversität Leoben applies for funding of a modern atom probe. The project is coordinated by the Chair of Design of Steels within the Department of Materials Science. This chair was established by an endowed BMK professorship, and the new instrument will not only allow the continuation of its success story, but has also tremendous importance for the entire Department of Materials Science. In addition to all research groups at the Montanuniversität Leoben, the new infrastructure will be accessible to Austrian and international partners in cooperative research projects.

This will provide the basis for future materials improvement and exploitation, giving rise to novel concepts for e.g. production-optimized structural materials as advanced steels, light-weight materials for environmental-friendly propulsion systems, damage-tolerant wear protective coatings for tools, self-healing layer systems for flexible electronics, and for nanoporous materials for hydrogen storage.

## Projektpartner

- Montanuniversität Leoben