

Antrag auf Einrichtung eines DFG Schwerpunktprogramms

***Änderung von Mikrostruktur und Form
fester Werkstoffe durch äußere
Magnetfelder***

21.12.2004

Programmkomitee:

L. Schultz, IFW Dresden, Helmholtzstr. 20, 01069 Dresden, Tel. 0351/4659-460
W. Petry, TU München, James-Franck-Str. 1, 85747 Garching, Tel. 089/289-14704
E. Quandt, Stiftung Caesar, Ludwig-Erhard-Allee 2, 53175 Bonn, Tel. 0228/9656-215
K. Samwer, U Göttingen, Tammannstr. 1, 37077 Göttingen, Tel. 0551/39-7601
E. F. Wassermann, U Duisburg-Essen, Lotharstr. 1, 47048 Duisburg, Tel. 0203/379-2383
J. Hesselbach, TU Braunschweig, Langer Kamp 19b, 38106 Braunschweig, Tel. 0531/391-7601

Koordination:

S. Fähler, IFW Dresden, Helmholtzstr. 20, 01069 Dresden, Tel. 0351/4659-588
e-mail: s.faeher@ifw-dresden.de

1 Zusammenfassung

Adaptive Materialien wie Piezokeramiken oder magnetostruktive Materialien können ihre Form durch äußere elektrische bzw. magnetische Felder verändern. Relative Längenänderungen von 0,1...0,2 % werden so in technisch eingesetzten Werkstoffen durch Anlegen hoher elektrischer Spannungen bzw. Magnetfelder erreicht. Besonders die Entwicklung piezoelektrischer Funktionswerkstoffe war wesentliche Voraussetzung für eine Vielzahl von Innovationen. Anwendungen reichen vom Rastertunnelmikroskop bis hin zur kürzlich erfolgten Markteinführung neuartiger Einspritzventile, welche die Umweltbelastung durch Automobilabgase weiter senken. Eine andere Klasse stellen die Formgedächtnislegierungen dar, bei denen sich (mit entsprechendem „Training“) reversibel Formänderungen zwischen einer Hochtemperaturphase „Austenit“ und einer Tieftemperaturphase „Martensit“ durch Variationen der Temperatur erzielen lassen. Für magnetische Legierungen dieser Materialklasse ist 1996 ein grundsätzlich neuer Mechanismus für Formgedächtniseffekte entdeckt worden. Erstaunlicherweise reicht ein äußeres Magnetfeld zum Verschieben von Zwillingsgrenzen aus, die Bereiche unterschiedlicher Kristallorientierungen voneinander trennen, so dass Mikrostruktur und Probenform beeinflusst werden. Durch das Anlegen moderater magnetischer Felder kann eine gegenüber magnetostruktiven oder piezoelektrischen Materialien um zwei Größenordnungen höhere Längenänderung (bis 10 %) erreicht werden. Durch die einzigartige Kombination von sehr großer Dehnung, hoher Leistungsdichte und relativ hoher Schaltfrequenz ermöglichen magnetische Formgedächtnislegierungen neuartige Anwendungen, die mit bisherigen adaptiven Materialien nicht realisierbar waren. Die einfachen Aufbauprinzipien erlauben im Bereich der Mikrosystemtechnik eine deutlich größere Integrationsdichte. Dies wird vor allem in mikrostrukturierten Bauelementen und mikromechanischen Instrumenten für die chemische Analytik vorteilhaft sein. Durch den inversen Effekt wird der Aufbau von Dehnungssensoren mit einem sehr großen Dynamikbereich möglich. Somit können bei der Fertigungsautomation kraftgeregelter Greifer realisiert werden, die weiche, empfindliche Teile zuverlässig handhaben können. Die Aktivierung durch externe Magnetfelder verspricht neue Techniken der minimalinvasiven Chirurgie.

Wesentlich für diese zukunftsweisenden Anwendungen sind ein Verständnis der Mechanismen in dieser Werkstoffklasse und die Materialentwicklung bis hin zu ökonomischen, polykristallinen Werkstoffen und dünnen Schichten. Der neue Freiheitsgrad der magnetfeldkontrollierten Orientierungsänderung beeinflusst das Material von der atomistischen bis in die makroskopische Längenskala, so dass eine enge, interdisziplinäre Zusammenarbeit von Werkstoffwissenschaftlern, Ingenieuren, Mathematikern, Physikern und Chemikern erforderlich ist. In dem hier beantragten Schwerpunktprogramm sollen die vorhandenen Aktivitäten von der materialwissenschaftlichen Grundlagenforschung bis hin zur Bauteil-Konzeption vernetzt und koordiniert werden, so dass Deutschland in dieser sich abzeichnenden Schlüsseltechnologie eine führende Rolle übernehmen kann.

2 Stand der Forschung

2.A Funktionsprinzip

Der magnetische Formgedächtniseffekt (MFG-Effekt) tritt in der ferromagnetischen martensitischen Phase auf. Bei der am besten untersuchten Heuslerlegierung Ni_2MnGa hat die martensitische Tieftemperaturphase eine tetragonale Symmetrie mit der leichten Magnetisierungsrichtung in Richtung der kürzeren c-Achse. Legt man ein Magnetfeld senkrecht zu dieser Richtung an, so werden nicht wie sonst in Ferromagneten Wände zwischen magnetischen Domänen bewegt und die Magnetisierung in Feldrichtung gedreht. Stattdessen ist eine Änderung der Kristallorientierung energetisch begünstigt, welche die magnetisch leichte Richtung in Richtung des Magnetfeldes bringt. In Abbildung 1 ist dieser Effekt an einem Einkristall schematisch dargestellt. Im Ausgangszustand wird durch einen uniaxialen Druck die Ausrichtung der kürzeren c-Achse in Richtung der äußeren Kraft bevorzugt (a). Durch das Anlegen eines externen Magnetfeldes senkrecht hierzu wird die Ausrichtung der leichten magnetischen Achse in Richtung des Magnetfeldes bevorzugt (b). Fällt die leichte magnetische Achse mit der kürzeren c-Achse zusammen, so ändert sich von (a) nach (c) mit der Kristallorientierung auch die äußere Form. Um diese makroskopische Längenänderung durch ein externes Magnetfeld zu erreichen, müssen beide Varianten (Kristallorientierungen) durch eine leicht bewegliche Zwillingsgrenze verbunden sein.

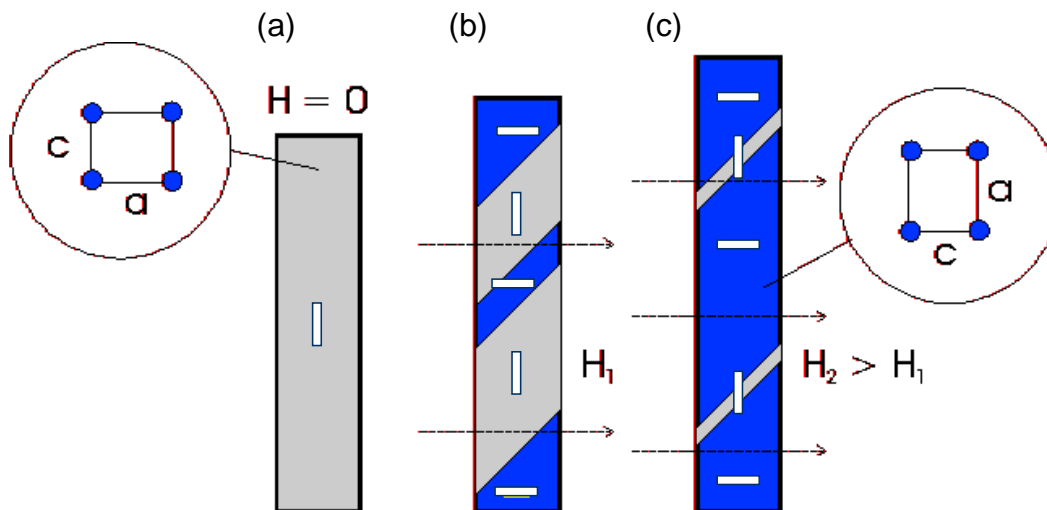


Abbildung 1: Schematische Darstellung des magnetischen Formgedächtniseffektes. Kleine helle Balken symbolisieren die Richtung der kristallographischen c-Achsen, die mit den leichten magnetischen Richtungen zusammenfallen und kürzer als die a-Achsen sind. Die durch Zwillingsgrenzen getrennten Varianten (Bereiche unterschiedlicher Kristallorientierung) sind blau bzw. grau gekennzeichnet

- (a): Nach der Anwendung eines äußeren, vertikalen Druckes ohne äußeres Magnetfeld richtet sich die kürzere c-Achse nach oben aus und der Kristall zeigt die kleinstmögliche Ausdehnung in diese Richtung.
- (b): Legt man ein horizontales Magnetfeld H_1 an, so wird die horizontale Ausrichtung der leichten magnetischen Achse energetisch begünstigt. Durch Verschiebung beweglicher Zwillingsgrenzen können deshalb die blau gekennzeichneten Varianten auf Kosten der grau gekennzeichneten wachsen.
- (c): Im Bereich des Schaltfeldes H_2 sind fast nur noch die blau gekennzeichneten Varianten vorhanden, bei denen die längere a-Achse vertikal ausgerichtet ist. Damit ist die maximale Dehnung erreicht (aus [Tellinen02]).

In den Ausgangszustand kommt man durch ein um 90° gedrehtes Magnetfeld oder durch mechanische Vorspannungen zurück.

An nicht-stöchiometrischen Ni₂MnGa Einkristallen sind in den ersten Experimenten von Ullakko [Ullakko96] in der Gruppe von O'Handley (MIT) 0,2 % Dehnung beobachtet worden. Der Durchbruch wurde mit 6 % Dehnung erreicht [Murray00], mittlerweile können bis zu 10 % Dehnung im orthorhombischen, 7M modulierten Ni₂MnGa in moderaten Magnetfeldern unter 1 Tesla an Einkristallen erreicht werden [Sozinov02].

Ein aktueller Überblick findet sich in [Vasil'ev03].

2.B Einordnung der Aktuatoreigenschaften

In diesem Abschnitt sollen kurz die wesentlichen Materialeigenschaften der bisher bekannten MFG-Systeme dargestellt und mit den konkurrierenden adaptiven Materialien (elektrisch aktivierte Piezokeramiken, thermisch aktivierte nicht-magnetische Formgedächtnis (FG)-Legierungen, magnetisch aktivierte magnetostruktive Materialien) verglichen und bewertet werden.

Dehnung:

Mit Ni₂MnGa sind bis zu 10 % Dehnung bei Raumtemperatur erreicht worden, fast zwei Größenordnungen mehr als mit dem magnetostruktiven Material „Terfenol-D“ (0,24 %) und deutlich mehr, als mit den technisch eingesetzten Piezokeramiken (0,1 %). In die Forschung zu Piezokeramiken ist mit der kürzlichen Entdeckung von 1,7 % Dehnung in (PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O₃)_{1-x}(PbTiO₃)_x (PMN-PT) Einkristallen aber neue Bewegung gekommen. Thermisch aktivierte FG-Legierungen zeigen typischerweise Dehnungen im Bereich von 4-8 %, maximal auch Werte über 10 %.

Schaltfelder

Im Gegensatz zu Piezokeramiken, die hohe elektrische Felder benötigen, können MFG-Legierungen durch Magnetfelder im Bereich von 0,5 bis 1 Tesla geschaltet werden. Diese Felder liegen in der gleichen Größenordnung wie am Anfang der Entwicklung magnetostruktiver Materialien. Die in dieser Materialklasse mittlerweile erfolgreiche Reduzierung der Schaltfelder muss für die MFG-Legierungen noch erreicht werden. Von entscheidender Bedeutung für die Kinetik ist die Mikrostruktur der martensitischen Phasen. Defekte, wie z. B. Korngrenzen, Ausscheidungen etc. können die Bewegung der Zwillingsgrenzen behindern und damit das Schaltfeld erhöhen bzw. ein Schalten unmöglich machen. Deshalb erreichen Einkristalle die größten Dehnungen und erfordern die geringsten Schaltfelder.

Einsatztemperatur

In den Ni-Mn-Ga Legierungen mit den größten Dehnungen ist die Einsatztemperatur durch die Werte von T_M und T_C nach oben auf etwa 70° C begrenzt. Steigerungen auf 140° C, erscheinen für einen technischen Einsatz wünschenswert. Bei tiefen Temperaturen ist die Anwendung bis mindestens 173 K möglich [Heczko03].

Effizienz

Nach einer Abschätzung von O'Handley et al. [O'Handley00] sollte der magnetomechanische Kopplungskoeffizient k , der das Verhältnis von geleisteter mechanischer Arbeit zu der gesamten aufgebrauchten Arbeit (magnetisch + mechanisch) beschreibt, für einkristalline Aktuatoren in der Nähe von eins liegen, so dass die magnetische Energie fast vollständig in mechanische Arbeit umgesetzt werden kann. Erreicht worden sind bisher Kopplungsfaktoren von 0,75 [www.adaptamat.com], vergleichbar mit Aktuatoren aus Terfenol-D und Piezokeramiken, deren Koeffizienten im Bereich 0,7 - 0,75 liegen und die nur von PMN-PT Einkristallen mit 0,9 übertroffen werden.

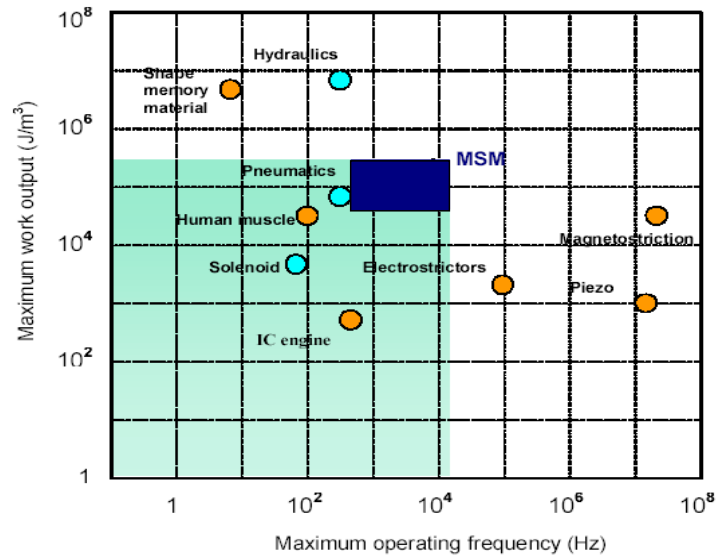


Abbildung 2: Einordnung unterschiedlicher Aktuatorwerkstoffe anhand ihrer maximalen Energiedichte und maximalen Arbeitsfrequenz. Die grün gekennzeichnete Fläche deutet die erreichbare Leistungsdichte an ([O'Handley00]).

Schaltfrequenzen

Bei MFG-Legierungen wird die Umschaltgeschwindigkeit durch die Schallgeschwindigkeit begrenzt. In ersten MFG-Demonstratoren wurden Schaltfrequenzen bis 800 Hz erreicht [O'Handley00, Tellinen02], unter Feldpulsen wurden Schaltzeiten von 620 μs gezeigt [Maroni04]. Diese Schaltzeiten liegen deutlich unter denen gewöhnlicher thermisch getriebener FG-Legierungen, bei denen die Umwandlungsgeschwindigkeit durch die Wärmeleitung begrenzt wird.

Die Dauerfestigkeit von Ni-Mn-Ga Aktuatoren wurde schon für über 2×10^8 Zyklen nachgewiesen [Tellinen02].

Energiedichte

Für den Bau kompakter Aktuatoren ist die spezifische Energiedichte der entscheidende Parameter. Wie in Abbildung 2 dargestellt, erreichen MFG-Legierungen für höhere Schaltfrequenzen hervorragende Werte.

Darüber hinaus erlauben MFG-Legierungen einen einfachen elektromechanischen Aufbau ohne Verschleißkomponenten und benötigen im Vergleich zu Piezokeramiken geringe elektrische Spannungen.

2.C Mikrostruktur

Bisher sind die größten Dehnungen an Ni_2MnGa Einkristallen erzielt worden. Auch für die Untersuchung der fundamentalen magnetomechanischen Wechselwirkung benötigt man einkristalline Proben definierter Zusammensetzung. Die Zucht von Ni-Mn-Ga-Einkristallen aus der Schmelze ist auf Grund des inkongruenten Schmelzverhaltens der Legierungen, des hohen Dampfdrucks des Legierungselementes Mangan sowie der Neigung zur Blasenbildung in der Schmelze und der Entstehung von Fremdphasen erschwert. Neue Verfahren zur Darstellung von $\text{Ni}_x\text{Mn}_y\text{Ga}_z$ - Einkristallen und verwandter Systeme sind zur Zeit in Erprobung. Hier ist insbesondere eine modifizierte Bridgman-Technik zu erwähnen, die am Hahn-Meitner-Institut entwickelt wurde. Mit diesem neuartigen metallurgischen Verfahren hergestellte Ni-Mn-Ga Kristalle sind weitgehend poren- und einschlussfrei und von homogener Zusammensetzung.

An Polykristallen sind wegen der Lagenmannigfaltigkeit der Kristallite die Dehnungen kleiner als an Einkristallen, können aber über 4 % erreichen [Ullakko01]. Modellrechnungen deuten darauf hin, dass uniaxial texturierte Polykristalle maximal die Hälfte der Dehnung von Einkristallen

erreichen sollten, untexturierte Polykristalle maximal ein Fünftel [Marioni02]. Da sich jedes Korn nur in kristallographisch bestimmte Richtungen ausdehnt, können Inkompatibilitäten an den Korngrenzen auftreten, die das Schaltfeld erhöhen bzw. ein Schalten verhindern.

Die innere Struktur von Zwillingkorngrenzen und ihre Beweglichkeit sind gegenwärtig schlecht verstanden. Für einen großen MFG-Effekt muss das Pinning der Zwillingsgrenze vermieden werden. Bekannt ist, dass Training sowohl an Polykristallen [Efstathiou04] als auch an Einkristallen die maximale Dehnung z. B. von 6 auf 9,7% erhöhen kann [Müllner04].

Zur theoretischen Beschreibung von Polykristallen kann ein Konzept verwendet werden, für das die Kenntnis der Minima („potential wells“) der nichtlinearen magnetoelastischen Energie hinreichend ist [DeSimone02]. Für nichtmagnetische FG-Legierungen ist es James und Hane gelungen [James00], einen entsprechenden Ansatz auf Polykristalle zu übertragen. Dabei konnte gezeigt werden, dass sich schon aufgrund der Symmetrie der Transformation und der Textur Kriterien dafür gewinnen lassen, welche Materialien nicht nur als Einkristalle, sondern auch als Polykristalle gute Formgedächtniseigenschaften aufweisen. Generell hat sich in Übereinstimmung mit den Experimenten zu nicht-magnetischen FG-Legierungen ergeben, dass Martensite mit niedriger Symmetrie (monoklin wie in Ni-Ti) aufgrund der höheren Anzahl von Zwillingvarianten für große Dehnungen in Polykristallen günstig sind. Der Ansatz soll auf den wesentlich komplexeren Fall von MFG-Legierungen übertragen werden. Die elastische Inkompatibilität und schlechte Beweglichkeit der Zwillingkorngrenzen in diesen niedrigsymmetrischen Kristallsystemen bedeuten jedoch, dass die Magnetfeld-induzierten Transformationsprozesse in den polykristallinen magnetischen Formgedächtnislegierungen als Kompromiss zweier entgegenwirkender Tendenzen stattfinden müssen. Ein anderer Ansatz ist die Herstellung von Ni₂MnGa/Polymer-Kompositen, die sich auch durch große Energiedissipation bei der Zwillingsbewegung auszeichnen [Feuchtwanger03].

2.D Schichten

Dünne Schichten der FG-Legierungen können im Gegensatz zu massiven Proben wohl definierte austenitisch-martensitische Grenzflächen aufweisen. Somit kann neben der linearen Dehnung auch die Scherung für Aktuatoren verwendet werden. Nach einem Vorschlag von Bhattacharya et al. [Bhattacharya99] kann die Martensit-Austenit-Umwandlung zum Beispiel mit einem tunnelartigen Aktuator aus teilweise freitragenden Ni₂MnGa-Schichten ausgenutzt und mit Magnetfeldern geschaltet werden. Um maximale Effekte zu erzielen, sollten epitaktische (001)-orientierte Schichten verwendet werden. Nach der Theorie für FG-Legierungen [James00] sollten untexturierte, tetragonale Ni₂MnGa-Schichten keinen nennenswerten Effekt zeigen. Für (001)-texturierte Schichten sollte die größte Dehnung für eine bestimmte optimale Korngröße erreicht werden [James00].

Heusler-Legierungen [Jakob04] und Manganate können auf geeigneten Substraten in Form dünner Schichten epitaktisch deponiert werden. Die ferromagnetische Heusler-Legierung Ni₂MnGa wächst bei einer moderaten Temperatur auf unterschiedlichen Substraten pseudomorph auf [Dong99, Dong00], da über unterschiedliche c/a Verhältnisse leicht die Fehlpassung zum Substrat ausgeglichen werden kann [Godlevsky01]. An Ni₂MnGa [Rumpf03] und Ni₂MnAl [Büsgen04] Schichten konnte der FG Effekt nachgewiesen werden, kürzlich ist bei tiefen Temperaturen auch der MFG-Effekt an freitragenden Ni₂MnGa Schichten beobachtet worden [Dong04].

2.E Anforderungen an aktive Materialien

Damit der MFG-Effekt auftreten kann, sind nach bisherigem Kenntnisstand folgende Materialeigenschaften notwendig oder günstig:

- Eine Wechselwirkung mit einem Magnetfeld tritt nur unterhalb der Curietemperatur T_C ein. Makroskopische Formänderungen können nur in der Tieftemperaturphase mit niedriger Symmetrie, d. h. unterhalb der Martensit-Starttemperatur T_M erreicht werden.

- Die Zwillingsgrenzen müssen leicht verschiebbar sein [James98]. In Ni₂MnGa mit den martensitischen Strukturen 5M und 7M wird dies durch weiche Phononen („shuffling“) erleichtert [Zeludev96, Heczko02]. Darüber hinaus muss das „Pinning“ der Zwillingsgrenzen an Defekten möglichst gering sein. Die leichte Verschiebbarkeit der Zwillingsgrenzen ist auch die Voraussetzung für die bekannte „Superelastizität“ (gummiartiges Verhalten) von nicht-magnetischen Formgedächtnis (FG)-Legierungen.
- Die Sättigungsmagnetisierung M_S muss hoch sein. Nach Murray et al. [Murray01] wird das magnetische Schwellenfeld H , das wenigstens nötig ist um Zwillingsgrenzen zu verschieben, durch das Gleichgewicht zwischen der mechanischen Energiedichte (bestimmt durch die äußere Spannung σ) und der magnetischen Energiedichte (bestimmt durch die Sättigungsmagnetisierung M_S) gegeben:

$$\sigma \varepsilon_0 = M_S H \quad \text{Gl. 1}$$

Eine hohe Sättigungsmagnetisierung erlaubt daher niedrigere Schalfelder und höhere Kräfte.

- Die Kristallanisotropie muss groß sein. Für das Auftreten des MFG-Effektes muss der konkurrierende Prozess, das Herausdrehen der Magnetisierung aus der leichten Achse, möglichst schwer werden. Die Energiedichte der magnetokristallinen Anisotropie K muss daher größer sein als die Differenz der Zeeman-Energiedichte für die beiden Zwillingslagen ($K > M_S H$). Die mechanische Arbeit, die zur Bewegung einer Zwillingsgrenze notwendig ist, kann durch die maximale Dehnung ε_0 unter dem uniaxialen Druck σ_{TW} , der notwendig ist, Zwillinge ineinander umzuwandeln, abgeschätzt werden [Sozinov02].

$$K > \varepsilon_0 \sigma_{TW} \quad \text{Gl. 2}$$

In Experimenten [Sozinov02] liegt die Anisotropie-Energiedichte bei $1,6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, was in guter Übereinstimmung mit den kleinen Spannungen von 2 MPa ist.

- Die maximal erreichbare Dehnung für tetragonale Systeme ist $\varepsilon_0 = 1 - (c/a)$. Eine große Differenz der Gitterkonstanten im Martensit ist vorteilhaft.

2.F Materialsysteme

Im folgenden wird kurz dargestellt, in welchen Materialklassen und wie die Suche nach neuen Systemen mit MFG-Verhalten ansetzen muss, um die vorher beschriebenen Anforderungen zu erfüllen.

Um eine reversible martensitische Transformation zu ermöglichen, müssen Verspannungen vermieden werden, die durch unterschiedliche Atomvolumina von Martensit und Austenit entstehen. Metallische martensitische Systeme lassen sich in zwei Gruppen teilen [Wassermann99], Systeme auf Fe-Basis (z. B. Fe-Ni, Fe-Pt) und Hume-Rothery (HR) Systeme (z. B. Cu-Zn, Ni-Al, Ni-Mn-Al). Der Vorteil der Fe-Basis Systeme liegt in der hohen Magnetisierung, jedoch beobachtet man nur in wenigen Systemen die notwendige reversible Umwandlung. So zeigt Fe₃Pt 0,5 % Dehnung bei 4,2 K [Kakeshita00] und ist vor allem als Modellsystem interessant, da hier die mit der martensitischen Transformation verbundenen Gitterinstabilitäten recht gut verstanden sind [Kästner99, Wiele99]. Im System Fe-Pd wurden 0,6 % Dehnung bei -16 °C [James98] beobachtet.

In den HR Phasen hat die Elektronenkonzentration e/a (s+p Elektronen) einen entscheidenden Einfluss auf die martensitischen und magnetischen Phasenumwandlungen. Durch die Veränderung der Zusammensetzung und Zulegerungen kann das e/a Verhältnis kontrolliert werden, so dass nutzbare Materialeigenschaften im Bereich $7,4 \leq e/a \leq 8,0$ erreicht werden (Abbildung 3).

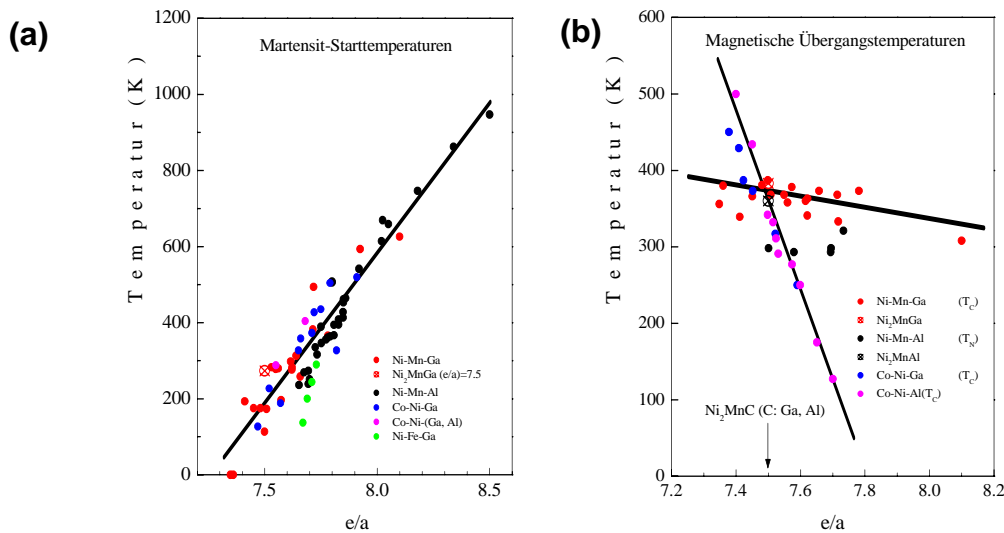


Abbildung 3: (a) Martensit-Starttemperaturen T_M und (b) magnetische Übergangstemperaturen T_C und T_N als Funktion der Elektronenkonzentration pro Atom e/a für verschiedene Dreistoffsysteme mit L_{21} Struktur im Konzentrationsbereich um die Heusler Zusammensetzung A_2BC (durch Pfeil gekennzeichnet; $e/a=7,5$) [Wassermann, unveröffentlicht]

Darüber hinaus ist der Ordnungsgrad wichtig [Webster84], ein Effekt der auch in dem zu Ni_2MnGa isoelektrischen System Ni_2MnAl gezeigt wurde [Acet02, Manosa03].

Weitere intermetallische Systeme, die wesentliche Voraussetzungen für den MFG-Effekt erfüllen sind: Co-Ni [Zhou03], Ni_2MnSb , Cu_2MnGa [Wuttig00], Co-Ni-Ga [Wuttig01], Co-Ni-Al [Oikawa01], Ni-Fe-Ga [Oikawa02], Fe-Ni-Co-Ti [Sehitoglu01], Fe-Cr-Ni-Mn-Si-Co [Enokizono02], Co-Ni-Al [Karaca03]. Für eine systematische Suche ist die kombinatorische Schichtherstellung ein sehr effizienter Ansatz [Takeuchi03].

Eine Sonderstellung nehmen magnetische Übergangsmetalloxide ein. So wurde in antiferromagnetischem $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ eine Umorientierung der orthorhombischen leichten Achsen mit 1 % Dehnung bei 14 T beobachtet [Lavrov02]. Weitere interessante Werkstoffe finden sich in der Klasse der perovskitischen Manganate und verwandter magnetischer Oxide mit sehr großem Magnetowiderstand [von Helmholt93]. Dieser "colossal magnetoresistance" (CMR)-Effekt hat starkes Interesse für potentielle Anwendungen in der Spinelektronik gefunden. Für mögliche MFG-Effekte in diesen Systemen ist vor allem die starke magnetoelastische Kopplung relevant [Rößler04].

2.G Phasentransformationen

Im archetypischen MFG-System Ni-Mn-Ga finden in den hier interessierenden Konzentrationsbereichen um Ni_2MnGa mit abnehmender Temperatur folgende Phasenübergänge statt: paramagnetisch, kubisch – ferromagnetisch, kubisch – ferromagnetisch, martensitisch tetragonal - intermartensitische Übergänge. Der martensitische Übergang kündigt sich oberhalb T_M durch prämartensitische Phänomene, in Ni_2MnGa auch durch Aufweichen bestimmter Phononen [Kokorin01], an. Man spricht von einem Phasenübergang schwach erster Ordnung [Mañosa97]. Mit inelastischer Neutronenstreuung konnten in Ni_2MnGa in der kubischen Austenitphase (L_{21}) Anomalien im transversalen $TA_2[\xi\xi0]$ -Ast mit der Modulation der Zwischenphase aufgezeigt werden [Zeludev96]. Neue Untersuchungen zeigen, dass diese Zwischenphase entscheidend für die Eindeutigkeit des Reaktionspfades ist [Bhattacharya04].

2.H Theoretische Beschreibung

Zur Beschreibung des MFG-Effekts gibt es in der Literatur neben phänomenologischen Ginzburg-Landau-Modellen [Planes97] vor allem mikromagnetische Modelle und Berechnung nach *first principles*.

Von James und Wuttig [James98] wurde ein mikromagnetisches Modell vorgeschlagen, das auf der Minimierung der relevanten Energiebeiträge beruht (Zeeman, magnetostatische, mechanische Beiträge) und in dem zweidimensionale Kristallmodelle numerisch simuliert werden. Bogdanov et al. [Bogdanov03] konnten mit einer phänomenologischen Theorie zeigen, dass es thermodynamisch stabile gemischte Zustände unter äußeren Spannungen und Magnetfeldern geben kann, wobei mehrere Martensitvarianten und daran gekoppelte magnetische Domänen gemeinsam vorliegen. Ab einer bestimmten mechanischen Vorspannung verschwindet diese Koexistenz und die Transformation findet als Prozess erster Ordnung mit abrupten Dehnungen statt, in Übereinstimmung mit den Experimenten.

Bei der Berechnung der strukturellen und magnetischen Eigenschaften von MFG-Legierungen mit *first principles* sind im letzten Jahr große Fortschritte erzielt worden. Als Ursache für die Instabilität der austenitischen Phase werden der Jahn-Teller Effekt, Nesting der Fermifläche, Elektron-Phonon-Kopplung und damit verbundene Kohn-Anomalien diskutiert [Bungaro03, Zayak04]. Für die Stabilisierung der tetragonalen Phase spielen die langperiodischen Gittermodulationen (5M, 7M) eine entscheidende Rolle [Zayak03], die wiederum eine einfachere Transformation der Varianten ermöglichen als eine direkte Verschiebung der Zwillingsgrenze. Elektronentheoretische Berechnungen haben auch wesentlich zur Suche nach neuen Systemen mit MFG-Effekt beigetragen [Büsgen03].

3 Wissenschaftliche Ziele/Arbeitsplan

In diesem Schwerpunktsprogramm sollen durch Zusammenführen verschiedener Arbeitsgruppen Fortschritte zum Grundverständnis der MFG-Legierungen erzielt werden, um dann auf dieser Basis Materialoptimierung bis hin zur Entwicklung technischer Anwendungskonzepte erreichen zu können.

3.A Demonstratoren und Konzepte

Die spezifischen Eigenschaften von MFG-Legierungen (s. 2.B) erfordern neue Konzepte bei der Entwicklung von Aktuatoren und Sensoren. Anhand der folgenden Beispiele soll im Rahmen des SPP das große Anwendungspotenzial demonstriert werden. Die prinzipielle Eignung ist z. B. für Linearaktuatoren [Tellinen02], einen Schrittmotor, eine Pumpe [www.adaptamat.com] und Ventile [du Plessis03] demonstriert worden.

3.A.a Fertigungsautomatisierung

Im Bereich der Fertigungsautomatisierung werden bisher vor allem Elektromotoren sowie pneumatische und hydraulische Antriebe verwendet. Elektromotoren sind zwar flexibel anwendbar, haben jedoch einen komplexen Aufbau und ein schlechtes spezifisches Arbeitsvermögen. Pneumatische und hydraulische Aktuatoren erreichen zwar eine deutlich höhere Leistungsdichte, sind in ihrer Dynamik jedoch sehr eingeschränkt und erfordern aufwändige Regelungskonzepte.

Magnetische Formgedächtnisaktuatoren könnten hier ihre Stärke zeigen, da sie bei kleinen Stellwegen und moderaten Kräften das Aufbringen einer feinfühlig geregelten Kraft oder einen sehr genau einstellbaren Weg ermöglichen. Bei der Handhabung sensibler Objekte werden kraftgeregelte Greifer benötigt [Hesselbach97]. Zur Minimierung von Nebenzeiten sollte der Greifvorgang möglichst dynamisch erfolgen. Hier liegt ein großer Vorteil der magnetischen gegenüber den thermischen Formgedächtnislegierungen.

3.A.b Aktive Schwingungsdämpfung

Neben der sich sehr positiv auswirkenden großen Eigendämpfung von MFG-Legierungen verspricht vor allem die deutlich höhere Energiedichte und Dehnung den Aufbau von kompakteren Festkörperaktuatoren, bei denen auf eine zusätzliche mechanische Wegvergrößerung verzichtet werden kann.

Im Fertigungsbereich müssen beispielsweise beim Finishing gezielt zeitlich modulierte Kräfte aufgebracht werden [Hoffmeister97]. Die nötigen Druckkräfte liegen im Bereich von 0,1 bis 2 N/mm² und sind gut mit magnetischen Formgedächtnisaktuatoren aufzubringen. Bei spanabtragenden Prozessen kann so durch eine hochfrequente Schwingungskompensation eine deutliche Qualitätssteigerung des Prozesses erzielt werden.

3.A.c Medizintechnik

Inkorporierte Sonden oder mikrochirurgische Geräte, die auf MFG-Legierungen und Polymer-MFG-Legierungskompositen basieren, können durch äußere Magnetfelder aktiviert und manipuliert werden. Durch die Einbindung thermosensitiver Formgedächtnispolymere [Lendlein02] kann eine zusätzliche thermische Stimulation des FG-Effekts erfolgen und so magnetische und thermische Stimulation kombiniert werden. Durch den kompakten, robusten Aufbau werden neue Werkzeuge oder Implantate für Anwendungen in der minimalinvasiven Chirurgie möglich, ein Bereich, in dem auch klassische Formgedächtnislegierungen zuerst ihre Anwendung gefunden haben.

3.A.d Mikroaktuatorik

MFG-Legierungen erlauben den Bau von Mikroaktuatoren, die aus wenigen Komponenten bestehen und dadurch ein hohes Miniaturisierungspotential besitzen. So konnte ein neuer Aufbau entwickelt werden, der durch die gleichzeitige Nutzung entgegengesetzt gerichteter ferromagnetischer Kräfte und vom Formgedächtniseffekt hervorgerufener Kräfte zwei aktive Bewegungsrichtungen besitzt und trotzdem aus nur einem Bauteil besteht [Kohl04a]. Durch geringe Baugröße und somit geringere Wirbelstromverluste dürfte hier der dynamisch nutzbare Frequenzbereich noch größer als bei massiven Bauteilen sein.

Solche Aktuatoren können zur Ventilsteuerung eingesetzt werden, wie sie für ein „lab on a chip“ notwendig ist. In diesem Anwendungsbereich soll die komplette chemische oder biologische Analytik auf einem Mikrochip integriert werden, was Analysezeiten und Probenmengen, vor allem aber den Bedarf an toxischen Chemikalien, drastisch reduziert. Mit MFG-Legierungen kann ein großer Ventilhub bei kleiner Baugröße und kontaktlosem Antrieb durch ein Magnetfeld realisiert werden. Erste Mikroventile auf der Grundlage von NiMnGa-Dünnschichten sind kürzlich entwickelt worden [Kohl04b].

Aufgrund der großen Schaltwege bieten sich MFG-Legierungen auch für optische Bauelemente an. Hier sind häufig nur geringe Aktuatorkräfte notwendig. Der MFG-Effekt hat den Vorteil, dass nur zum Schalten jedoch nicht zum Halten Energie aufgewendet werden muss. Als Beispiel sind Aktuatoren zur Verstellung von Mikrospiegeln denkbar, die in aktuellen digitalen Kinoprojektoren (Texas Instruments) noch elektrostatisch bewegt werden. Neuartige Spiegelaktuatoren aus Ni-Mn-Ga Schichten erreichen extrem große Ablenkwinkel bis 120° [Kohl04c].

Bei der Konzeption neuartiger Bauelemente wird vor allem auf die Eignung zur Serienfertigung geachtet, um eine nachträgliche, aufwändige Einzelmontage zu vermeiden.

Für diese Anwendungen ist auch die Entwicklung angepasster mikrostrukturierter Magnetkreisentwürfe notwendig, die mit geeigneten Spulensystemen [Kohlmeier02] und weichmagnetischen Flussführungen [Föhse02] die notwendigen Feldstärken erreichen.

3.A.e Mikrosensorik

In Dehnungssensoren kann der inverse Effekt verwendet werden, sei es durch Induktion [Suorsa04] oder Änderung des Magnetowiderstandes [Golub04]. Die große Dehnung erlaubt

dabei eine gute Anpassung der mechanischen Impedanz z. B. an Polymerwerkstoffe. In Kombination mit TMR-Sensor-Aufbauten [Löhndorf02] verspricht der Einsatz von Heusler-Legierungen zudem eine hohe Nachweisempfindlichkeit aufgrund der hohen Spinpolarisation. Komplexe, intelligente Mikrosysteme mit wenigen Komponenten können realisiert werden, indem dünne Schichten aus magnetischen Formgedächtnislegierungen gleichzeitig als Aktuatoren und Sensoren eingesetzt werden.

3.A.f Aktuatoraufbau

Darüber hinaus ist die Anpassung des Aktuatoraufbaus an die speziellen Werkstoffkennlinien notwendig sowie die Entwicklung von Konzepten für eine verlustarme Einkopplung der Ansteuerenergie in den Aktuatorwerkstoff, um den großen Wirkungsgrad und die hohe Grenzfrequenz praktisch nutzbar zu machen. Ein Lösungsansatz z. B. bei hoher Kennliniensteilheit ist es, den Aktuator aus mehreren individuell ansteuerbaren Subaktuatoren aus MFG-Legierungen aufzubauen, die seriell in Wirkrichtung angeordnet sind. Auch sollten zur Vermeidung von Wirbelstromverlusten Aktuatoraufbauten unter Verwendung von dünnen, polykristallinen Drähten oder Blechen aus MFG-Legierungen entwickelt werden.

3.B Herstellung und Charakterisierung

Ausgehend von den unter 2.C skizzierten Konzepten müssen weitere Verbindungen entwickelt werden, die für Anwendungen günstigere Materialeigenschaften besitzen. Diese sind insbesondere:

- Reduktion der Schaltfelder auf unter 0,1 T
- Maximierung der Dehnung
- Erhöhung der Einsatztemperatur über 140°C
- Verbesserung der Duktilität

Für die Suche nach geeigneten intrinsischen Eigenschaften werden neben der Erschmelzung massiver Proben vor allem effiziente Präparationsmethoden (wie z. B. die kombinatorische Schichtherstellung) verwendet, um auf einfache Art große Zusammensetzungsbereiche abzudecken und zu charakterisieren. Bisher sind die besten Eigenschaften an Einkristallen erzielt worden. Daher sollen hier einerseits Herstellungsverfahren zur Einkristallsynthese, die gegebenenfalls auch industriell anwendbar sind, untersucht werden. Andererseits sollen für einen ökonomischen Einsatz geeignete Verfahren zur Herstellung und Texturierung (Schmelz-, Umform-, Rekristallisations-) funktionaler Polykristalle entwickelt werden. MFG-Legierungen können auch in eine Polymermatrix eingebracht werden. Vorteile dieses Zugangs sind: (I) Die Körner können durch Anlegen eines Magnetfeldes vor der Polymervernetzung unterhalb T_M orientiert werden. (II) Die Zerbrechlichkeit der polykristallinen Probe wird wesentlich reduziert. (III) Inkompatibilitäten bei der Verformung benachbarter Körner werden durch die (weichere) Matrix ausgeglichen. (IV) Bei höheren Frequenzen werden Wirbelströme reduziert. Geplant ist hier die Einbringung eines hohen Anteiles eindomäniger Formgedächtnispartikel in eine adhäsive Matrix zur ökonomischen Herstellung polykristalliner Aktuatoren. Aufgrund des großen Anwendungspotenzials wird dieser Ansatz auch theoretisch modelliert.

Für mikrostrukturierte Bauelemente ist zunächst die Herstellung dünner Schichten notwendig, die einen deutlichen, magnetisch induzierten Formgedächtniseffekt bei Raumtemperatur aufweisen. Die besondere Herausforderung liegt hier in Schichtaufbauten, die eine freie Bewegung der Zwillingsgrenzen ermöglichen, da ein dickes, hartes Substrat durch die geringen Aktuatorkräfte von magnetischen Formgedächtnislegierungen nicht verbogen werden kann. Als Unterlage kommen ultradünne Si-Membranen, weiche Polymere und lösliche Substrate in Frage sowie die Präparation freitragender Schichtstrukturen mittels Opferschichten. Andererseits kann eine geeignete Oberfläche eines Einkristalls zum epitaktischen Wachstum führen, so dass ähnlich wie in massiven Einkristallen der Idealzustand präpariert und untersucht werden kann. Im Hinblick auf mögliche Anwendungen soll mit geeigneten Buffern und bei geeigneten

Wachstumsbedingungen ein texturiertes, polykristallines Wachstum auf technischen Substraten erzielt werden.

Die gleichzeitige Charakterisierung der magnetischen und kristallographischen Mikrostruktur ist über mehrere Größenordnungen notwendig, so dass hochauflösende Lorenzmikroskopie, MFM und Kerr-Mikroskopie eingesetzt werden, um die Wechselwirkung von Domänenwänden mit Zwillingsgrenzen bis hin zu Bauteilen charakterisieren zu können.

3.C Materialwissenschaftliche Grundlagen

Wie bei der Charakterisierung muss auch ein umfassendes theoretisches Verständnis der MFG-Materialien verschiedene Längen- und Zeitskalen abdecken. Aus mikroskopischen Theorien können intrinsische Eigenschaften und gewisse physikalische Parameter der idealen Kristalle (magnetische Ordnung, Phononen, elastische Konstanten) und von Kristalldefekten (Gitterinstabilitäten, Punktdefekte und chemische Fehlordnung, Zwillingskorngrenzen) berechnet werden. Atomistische Modelle der Defektstrukturen und entsprechende Molekulardynamiksimulationen können elementare Prozesse beschreiben, die zur Mikrostrukturänderung und plastischen Dehnung führen. Auf mikroskopischer Skala müssen der Magnetismus, hier insbesondere die magnetische Anisotropie und die magnetoelastische Kopplung (Elektron-Phonon-Kopplung) als wesentliche Parameter verstanden werden. Diese mikroskopische Sichtweise muss um makroskopische Beschreibungstechniken für das thermodynamische Verhalten, die Magnetisierungsprozesse und die Kontinuumsmechanik erweitert werden.

Mit inelastischer Neutronenstreuung können die Gitterinstabilitäten untersucht werden, die den martensitischen Übergang bedingen. Insbesondere muss geklärt werden, welche atomistischen Ursachen die hohe Beweglichkeit der Zwillingsgrenzen hat. In einer Reihe von inelastischen Neutronenstreuexperimenten sollen diese Fragen zunächst an Ni-Mn-Ga-Legierungen in Abhängigkeit von Temperatur und angelegtem Magnetfeld untersucht werden.

Auf der mesoskopischen Längenskala stellt die Simulation der Reorientierung martensitischer Domänen und Strukturen unter dem Einfluss äußerer Magnetfelder eine besondere Herausforderung dar, da hier Simulationen auf großer Skala erforderlich werden. Zum einen muss die Bewegung von Atomgruppen (Scherung, Shuffle-Moden, Stapelfehler- und Zwillingsbildung, Strukturänderung an Oberflächen etc.) simuliert werden, zum anderen müssen gleichzeitig die magnetischen Freiheitsgrade sowie die Kopplungen der magnetischen Momente untereinander und an das Gitter berücksichtigt werden.

Auf großen Längenskalen ist die theoretische Beschreibung mit phänomenologischen Modellen notwendig, um das magnetomechanische Verhalten von Polykristallen und von makroskopischen Bauelementen in Anwendungen zu erfassen. Die phänomenologische Modellierung kann komplementär auf das Verständnis der physikalischen Parameter aus mikroskopischen Theorien und Simulationen aufbauen. Realstrukturen, mechanische Instabilitäten, Magnetisierungsstrukturen und Temperaturgradienten sind ebenfalls zu behandeln. Mittelfristiges Ziel ist, die mikrostrukturellen Umwandlungsprozesse in MFG-Legierungen direkt zu simulieren.

4 Methoden

Die römischen Hochzahlen geben die unter Punkt 8 aufgeführten interessierten Partner an.

4.A Demonstratoren und Konzepte

Der Bereich Konzeption von Bauteilen und Systemintegration massiver Bauelemente wird von mehreren Partnern abgedeckt. Eine Gruppe bringt ihre Erfahrungen im Aufbau von Demonstratoren aus Ni-Mn-Ga [Böhm02] und Piezokeramiken [Neugebauer02] ein^V, eine andere ihre Kompetenz zur Schwingungsdämpfung mit magnetostriktiven Elementen [Pagliarulo04]^{VII}. Von einer dritten Gruppe wird die Erfahrung mit Formgedächtnislegierungen, Piezokeramiken und magnetorheologischen Flüssigkeiten eingebracht^{II}, so dass das gesamte Spektrum an

bekanntesten aktiven Materialien abgedeckt wird. Die Miniaturisierung und Systemintegration wird von einer Gruppe verfolgt^{VI}, die ihre Kompetenz schon mit neuen Konzepten zur Batchfertigung von FG-Legierungen bewiesen hat [Leester-Schädel04].

Der Bereich Konzeption von Bauteilen und Systemintegration von Dünnschichten kann auf weitreichende Erfahrung in der FEM-Simulation^{III, IV}, Herstellung^I und Integration^{III, IV} von mikrotechnischen Bauteilen aufbauen (s. 3.A.d). Die für die Mikrostrukturierung nötige Infrastruktur ist vorhanden (Lithografie (UV^{III, IV, VI, XV}, Elektronenstrahl^{I, XV}, Röntgen^{III}), Beschichtungstechnik, Nass- und Trockenätzverfahren^{I, III, VI}, Galvanik^{I, VI}, sowie Lasermaterialbearbeitung^{VI}).

4.B Herstellung und Charakterisierung

Bei der Einkristallzucht von Ni-Mn-Ga und verwandten Systemen werden neben dem Bridgmanverfahren neue Methoden (u. a. elektrochemische) angewandt, die eine verbesserte Kontrolle der Stöchiometrie und Homogenität erlauben^X. Bei der Herstellung von Polykristallen bestehen langjährige Erfahrungen mit der Texturierung unterschiedlichster magnetischer Systeme, die hier für Ni-Mn-Ga eingesetzt werden sollen^{XI, XIX}. Das Training wird von einer Gruppe mit viel Erfahrung in diesem Gebiet abgedeckt^{XVIII}. Eine international führende Gruppe^{XII} im Bereich der Formgedächtnispolymere [Lendlein02, Alteheld04] bringt ihre Erfahrung bei der Entwicklung adaptiver Polymer/Metall-Komposite auf der Basis von Partikeln aus MFG-Legierungen ein.

Im Bereich der Schichtherstellung sind unterschiedlichste Herstellungsmethoden vertreten (PLD^{VIII, XV}, MBE^{XIV, XV}, Sputterdeposition^{IV, IX, XV}, Aufdampfen^{IX}, Elektrodeposition^{IV, VIII, X}), so dass durch Vergleichsstudien optimale Präparationsmethoden entwickelt werden können. Darüber hinaus kann mit in-situ Analytik (insbesondere Spannungsmessung mit Biegebalken^{IX}, RHEED^{VIII, XIV, XV}, Auger^{VIII, XIV} ...) direkt das Wachstum verfolgt werden. Kompetenzen im Bereich Herstellung von MFG-Schichten^{I, IX, XIV} [Rump03, Büsgen04, Winzek04] und magnetostriktiven Schichten^I und deren Integration in Dünnschichtaktuatoren und Sensoren [Frommberger03] sind vorhanden. Darüber hinaus kann auf die erfolgreiche Präparation und Funktionalisierung komplexer binärer und ternärer [Neu04] magnetischer Dünn- und Dickschichten^{IV, VIII} aufgebaut werden, sowie auf die Erfahrung mit dem Wachstum epitaktischer Heuslerlegierungen^{XIV, XV} und Manganaten^{IX, XV}. Eine besondere Rolle für die Weiterentwicklung der Materialeigenschaften spielt hier die kombinatorische Schichtherstellung und Charakterisierung, die es auf einfache Weise erlaubt, auf einer Probe einen großen Bereich von Zusammensetzung und Herstellungsparametern abzudecken^{XIV, XXI}.

Die Charakterisierung der Mikrostruktur von Zwillingen wird von einem in diesem Gebiet arbeitenden Kristallographen abgedeckt werden, der die Zwillingsbewegung und deren Wechselwirkung mit Defekten in-situ im konventionellen und hochauflösenden TEM untersuchen wird^{XVII} sowie einem Experten in hochauflösendem TEM (0.12 nm), Elektronenholographie und Lorentz Mikroskopie, so dass gleichzeitig die strukturelle und magnetische Mikrostruktur mit einer Auflösung bis 20 nm untersucht werden kann^{XX} [Lichte02]. Für die lokale Texturbestimmung eignet sich vor allem hochauflösendes EBSD^{XIX}. In den MFG-Legierungen ändern sich durch ein äußeres Magnetfeld sowohl Mikrostruktur und Form als auch die magnetischen Eigenschaften. Deshalb ist die gleichzeitige Messung dieser Eigenschaften von großer Bedeutung. Für Massivmaterialien soll deshalb eine Messapparatur aufgebaut werden, die diese Eigenschaften gleichzeitig integral messen kann^{XI}. Für die Beobachtung magnetischer Domänen- und Zwillingsstrukturen unter äußeren Magnetfeldern und Spannungen steht mit statischer und dynamischer Kerr-Mikroskopie [Hubert98] eine wirkungsvolle Methode zur Verfügung^{XVI}. Zur Untersuchung der Phasenumwandlungen werden verstärkt auch thermodynamische Methoden eingesetzt [Yan04]^{XIII, XIX}.

Zur Untersuchung des mechanischen Verhaltens polykristalliner Bauelemente können ortsaufgelöste Eigenspannungsanalysen [Chatterji02, Hohlwein03] mit speziellen Neutronendiffraktometern durchgeführt werden^{X, XXII}.

Darüber hinaus sind in den Partnerinstituten die üblichen Methoden zur Charakterisierung von Struktur, Mikrostruktur, magnetischen und mechanischen Eigenschaften vorhanden.

4.C Materialwissenschaftliche Grundlagen

Elektronentheoretische *ab initio* Untersuchungen erlauben neben der Berechnung der Elektronenstruktur und Gleichgewichtsgeometrie auch die Bestimmung der freien Energie. Hiermit sollen im Modellsystem Ni₂MnGa die Temperaturabhängigkeit der martensitischen Umwandlungen und der Transformationspfade beschrieben werden, wobei mit Hilfe des SFHingX-Code (basierend auf Dichtefunktionaltheorie) sowohl der Beitrag der Phononen [Walle02] als auch der Magnonen [Hickel04] berücksichtigt werden kann^{XXVI}.

Die magnetoelastische Kopplung kann in Simulationen mit Hilfe verallgemeinerter Monte Carlo Methoden behandelt werden, die es erlauben, das Volumen des Systems in Abhängigkeit vom magnetischen Zustand einzustellen^{XXIV}. Dieses Verfahren muss für Simulationen der Strukturänderungen in den MFG-Legierungen mit Heusler-Struktur weiter entwickelt werden. Schließlich soll die Methode der Molekulardynamiksimulation für "multimillion-atoms simulations" gestatten, Formänderungen auf mikroskopischer Skala mit den Formänderungen auf größerer Skala unter dem Einfluss äußerer Felder zu verknüpfen. Molekulardynamische Simulationen werden auch eine wesentliche Rolle bei der Beschreibung des (texturierten) Wachstums und der Mikrostrukturprozesse martensitischer Filme aus dieser Materialklasse spielen^X.

Für das Verständnis der nächsten Größenskala wird die phänomenologische Kontinuumstheorie des Magnetismus (Mikromagnetismus) und Kontinuumsmechanik mit geeigneter magnetoelastischer Kopplung angewendet^{XXV, XXVII}. Dabei kann auf umfangreiche mathematische Vorarbeiten zu nichtkonvexen Variationsproblemen und zur Ausbildung von Mikrostrukturen bei Phasenübergängen zurückgegriffen werden [Bethuel99, Conti00]. Für den besonders interessanten Fall dünner Schichten liegen Vorarbeiten sowohl für reine elastische Materialien [Friesecke02], als auch für magnetische Materialien [DeSimone02] vor. Zur Modellierung von MFG/Polymer Kompositen aus zwei elastischen Materialien wird die Composite-Finite-Element-Methode eingesetzt^{XXVII}, die auch elastische dreidimensionale Mikrostrukturen mit stark springenden Koeffizienten beschreiben kann.

Zur Untersuchung der Phasenumwandlung eignet sich vor allem die Neutronenbeugung^X (hier besteht eine enge Anbindung^{XXII} an die Hochflussneutronenquelle FRM-II), da gleichzeitig die kristallographische und die magnetische Struktur untersucht werden können. So besteht die Möglichkeit, Röntgen- sowie Neutronendiffraktometrie durchzuführen unter Variation der für MFG-Legierungen wesentlichen Parameter Temperatur (1,5 – 2000 K) und Magnetfeld (0 – 17 T) (BENSC, FRM-II). Mit inelastischen Neutronenstreuexperimenten können die Gitterpotentiale ausgemessen werden, die letztlich zur martensitischen Umwandlung führen. Diese Arbeiten sind wesentlich zur Validierung der theoretischen Modelle. Messungen der diffusen Neutronenstreuintensitäten ermöglichen es, die Fehlordnung im Kristallgitter sowie magnetische Korrelationen zu untersuchen^X. Materialforschungsdiffraktometer an Neutronen- sowie Synchrotronquellen erlauben es, die magnetisch induzierten Mikrospannungen im polykristallinen Werkstoff zu untersuchen^X.

Die Suche nach MFG-Legierungen mit verbesserten Eigenschaften ist bereits auf Legierungsreihen aus weiteren Stoffsystemen (Ni-Mn-In, Ni-Mn-Sb, Rh-Mn-Sb, Cu-Mn-In, Cu-Mn-Sn, Co-Ni-Al) ausgeweitet worden^{XXIII}.

5 Interne Vernetzung

Die vielfältigen Aspekte der in 2) klar abgegrenzten Materialklasse erfordern eine enge, interdisziplinäre Zusammenarbeit von Ingenieuren, Werkstoffwissenschaftlern, Mathematikern,

Physikern und Chemikern. So sind gute Einkristalle^x nicht nur für Aktuatoren notwendig, sondern auch Vorbedingung für die Messung der Phononenspektren^{xxii} und damit für die direkte experimentelle Überprüfung von *first principle* Modelle^{xxvi, xxiv}. Ausgehend von atomistischen Modelle^{xxvi} wird mittels Monte-Carlo Simulation^{xxiv} und mikroskopischen Kontinuumsmodellen^{xxv} die gesamte relevante Längenskala bis hin zu makroskopischen Modellen^{xxvii} von der Theorie beschrieben und im Experiment überprüft. Eine zentrale Linie führt von der theoretisch^{xxiv} unterstützten Materialentwicklung^{xiv, xxi, xxiii, xix}, über die Charakterisierung^{xi, xiii, xvi, xix} und Umsetzung^{xi} in Werkstoffe zu deren Integration in Demonstratoren^{vi, vii, vii}. Um für polykristalline^{xi, xix} bzw. polymerbasierte^{xii} Werkstoffe ein geeignetes Gefüge zu finden, muss zum einen theoretisch^{xxvii, xxv} verstanden werden, wie dieses aufgebaut sein soll, zum anderen experimentell geklärt werden, wie dieses hergestellt und trainiert^{xviii} werden kann. Von besonderer Bedeutung sind hier neben der Thermodynamik^{xiii, xix} die hochauflösenden^{xvii, xx} und feldabhängigen^{xvi} mikroskopischen Charakterisierungsmethoden, insbesondere die Eigenspannungsanalyse^x, mit der die unerwünschten Spannungsspitzen im polykristallinen Gefüge lokalisiert werden können.

Im Bereich dünner Schichten wird ein hohes Anwendungspotential gesehen, jedoch stellt die Herstellung und Funktionalisierung^{i, iii} eine Herausforderung dar, insbesondere die Erzeugung ausreichender Feldstärken^{iv}. Deshalb wird hier intensiv und simultan an unterschiedlichen Teilproblemen gearbeitet: von dem Idealsystem der epitaktischen Schichten^{xv}, dem Verständnis des Schichtwachstums^{ix}, deren Korrelation mit der Funktion^{viii} bis zur Integration in Sensorenⁱ und Aktuatoren^{iii, vii} und zu intelligenten Aktuator-Sensor-Systemenⁱⁱⁱ und deren Batch-Fertigung^{vi}. Charakterisierung^{xi, xiii, xvi, xvii, xx, xix}, Materialfragen^{xxi, xxiii} und die Suche nach einer geeigneten Mikrostruktur^{xi, xix, xxv} betreffen sowohl die dünnen Schichten als auch die massiven Materialien.

Eine enge Vernetzung wird durch die halbjährlichen Koordinationstreffen sowie jährlichen Sommerschulen (zu jeweils einem Themenbereich A, B, C) gewährleistet. Darüber hinaus wird eine Webseite eingerichtet, in deren öffentlicher Teil u. a. die Thematik didaktisch aufbereitet wird und die ein Diskussionsforum enthält, der interner Teil wird neben aktuellen Informationen eine Literaturdatenbank mit preprints enthalten.

Die Organisation des SPP erfolgt durch den Koordinator in Absprache mit dem Programmkomitee, das die gesamte Thematik des SPP repräsentiert.

6 Kontext zu anderen nationalen Förderaktivitäten

Es bestehen enge Kontakte zu verwandten Programmen, z. T. in Personalunion. Hierdurch wird das Wissen aus verwandten Bereichen in dieses neue SPP eingebracht.

So besteht eine Anknüpfung an das kürzlich genehmigte BMBF-Verbundvorhaben „Magnetische Materialien mit Formgedächtniseffekt“. In diesem Projekt werden zwei Mitarbeiter an Forschungseinrichtungen gefördert und die beteiligten Industriepartner (VW AG, Siemens AG und Trithor GmbH) begrüßen die Untersuchung der Grundlagen im Rahmen dieses SPP und werden dem SPP beratend zur Seite stehen.

Auch bestehen Verbindungen zum SFB 459 „Formgedächtnistechnik“ (Bochum), zum SFB 516 „Konstruktion und Fertigung aktiver Mikrosysteme“ (Braunschweig-Hannover), zum SPP 1156 „Adaptronik für Werkzeugmaschinen“ und zum BMBF-Leitprojekt „Adaptive Verbundstrukturen für den Leichtbau...“, die jedoch nicht den hier zentralen Aspekt der magnetischen Aktivierung abdecken, und dem (mittlerweile ausgelaufenen) SFB 166 „Strukturelle und magnetische Phasenübergänge in Übergangsmetall-Legierungen und Verbindungen“ (Duisburg-Bochum), in dem der hier zentrale Aspekt der Mikrostrukturänderung aber nicht behandelt wurde.

7 Internationale Vernetzung

Es bestehen vielfältige bilaterale Kooperationen mit den Gruppen, die auf diesem Gebiet arbeiten (enge Zusammenarbeiten sind unterstrichen):

M. Wuttig, R. Tickle, R. C. O'Handley, S. M. Allen, R. D. James, S. M. Shapiro, A. Zeludev, R. F. Hamilton, H. Sehitoğlu, I. Karaman (USA), M. Ohtsuka, T. Takagi, H. Akai (Japan), K. Ullakko, O. Heczko, J. Enkovaara, R. M. Nieminen (Finnland), M. Rabe, A. T. Zayak, K.-U. Neumann, K. R. A. Ziebeck (England), A. Planes, L. Mañosa, T. Castan, E. Vives (Spanien), V. V. Kokorin, N. Glavatska, V. Gavriljuk, Y. Chumlyakov, A. N. Bogdanov (Ukraine), A. DeSimone (Italien), J. Hafner (Österreich), P. Müllner, G. Kosteroz (Schweiz), G. H. Wu, F. X. Hu, B. G. Shen, J. R. Sun (China)

Zur Vertiefung der Zusammenarbeiten ist der Austausch von jeweils 2 Doktoranden pro Jahr mit internationalen Partnern geplant.

Zu der in den USA 2002 angelaufenen Forschungsinitiative über multiferroische Werkstoffe (MURI) besteht über den Sprecher, Herrn Prof. Wuttig, der Gastwissenschaftler bei caesar war, sowie durch die Beteiligung von caesar als europäischer Partner bei MURI, intensiver Kontakt und Austausch. Darüber hinaus gibt es von DFG und NSF gemeinsam geförderte, bzw. beantragte Projekte.

Um eine sehr gute internationale Sichtbarkeit des SPP zu erreichen, wird zusätzlich zu den bisherigen Symposien im Rahmen der DPG Frühjahrstagung ein Symposium innerhalb der internationalen, zweijährig in Bremen stattfindenden anwendungsorientierten „Actor“ Konferenz eingerichtet.

8 Voraussichtliche Teilnehmer

Nachwuchswissenschaftler sind mit einem * gekennzeichnet.

A. Demonstratoren und Konzepte

- I. **Dr. E. Quandt, Dr. H. Rumpf*** (Stiftung caesar, Abt. Smart materials, Bonn)
Dünnschichten für mikrotechnische Anwendungen
- II. **Prof. H. Hesselbach, Dr. A. Raatz*** (TU Braunschweig)
Entwicklung eines prototypischen kraftgeregelten Greifmechanismus
- III. **Dr. M. Kohl** (FZ Karlsruhe, Inst. f. Mikrostrukturtechnik)
Umsetzung von Dünnschichten aus magnetischen Formgedächtnislegierungen in neuartige Mikrosystemanwendungen
- IV. **Prof. H. H. Gatzen, Dr. Munter*** (Inst. f. Mikrotechnologie, U Hannover)
Komponenten zur Erzeugung hoher Magnetfelder für Mikrosysteme basierend auf magnetischen Formgedächtnisschichten
- V. **Prof. R. Neugebauer** (TU Chemnitz), **Dr. W.-G. Drossel***, **Dr. A. Böhm*** (Fraunhofer IWU, Abt. Adaptronische Anwendungen, Dresden),
Magnetisch optimierte Aktuatorprinzipien: Konzepte zur Vermeidung von Wirbelstromverlusten
- VI. **Prof. S. Büttgenbach, Dr. M. Leester-Schädel*** (TU Braunschweig, Inst. f. Mikrotechnik)
Entwicklung von Batch-fertigungsgerechten Mikroaktorkonzepten auf der Basis von magnetischen Formgedächtnislegierungen
- VII. **Prof. H. Janocha** (U Saarland)
Untersuchung neuartiger Dämpferkonzepte auf der Basis magnetischer Formgedächtnislegierungen

B. Herstellung und Charakterisierung

- VIII. **Dr. S. Fähler***, **Prof. L. Schultz** (IFW Dresden)
Wachstum – Mikrostruktur – Magnetismus – Funktion von magnetischen Formgedächtnisschichten
- IX. **Prof. S. G. Mayr***, **Prof. K. Samwer** (U Göttingen)
Morphologie und mechanische Spannungen in Schichten aus magnetischen Formgedächtnislegierungen: Experimente und Modellierung

- X. **Dr. R. Schneider***, **Dr. S. Fiechter*** (HMI Berlin)
Ein- und Bi-kristallzucht, neutronendiffraktometrische Untersuchung der Kristallstruktur sowie der Fehlordnung, Mikroeigenstressanalyse mit Synchrotron und Neutronen
- XI. **Dr. A. Böhm*** (Fraunhofer IWU, Abt. Adaptronische Anwendungen, Dresden), **Dr. S. Roth** (IFW Dresden)
Erzeugung und Wirkung von Texturen in magnetischen Formgedächtnislegierungen
- XII. **Prof. A. Lendlein**, **Dr. S. Kelch*** (GKSS Geesthacht, Teltow)
Magnetfeld-sensitive Polymer-Formgedächtnislegierungskomposite
- XIII. **Prof. F. Haider** (U Augsburg)
Thermodynamische und thermomechanische Untersuchung von nichtstöchiometrischen magnetischen Formgedächtnismaterialien
- XIV. **Dr. M. Moske**, **Dr. R. Haßdorf*** (Stiftung caesar, Bonn)
Legierungsentwicklung hochorientierter magnetischer Formgedächtnisschichten mittels MBE-Deposition
- XV. **Dr. G. Jakob***, **Prof. H. Adrian**, **Dr. M. Jourdan*** (U Mainz)
Epitaktische Ni₂MnGa Schichten
- XVI. **Dr. R. Schäfer**, **Dr. J. McCord*** (IFW Dresden)
Dynamische Kerr-Mikroskopie der Zwillingsbewegung in magnetischen Formgedächtnislegierungen
- XVII. **Prof. W. Skrotzki** (TU Dresden)
Struktur und Eigenschaften der Zwillingsgrenze in Ni₂MnGa-Legierungen
- XVIII. **Prof. H. J. Maier** (U Paderborn)
Mikrostrukturoptimierung und -stabilität in zweiphasigen magnetischen Formgedächtnislegierungen
- XIX. **Dr. O. Gutfleisch*** (IFW Dresden)
Magnetische Eigenschaften, thermodynamisch-kinetische Eigenschaften und Texturierung ausgewählter magnetischer Formgedächtnislegierungen
- XX. **Prof. H. Lichte** (TU Dresden, Triebenberg-Labor)
Kristallographische und magnetische Struktur von Ni₂MnGa-Legierungen mittels Elektronenmikroskopie und -holographie
- XXI. **Prof. Dr.-Ing. Alfred Ludwig*** (Ruhr-Universität Bochum)
Kombinatorische Identifikation neuer ferromagnetischer Formgedächtnislegierungen

C. Materialwissenschaftliche Grundlagen

- XXII. **Prof. W. Petry**, **Dr. J. Neuhaus*** (TU München)
Untersuchung der Gitterdynamik als Funktion von Temperatur und Magnetfeld in Formgedächtnislegierungen
- XXIII. **Prof. M. Acet**, **Prof. E. F. Wassermann** (U Duisburg-Essen)
Magnetische und magnetoelastische Eigenschaften martensitischer Heusler-Legierungen
- XXIV. **Prof. P. Entel** (U Duisburg-Essen)
Ab initio und semi-empirische Simulationen struktureller Änderungen magnetischer Formgedächtnissysteme durch äußere Magnetfelder
- XXV. **Prof. S. Müller** (MPI f. Mathematik Leipzig), **Prof. F. Otto** (U Bonn), **Dr. U. Rößler*** (IFW Dresden)
Kontinuumsmodelle für magnetische Formgedächtnis-Materialien
- XXVI. **Prof. J. Neugebauer** (MPI f. Eisenforschung, Düsseldorf), **Dr. T. Hickel*** (HU Berlin)
Temperaturabhängige ab-initio-Untersuchungen des martensitischen Phasenübergangs bei magnetischen Formgedächtnislegierungen
- XXVII. **Prof. S. Conti**, **Prof. M. Rumpf** (U Duisburg-Essen, FB Mathematik)
Modellierung kompositer magnetischer Formgedächtnis-Materialien

Zuordnung der Projekte nach Fachbereichen:

Ingenieurwissenschaften (7):	I, II, III, IV, V, VI, VII
Werkstoffwissenschaften (8):	VIII, X, XI, XIV, XVI, XVIII, XIX, XXI
Mathematik (2):	XXV, XXVII
Physik (9):	IX, XIII, XV, XVII, XX, XXII, XXIII, XXIV, XXVI
Chemie (1):	XII

9 Nachwuchsförderung

Die Einrichtung dieses Schwerpunktes fördert erheblich den wissenschaftlichen Nachwuchs, sowohl durch die Ausbildung an modernstem Forschungsgerät, durch den Kontakt mit hochaktuellen wissenschaftlichen Fragestellungen, als auch durch die verstärkte Zusammenarbeit mit kooperierenden Gruppen. Durch die Anwendungsrelevanz erhalten Hochschulabsolventen sehr gute Chancen für eine Industrie-Karriere. Durch die jährlich stattfindende Sommerschule und einen 2 bis 4 wöchigen Austausch von Doktoranden soll vor allem ein interdisziplinärer Austausch zwischen den Themenbereichen (A, B, C) erreicht werden. Der hohe Anteil an Nachwuchswissenschaftlern unter den voraussichtlichen Projektleitern reflektiert auch das aktuelle Forschungsinteresse an diesem Gebiet. Sein Querschnittscharakter bietet qualifizierte Themen für Habilitationsvorhaben mit potentiell guten Chancen für eine anschließende Hochschullehrerlaufbahn.

10 Schätzung des Mittelbedarf

Das Schwerpunktprogramm ist auf 6 Jahre angelegt, wobei erwartet wird, dass sich mit der Evaluation nach 3 Jahren eine deutliche Verschiebung von den Grundlagen zu Anwendungskonzepten ergeben wird. Nach der großen Zahl positiver Rückmeldungen und den sehr konkreten Projektvorschlägen ist davon auszugehen, dass ca. 27 Projekte beantragt werden. Bei den meisten Teilprojekten beträgt der Personalbedarf einen wissenschaftlichen Mitarbeiter nach BAT IIa. Mit Verbrauchsmaterial, Kleingeräten und Konferenzreisen beträgt der mittlere Finanzbedarf pro Mitarbeiter ca. 50.000,- Euro pro Jahr. Weitere Mittel werden für die halbjährlichen Koordinationstreffen (2*50 000,-€), jährlichen Sommerschulen (80 000,-€), den schwerpunktinternen Doktorandenaustausch (30 000,-€) und internationalen Austausch (100 000,-€) benötigt. Die Gesamtkosten ergeben sich somit zu ca. 1 660 000,-€ pro Jahr.

11 Zusammenfassung der Gründe für die Förderung dieses Programms

Magnetische Formgedächtnislegierungen sind neue, adaptive Werkstoffe, die das Potential haben, den Bau von intelligenten Aktuatoren und Sensoren zu revolutionieren. Da diese Materialklasse erst 1996 entdeckt wurde, beschäftigen sich bisher relativ wenige Gruppen weltweit mit diesem Gebiet, auch ist die Patentsituation noch recht offen. Ihr Entwicklungspotential ist in diesem frühen Stadium an der noch exponentiell ansteigenden Anzahl von Publikationen ablesbar. Neben Schwerpunkten in Finnland, den USA und vor allen Dingen in Japan sind viele der Forschergruppen, die bisher an verschiedenen Aspekten von den Grundlagen bis zur Anwendung arbeiten, in Deutschland angesiedelt. Durch eine gemeinsame Vernetzung und Förderung am Standort Deutschland kann dieses zukunftssträchtige Material von dem jetzigen, recht frühen Erkenntnisstand bis zu innovativen Anwendungskonzepten überführt werden. Diese faszinierende Materialklasse erfordert arbeitsteilige Strukturen und Kommunikation zwischen den Disziplinen.

Das Thema wird voraussichtlich in den kommenden Jahren eine wichtige Position in der Forschung zu funktionalisierbaren Spezialwerkstoffen und ihrer Anwendung einnehmen und gehört damit zu einer zentralen Richtung in den Werkstoffwissenschaften. Eine Förderung als vernetzter Schwerpunkt wird über die Projektgrenzen hinaus zur Entwicklung einer entsprechenden multidisziplinären Kultur der wissenschaftlichen Einrichtungen in Deutschland beitragen.

12 Literatur (Die Namen der interessierten Wissenschaftler sind fett gedruckt.)

- Acet, M.**, Duman, E., **Wassermann, E. F.**, Manosa, L., Planes, A., *Coexisting ferro- and antiferromagnetism in Ni_2MnAl Heusler alloys*, J. Appl. Phys. **92**, 3867 (2002)
- Alteheld, A., Feng, Y., **Kelch, S.**, **Lendlein, A.**, *Biodegradable Amorphous Copolyester-Urethane Networks Having Shape-Memory Properties*, Angew. Chem., im Druck (2004)
- Bethuel, F., Huisken, G., **Müller, S.**, Steffen, K., *Calculus of variations and geometric evolution problems*, Edited by Hildebrandt, S., Struwe, M., Lecture Notes in Mathematics, 1713, Springer (1999)
- Bhattacharya, K., DeSimone, A., Hane, K. F., James, R. D., Palmstrøm, C. J., *Tents and Tunnels on Martensitic Films*, Mat. Sci. Eng. **A273-275**, 685 (1999)
- Bhattacharya, K., **Conti, S.**, Zanzotto, G., Zimmer, J., *Crystal symmetry and the reversibility of martensitic transformations*, Nature **428**, 55 (2004)
- Bogdanov, A. N., DeSimone, A., **Müller, S.**, **Rößler, U. K.**, *Phenomenological theory of magnetic-field-induced strains in ferromagnetic shape-memory materials*, J. Mag. Mag. Mat. **261**, 204 (2003)
- Böhm, A.**, Wielens B., *Studie zur neuen magnetischen Formgedächtnislegierung mit Demonstratorbeispiel*, Volkswagen Konzernforschung (intern), (2002)
- Büsgen, T., Feydt, J., **Hassdorf, R.**, Thienhaus, S., **Moske, M.**, Boese, M., Zayak, A., **Entel, P.**, *Ab initio calculations of structure and lattice dynamics in NiMnAl shape memory alloys*, Phys. Rev. B **70**, 014111 (2004)
- Bungaro, B., Rabe, K. M., Corso, A. D., *First-principles study of lattice instabilities in ferromagnetic Ni_2MnGa* , Phys. Rev. B **68**, 134104 (2003)
- Chatterji, T., **Schneider, R.**, Hoffmann, J.-U., Hohlwein, D., Suryanarayanan, R., Dhalenne, G., Revcolevschi, A., *Diffuse magnetic scattering above T_C in quasi-two-dimensional $La_{1.2}Sr_{1.8}Mn_2O_7$* , Phys. Rev. B **65**(13), 134440 (2002)
- Conti S.**, *Branched microstructures: scaling and asymptotic self-similarity*, Comm. Pure Appl. Math. **53**, 1448 (2000)
- DeSimone, A., James, R. D., *A constrained theory of magnetoelasticity*, J. Mech. Phys. Solids **50**, 283 (2002)
- DeSimone, A.; Kohn, R. V., **Müller, S.**, **Otto, F.**, *A reduced theory for thin-film micromagnetics*, Comm. Pure Appl. Math. **55**, 1408 (2002)
- Dong, J. W., Chen, L. C., Palmstrøm, C. J., James, R. D., McKernan, S., *Molecular beam epitaxy growth of ferromagnetic single crystal (001) Ni_2MnGa on (001) GaAs*, Appl. Phys. Lett. **75**(10), 1443 (1999)
- Dong, J. W., Chen, L. C., Xie, J. Q., Müller, T. A. R., Carr, D. M., Palmstrøm, C. J., McKernan, S., Pan, Q., James, R. D., *Epitaxial growth of ferromagnetic Ni_2MnGa on GaAs(001) using NiGa interlayers*, J. Appl. Phys. **88**, 7357 (2000)
- Dong, J. W., Xie, J. Q., Lu, J., Adelman, C., Palmstrøm, C. J., Cui, J., Pan, Q., Shield, T. W., James, R. D., McKernan, S., *Shape memory and ferromagnetic shape memory effects in single-crystal Ni_2MnGa thin films*, J. Appl. Phys. **95**(5), 2593 (2004)
- du Plessis, A. J., Jessiman, A. W., Muller, G. J., van Schoor, M. C., *Latching valve control using ferromagnetic shape memory alloy*, Smart Structures and Materials, Proc. of SPIE **5054**, 320 (2003)
- Efstathiou, C., Sehitoğlu, H., Wagoner Johnson A. J., Hamilton, R. F., **Maier, H. J.**, Chumlykov, Y., *Large Reduction in Critical Stress in Co-Ni-Al Upon Repeated Transformation*, Scripta Mater. **51**, 979 (2004)
- Enokizono, M., Todaka, T., Szpryngacz, M., Kanada, T., Watanabe, Y., *Magnetic and Thermal-Characteristics of a Magnetic Shape-Memory Alloy (Fe-Cr-Ni-Mn-Si-Co)*, J. Appl. Phys. **91**(10), 7448 (2002)
- Feuchtwanger, J., Michael, S., Juang, J., Bono, D., O'Handley, R. C., Allen, S. M., Jenkins, C., Goldie, J., Berkowitz, A., *Energy absorption in Ni-Mn-Ga-polymer composites*, J. Appl. Phys. **93**(10), 8528 (2003)
- Föhse, M., **Gatzen, H. H.**, *Optimizing the Magnetic Properties of Electroplated Permalloy for Flux Guides in Micromotors*, Proc. 7th Int. Sym. Mag. Mat., Proc. Dev., 202nd Meeting of The Electroch. Soc., Salt Lake City, USA, 125 (2002)
- Friesecke, G., James, R. D., **Müller, S.**, *A theorem on geometric rigidity and the derivation of nonlinear plate theory from three-dimensional elasticity*, Comm. Pure Appl. Math. **55**, 1461 (2002)
- Frommberger, M., Zanke, Ch., **Ludwig, A.**, Tewes, M., **Quandt, E.**, *Processing and Application of Magnetoelastic Thin Films in High Frequency Devices*, In: Microelectronic Engineering, **67 – 68**, 588 (2003)
- Godlevsky, V. V., Rabe, K. M., *Soft tetragonal distortions in ferromagnetic Ni_2MnGa and related materials from first principles*, Phys. Rev. B **63**, 134407 (2001)
- Golub, V. O., Vovk, A. Y., Malkinski, L., O'Connor, C. J., Wang, Z., Tang, J., *Anomalous magnetoresistance in $NiMnGa$ thin films*, J. Appl. Phys. **96**(7), 3865 (2004)
- Heczko, O., Straka, L., Lanska, N., Ullakko, K., Enkovaara, J., *Temperature-Dependence of Magnetic-Anisotropy in Ni-Mn-Ga Alloys Exhibiting Giant Field-Induced Strain*, J. Appl. Phys. **91**(10), 8228 (2002)
- Heczko, O., Straka, L., *Temperature-Dependence and Temperature Limits of Magnetic Shape-Memory Effect*, J. Appl. Phys. **94**(11), 7139 (2003)
- Hesselbach, J.**, Pittschellis, R., *Miniaturgreifer mit Greifkraftregelung für die Mikromontage*, VDI-Berichte Nr. 1315, VDI-Verlag Düsseldorf, 335 (1997)
- Hickel, T.**, Nolting, W., *Proper weak-coupling approach to the periodic s-d(f) exchange model*, Phys. Rev. B **69**, 085110 (2004)

- Hoffmeister, H.-W.**, Westkämper, E., Michel, S., *Formgesteuerte Kraftregelung für Feinstbearbeitungsprozesse*, Proc. of the 8th Int. DAAAM, Dubrovnik, Kroatien, (1997)
- Hohlwein, D., Hoffmann, J.-U., **Schneider, R.**, *Magnetic interaction parameters from paramagnetic diffuse neutron scattering in MnO* Phys. Rev. B **68**(14), 140408 (2003)
- Hubert, A., **Schäfer, R.**, *Magnetic Domains. The Analysis of Magnetic Microstructures*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, (1998)
- Jakob, G.**, Casper, F., Beaumont, V., Falk, S., Elmers, H.J., Felser, C., **Adrian, H.**, *Thin epitaxial films of the Heusler compound $Co_2Cr_{0.6}Fe_{0.4}Al$* , J. Mag. Mag. Mat., im Druck (2004)
- James, R. D., Hane, K. F., *Martensitic transformations and shape-memory materials*, Acta Mater. **48**, 197 (2000)
- James, R. D., Wuttig, M., *Magnetostriction of martensite*, Phil. Mag. A **77**(5), 1273 (1998)
- Kakeshita, T., Takeuchi, T., Fukuda, T., Tsujiguchi, M., Saburi, T., Oshima, R., Muto, S., *Giant Magnetostriction in an Ordered Fe_3Pt Single-Crystal Exhibiting a Martensitic-Transformation*, Appl. Phys. Lett. **77**(10), 1502 (2000)
- Karaca, H. E., Karaman, I., Lagoudas, D. C., **Maier, H. J.**, Chumlyakov, Y. I., *Recoverable stress-induced martensitic transformation in a ferromagnetic CoNiAl alloy*, Scr. Mat. **49**, 831 (2003)
- Kästner, J., **Neuhaus, J.**, **Wassermann, E. F.**, **Petry, W.**, Hennion, B., Bach, H., *$TA_1[110]$ phonon dispersion and martensitic phase transition in ordered alloys Fe_3Pt* , Eur. Phys. J. B **11**, 75 (1999)
- Kästner, J., **Petry, W.**, Shapiro, S. M., Zheludev, A., **Neuhaus, J.**, Roessel, Th., **Wassermann, E. F.**, Bach, H., *Influence of atomic order on $TA_1[110]$ phonon softening and displacive phase transition in $Fe_{72}Pt_{28}$ Invar alloys*, Eur. Phys. J. B **10**, 641 (1999)
- Kohl, M.**, Brugger, D., Ohtsuka, M., Takagi, T., *A novel actuation mechanism based on ferromagnetic SMA thin films*, Sensors and Actuators **114**(2-3), 445 (2004a)
und Deutsche Patentanmeldung Nr. 10213671, PCT-Anmeldung WO 03/081039
- Kohl, M.**, Liu, Y., Krevet, B., Dürr, S., Ohtsuka, M., *SMA microactuators for microvalve applications*, J. Phys. IV France **115**, 333 (2004b)
- Kohl, M.**, Brugger, D., Krevet, B., *Ferromagnetic shape memory microscanner*, "Best Overall Photonics Project - Award", Photonics, Europe Strasbourg, France (2004c)
- Kohlmeier, T., Seidemann, V., Büttgenbach, S., **Gatzen, H. H.**, *Application of UV Depth Lithography and 3D-Microforming for High Aspect Ratio Electromagnetic Microactuator Components*, Microsystem Tech. **8**, 304 (2002)
- Kokorin, V. V., Wuttig, M., *Magnetostriction in Ferromagnetic Shape-Memory Alloys*, J. Mag. Mag. Mat. **234**(1), 25 (2001)
- Lavrov, A. N., Komiya, S., Ando, Y., *Magnetic shape-memory effects in a crystal*, Nature **418**, 385 (2002)
- Lendlein, A.**, Langer, R., *Biodegradable, Elastic Shape-Memory Polymers for Potential Biomedical Applications*, Science **296**, 1673 (2002)
- Leester-Schädel, M.**, Hoxhold, B., **Büttgenbach, S.**, *Differential SMA Micro Actuators*, XVIII Eurosensors, Rome, 490 (2004)
- Lichte, H.**, Lehmann, M.: *Electron holography - a powerful tool for the analysis of nanostructures*, Advances in Imaging and Electron Physics **123**, 225 (2002)
- Löhndorf, M., Duenas-Lockwood, T., Tewes, M., **Quandt, E.**, Rührig, R., Wecker, J., *Highly sensitive strain sensors based on magnetic tunneling junctions (MTJs)* Appl. Phys. Lett. **81**, 313 (2002)
- Mañosa, L., Gonzalez-Comas, A., Obradó, E., Planes, A., Chernenko, V. A., Kokorin, V. V., Cesari, E., *Anomalies related to the TA_2 -phonon-mode condensation in the Heusler Ni_2MnGa alloy*, Phys. Rev. B **55**, 11068 (1997)
- Manosa, L., Planes, A., **Acet, M.**, Duman, E. **Wassermann, E. F.**, *Magnetic properties and martensitic transitions in annealed off-stoichiometric $Ni_{50}Mn_{30}Al_{20}$* , J. Appl. Phys. **93**, 8498 (2003)
- Marioni, M. A., O'Handley, R. C., Allen, S. M., *Analytical model for field-induced strain in ferromagnetic shape-memory alloy polycrystals*, J. Appl. Phys. **91**(10), 7807 (2002)
- Marioni, M. A., Allen, S. M., O'Handley, R. C., *Nonuniform twin-boundary motion in Ni-Mn-Ga single crystals*, Appl. Phys. Lett. **84**(20), 4071 (2004)
- Müllner, P., Chernenko, V., Kostorz, G., *Large Cyclic Magnetic-Field-Induced Deformation in Orthorhombic ($14m$) Ni-Mn-Ga Martensite*, J. Appl. Phys. **95**(3), 1531 (2004)
- Murray, S. J., Marioni, M., Allen, S. M., O'Handley, R. C., Lograsso, T. A., *6% magnetic-field-induced strain by twin-boundary motion in ferromagnetic Ni-Mn-Ga*, Appl. Phys. Lett. **77**(6), 886 (2000)
- Murray, S. J., O'Handley, R. C., Allen, S. M., *Model for discontinuous actuation of ferromagnetic shape memory alloy under stress*, J. Appl. Phys. **89**(2), 1295 (2001)
- Neu, V., Melcher, S., Hannemann, U., **Fähler, S.**, **Schultz, L.**, *Growth, microstructure and magnetic properties of highly textured and highly coercive Nd-Fe-B films*, Phys. Rev. B, **70**, 144418 (2004)
- Neugebauer, R.**, **Drossel, W.-G.**, Roscher, H.-J., Ihlenfeldt, St., *Hybrid struts with Smart Piezoactuators for High Dynamic parallelkinematics*, 1st Int. Coll. of the Collaborative Res. Centre 562 – Robotic Systems for Handling and Assembly. Braunschweig, 29-20. May 2002. Fortschritte in der Robotik Band **7**, Shaker Verlag (2002)
- O'Handley, R. C., Allen, S. M., *Shape-memory alloys, magnetically activated ferromagnetic shape-memory materials*, in Encyclopedia of Smart Materials (2000)
- O'Handley, R. C., Marioni, M. A., Allen, S. M.: MIT Magnetic Materials, www.IntelliMat.com

- Oikawa, K., T. Ota, F. Gejima, T. Ohimori, R. Kainuma, K. Ishida, *Phase equilibria and phase transformations in new ferromagnetic shape memory alloys Co-Ni-Ga, and Co-Ni-Al*, Mater. Trans. **42**, 2472 (2001)
- Oikawa, K., T. Ota, Y. Ohimori, Y. Tanaka, H. Morito, A. Fujita, R. Kainuma, K. Fukamichi, K. Ishida, *Magnetic and martensitic phase transitions in ferromagnetic Ni-Ga-Fe shape memory alloys*, Appl. Phys. Lett. **81**, 5201 (2002)
- Pagliarulo, P.; Kuhnen, K.; May, C.; **Janocha, H.**, *Tunable Magnetostrictive Dynamic Vibration Absorber*, Proc. 9th Int. Conf. on New Actuators, Bremen, P86, 698 (2004)
- Planes, A., Obrado, E., Gonzales-Comas, A., Manosa, L., *Premartensitic transition driven by magnetoelastic interaction in bcc ferromagnetic Ni₂MnGa*. Phys. Rev. Lett. **79**, 3926 (1997)
- Rössler S., **Rössler, U. K.**, Nenkov, K., Eckert, D., Yusuf, S. M., Dörr, K., K.-H. Müller, *Rounding of a first-order magnetic phase transition in Ga-doped La_{0.67}Ca_{0.33}MnO₃*, Phys. Rev. B **70**, 104417 (2004)
- Rumpf, H., Feydt, J., Lewandowski, D., Ludwig, A., Winzek, B., **Quandt, E.**, Zhao, P., Wuttig, M., *Shape memory effect and magnetostriction of sputtered NiMnGa thin films*, SPIE **5053**, 191 (2003)
- Sehitoglu, H., Karaman, I., Zhang, X. Y., Chumlyakov, Y., **Maier, H. J.**, *Deformation of FeNiCoTi Shape Memory Single Crystals*, Scr. Mat. **44**, 779 (2001)
- Sozinov, A., Likhachev, A. A., Lanska, N., Ullakko, K., *Giant Magnetic-Field-Induced Strain in NiMnGa 7-Layered Martensitic Phase*, Appl. Phys. Lett. **80**(10), 1746 (2002)
- Suorsa, I., Tellinen, J., Ullakko, K., Pagounis, E., *Voltage generation induced by mechanical straining in magnetic shape memory materials*, J. Appl. Phys. **95**(12), 8054 (2004)
- Takeuchi, I., Famodu, O. O., Read, J. C., Aronova, M. A., Chang, K. S., Craciunescu, C., Lofland, S. E., Wuttig, M., Wellstood, F. C., Knauss, L., Orozco, A., *Identification of Novel Compositions of Ferromagnetic Shape-Memory Alloys Using Composition Spreads*, Nature Mat. **2**(3), 180 (2003)
- Tellinen, J., Suorsa, I., Jääskeläinen, A., Aaltio, I. Ullakko, K., *Basic properties of magnetic shape memory actuators*, Proc. Actuator'02, Bremen, Germany, 566 (2002)
- Ullakko, K., Huang, J. K., Kantner, C., O'Handley, R. C., Kokorin, V. V., *Large magnetic-field-induced strains in Ni₂MnGa single crystals*, Appl. Phys. Lett. **69**, 1966 (1996)
- Ullakko, K., Ezer, Y., Sozinov, A., Kimmel, G., Yakovenko, P., Lindroos, V. K., *Magnetic-Field-Induced Strains in Polycrystalline Ni-Mn-Ga at Room-Temperature*, Scr. Mat. **44**(3), 475 (2001)
- Vasil'ev, A.N., Buchel'nikov, V.D., Takagi, T., Khovailo, V.V., Estrin, E.I., *Shape memory ferromagnets*, Phys. Usp. **46**, 559 (2003)
- von Helmolt R., Wecker, J., Holzapfel, B., **Schultz, L.**, **Samwer, K.**, *Giant negative magnetoresistance in perovskitelike La_{2/3}Ba_{1/3}MnO_x ferromagnetic films*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2331 (1993)
- Walle, C.G. van de, **Neugebauer, J.** *First-Principle Phase Diagram for Hydrogen on GaN Surfaces*, Phys. Rev. Lett. **88**, 066103 (2002)
- Wassermann, E. F.**, **Kästner, J.**, **Acet, M.**, **Entel, P.**, *Electronic origin of the martensitic Transitions in Fe-based systems and Hume-Rothery systems: a comparison*, Proc. Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transf., (JIMIC-3) (Koiwa, M., Ohtsuka, K. and Miyazaki, T., eds.) (The Japan Inst. of Metals, 807 (1999)
- Webster, P. J., Ziebeck, K. R. A., Town, S. L., Peak, M. S., *Magnetic order and phase transformation in Ni₂MnGa*, Phil. Mag. B **49**(3), 295 (1984)
- Wiele, N., Franz, H., **Petry, W.**, *Temperature dependent phonon density of states of the invar alloy Fe₇₂Pt₂₈*, Physica B **263-264**, 716 (1999)
- Winzek, B., Schmitz, S., **Rumpf, H.**, Sterzl, T., **Hassdorf, R.**, Thienhaus, S., Feydt, J., **Moske, M.**, **Quandt, E.**, *Recent developments in shape memory thin film technology*, Mat. Sci. Eng. A **378**, 40 (2004)
- Wuttig, M., L. Liu, K. Tsuchiya, R.D. James, *Occurrence of ferromagnetic shape memory alloys*, J. Appl. Phys. **87**, 4707 (2000)
- Wuttig, M., Li, J., Craciunescu, C., *A New Ferromagnetic Shape Memory Alloy System*, Scr. Mat. **44**, 2393 (2001)
- Yan, A., Handstein, A., Kersch, P., Nenkov, K., Müller, K.-H., **Gutfleisch, O.**, *Effect of composition and cooling rate on the structure and magnetic entropy change in Gd₅Si_xGe_{4-x}*, J. Appl. Phys. **95**, 7064 (2004)
- Zayak, A. T., **Entel, P.**, Enkovaara, J., Ayuela, A., Nieminen, R. M., *A first-principles investigation of phonon softening and lattice instabilities in the shape-memory system Ni₂MnGa*, Phys. Rev. B **68**, 132402 (2003)
- Zayak, A. T., **Entel, P.**, *A critical discussion of calculated modulated structures, Fermi surface, nesting and phonon softening in magnetic shape memory alloys Ni₂Mn(Ga, Ge, Al) and Co₂Mn(Ga, Ge)*, J. Mag. Mag. Mat., im Druck (2004)
- Zeludev, A., Shaprio, S. M., Wochner, P., *Precursor effects and premartensitic transformation in Ni₂MnGa*, Phys. Rev. B **54**, 15045 (1996)
- Zhou, W. M., Liu, Y., Jiang B. H., Qi, X., Liu, Y. N., *Magnetoelastic and Thermoelastic Shape-Memory Effect in a Co-Ni Single-Crystal*, Appl. Phys. Lett. **82**(5), 760 (2003)