

Zusammenfassung

Scherrbänder (**SB**), induziert durch Deformation, wurden für 4 verschiedene metallische Glas-Systeme in dieser Arbeit untersucht, unter Verwendung von Elektron-Energie Verlust Spektroskopie (**EELS**), um die Plasmonen-Energie Verluste im Bereich des **SB** und im umgebenden Matrixbereich zu quantifizieren. Die charakteristischen Änderungen, unter anderem der Peak Position, wurden mittels einer präzisen Analyse mit einer Genauigkeit von einigen meV quantifiziert unter der Verwendung eines Python-Moduls (*hyperspy*). Die Form der Plasmonenpeaks (**PP**) wurde durch 4 verschiedene Modelansätze abgeschätzt und der stabilste und effizienteste Modelansatz, namentlich die Lorentz-Verteilung, analysiert. Zudem wurde der Peak der elastisch gestreuten Elektronen, enthalten im sogenannten "Zero-Loss peak" (**ZLP**), mittels der Voigt-Verteilung modelliert. Die Lorentz-Verteilung wurde für die Ergebnisdarstellung gewählt, da sie die eine gute Approximation des physikalisch motivierten Drude Models darstellt. Das Zentrum des **PP** zeigt eine Änderung im Bereich einiger weniger 10 meV im Gebiet des **SB**'s relativ zur Matrix. Durch die Analyse der Dämpfungskonstante, abgeschätzt durch die halbe Breite des halben Maximums der Verteilung (**HWHM**), und durch den Vergleich der Linienprofil-Position der Parameteränderung, lassen sich Rückschlüsse auf die Lokalisierung des parameter-beeinflussten Bereichs ziehen. Die Analyse der Dämpfungskonstante zeigt eine analoge aber teils anticorrelierte Parameteränderung auf. Die Änderung der Plasmonenenergien werden im Bezug auf die topologische Ordnung diskutiert, welche eine Kontribution der Dämpfungskonstante berücksichtigt. Die Möglichkeiten für weitere Untersuchungen werden durch die ermittelten Parameteränderungen und durch die nachgewiesene Energieauflösung dargestellt. Durch die immer höher werdende Energieauflösung und mit Verwendung immer kleineren Elektronensonden kann eine Verbesserung des Signal-zu-Rausch Verhältnisses erwartet werden, welche eine detaillierte und vollkommen automatisierte Quantifizierung der **EELS**-Bilder ermöglicht.

Abstract

Shear bands (**SB**) resulting from severe deformation in 4 different metallic glasses (**MG**) systems were investigated using Electron-energy loss spectroscopy (**EELS**) to analyze the volume Plasmon energy losses in and around a **SB**. Shifts with respect to the peak centre were precisely determined within an accuracy of a few meV using an open source python module (*hyperspy*). The shapes of the Plasmon peaks (**PP**) were modeled by 4 different distributions, where the Lorentzian shows the least deviation from the derived Drude model, and zero-loss peaks (**ZLÜ**) by Voigt functions. The Lorentzian was chosen for presentation representing a good approximation of the physically motivated Drude model. The centre of the **PP** was shifted of a few 10 meV in the **SB** relative to the matrix. With analysis of the characteristic peak width, namely the half width at half-maximum (**HWHM**), reflecting the damping in the system, an estimation of the localization of the **SB** can be derived if the positional shift of the **PP** correlates with an observed damping shift. The observed shifts of the Plasmon energy losses are discussed in terms changes in the topological order, which are expected to influence the damping of the Plasmon excitation. The potential for further investigations is indicated by the resolution and the detected parameter shifts. With increasing energy resolution and smaller probe sizes the signal to noise ratio is expected to increase allowing a detailed and a fully automated analysis for the **EELS**-images of deformed metallic glasses.

Contents

1. Introduction	1
2. Theory	2
2.1. Metallic glasses	2
2.1.1. Thermodynamics and nucleation	4
2.1.2. Plastic flow in metallic glasses	6
2.1.3. Shear banding in metallic glasses	8
2.2. Plasmons	9
2.2.1. Scattering processes in materials	9
2.2.2. Plasmon excitations in crystalline metals	11
2.2.3. Plasmon excitations in post-mortem shear bands of metallic glasses	15
3. Experimental methods	18
3.1. Scanning Transmission Electron Microscopy (STEM)	18
3.2. Electron Energy Loss Spectroscopy - STEM (EELS-STEM)	19
3.3. Sample preparation	21
4. Model implementation and analysis	22
4.1. Hyperspy class	22
4.1.1. Signal and Navigation Space	23
4.1.2. EELS Low Loss Model	24
4.1.3. Fitting Optimizers	28
4.1.4. Final user evaluation	34
4.2. Error estimation	36
4.2.1. Model analysis	37
4.2.2. Energy resolution	39
4.2.3. Thickness dependence	41
4.3. Lorentzian Model - Multifit	44
4.3.1. Least Squared Minimization	44
4.3.2. Levenberg Marquardt Minimization	47
4.4. Lorentzian Model - SAMFire	50
5. Plasmon characteristics of sheared regions	51
5.1. $\text{Al}_{88}\text{Y}_7\text{Fe}_5$ metallic glass	52
5.2. Vitreloy 105 metallic glass	56
5.2.1. Tension	56
5.2.2. Compression	59
5.3. $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{20}$ metallic glass	63
5.4. $\text{Cu}_{40}\text{Zr}_{60}$ metallic glass	65

6. Conclusion and Outlook	68
A. Appendix	74
A.1. final user evaluation	74
A.2. Model and Fitting Optimization	82
A.2.1. Least Squared Minimization - Lorentzian - SAMFire	82
A.2.2. Levenberg Marquardt Minimization - Lorentzian - SAMFire	84
A.2.3. Least Squared Minimization - VPD Model - SAMFire	87
A.2.4. Levenberg Marquardt Minimization - VPD Model - SAMFire	89
A.3. Al ₈₈ Y ₇ Fe ₅ metallic glass	91
A.4. Vitreloy 105 metallic glass	94
A.4.1. Tension	94
A.4.2. Compression	101
A.5. Pd ₄₀ Ni ₄₀ P ₂₀ metallic glass	107
A.6. Cu ₄₀ Zr ₆₀ metallic glass with interlayered crystalline copper	113