



Stahl nach Wahl: Heute wird ein Material für jede Anwendung optimiert. Die Lebensdauer von Flugzeugturbinen zu verlängern stellt dabei eine besondere Herausforderung dar.



# Stahl aus der Quantenschmiede

Autoblech, Tragfläche oder Turbinenschaufel – Legierungen werden heute für jeden Zweck maßgeschneidert. Rund 2500 Stähle gibt es bereits, und es werden ständig mehr. Auch **Jörg Neugebauer** und **Dierk Raabe**, Direktoren am **Max-Planck-Institut für Eisenforschung** in Düsseldorf, entwickeln neue Sorten und nutzen dabei nicht zuletzt die Gesetze der Quantenwelt.

TEXT **KARL HÜBNER**

Ihr könntet das Titan mit 30 Prozent Niob oder Molybdän mischen.“ Es ist schon einige Jahre her, dass Jörg Neugebauer diesen Tipp für Dierk Raabe hatte. Raabe war zu dieser Zeit auf der Suche nach einer neuen Titanlegierung für Hüftgelenksimplantate. Das Material sollte sich unter Belastung stärker elastisch verformen als reines Titan, also etwa so weich sein wie der menschliche Knochen. Bis dato lockerten sich Titanprothesen mit der Zeit, weil sie sehr steif sind und daher viel mehr Kräfte aufnehmen als der Knochen. Da dieser dann nicht mehr gefordert ist, bildet er sich zurück. Jörg Neugebauer und Dierk Raabe haben ein geeigneteres Material als Titan entwickelt, und einige Hersteller nutzen die Legierung auch bereits.

Raabe leitet am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf die Abteilung „Mikrostrukturphysik und Legierungsentwicklung“. Trotz des Eisens im Namen wird dort auch an anderen Metallen geforscht und sogar an Biomaterialien.

Ehe Raabe konkrete Rezepturen in seinen Labors untersucht, kontaktiert er aber wie im Fall der neuen Titanle-

gierung seinen Kollegen Neugebauer, der die Abteilung „Computergestütztes Materialdesign“ leitet. Im Institut können sie sich fast zuwinken, wenn sie in ihren Gebäuden an die richtigen Fenster gehen. Doch in ihrer Arbeit liegen sie Zehnerpotenzen oder, wie Raabe es nennt, viele Skalen auseinander. Neugebauer genügen Materialausschnitte im Bereich von Nanometern, also millionstel Millimetern. Solche Ausschnitte simuliert er auf dem Computer.

## FÜR QUANTENMECHANIK SIND MÄCHTIGE RECHNER NÖTIG

So genügte es Jörg Neugebauer, mit virtuellen Atomen „Quantenmechanik zu betreiben“, wie er es nennt, um später den präzisen 30-Prozent-Tipp zu geben. Als theoretischer Physiker befasst er sich eben rein theoretisch mit Materie, ohne dass er dafür in Laboren experimentieren müsste. Aber er benötigt mächtige Rechner. Nicht von ungefähr unterhält das Institut im Untergeschoss eine Infrastruktur, die es in puncto Rechenleistung in manchen Jahren schon unter die Top 500 der Welt brachte. >





Ein eingespieltes Team: Jörg Neugebauer (rechts) berechnet Eigenschaften eines Materials mithilfe der Quantenmechanik. Darauf aufbauend, untersucht Dierk Raabe, wie die Mikrostruktur einer Legierung das Verhalten eines großen Werkstücks beeinflusst. So entwickeln die beiden Max-Planck-Direktoren und ihre Mitarbeiter gemeinsam Stähle für die Zukunft.

Die Computer von Jörg Neugebauer und seinen Mitarbeitern arbeiten mit einigen fundamentalen physikalischen Größen, aber vor allem mit ausgeklügelten quantenmechanischen Gleichungen.

Quantenmechanik wird relevant, wenn man in den Bereich kleinster Teilchen kommt und die klassische Physik ebenso an Grenzen stößt wie das menschliche Vorstellungsvermögen.

Wem gelingt es schon, sich etwa ein Elektron auch als Welle zu denken? Oder nachzuvollziehen, warum sich dessen Energie nicht kontinuierlich verändert, sondern nur in diskreten, eben gequantelten Portionen?

Für Jörg Neugebauer wird die Quantenmechanik erst richtig knifflig, wenn es darum geht, das quantenmechanische Verhalten von Systemen aus vielen

Atomen zu berechnen. Das Problem sei, dass alle Teilchen – Atomkerne und Elektronen – in Beziehung zueinander stehen, erklärt der Physiker. Für ein Ensemble vieler Atome mit ihren zahlreichen Elektronen seien die Rechnungen daher so ungemein komplex, dass selbst die leistungsstärksten Rechner an ihre Grenzen kommen.

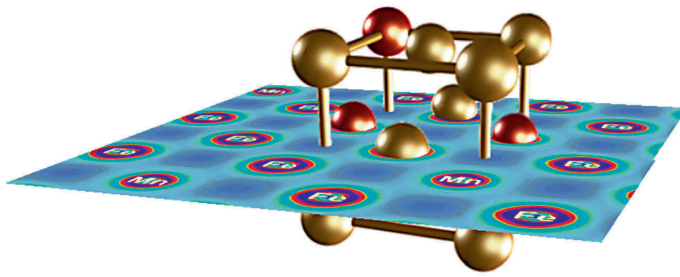
Zum Glück gibt es brauchbare Vereinfachungen. Zum Beispiel die Dichtefunktionaltheorie (DFT). Ein Ansatz aus den 1960er-Jahren, für den es 1998 den Chemie-Nobelpreis gab. Dabei war gezeigt worden, dass man nicht zwingend die genaue Lage jedes einzelnen Elektrons in einem System kennen muss, sondern bloß die Elektronendichte an einem Ort. Im Laufe der vergangenen Jahrzehnte wurde der mathematische Formalismus, mit dem sich die Elektronendichte fassen lässt, sehr verfeinert. Heute liefert er auch für die Praxis hilfreiche Ergebnisse. Und vor allem liefert er den Zusammenhang zwischen dieser Dichte und der Energie eines Systems.

Gerade die Energien sind es, die Neugebauer bei seinen Rechnungen interessieren. Denn sie sagen etwas darüber aus, wie stabil eine bestimmte Anordnung von Atomen im Vergleich zu einer anderen ist. Zu den besonderen

### DIE VIELFALT DER METALLGITTER

In allen Metallen ordnen sich die Atome nach ganz bestimmten Regeln an. Dabei entstehen dreidimensionale Gitter, wobei die Atome in jede Raumrichtung definierte Abstände zueinander haben. Wie der verfügbare Raum möglichst gut ausgenutzt wird, lässt sich an gestapelten Orangen nachvollziehen. Ab der dritten Lage gibt es dafür zwei Möglichkeiten. Je nachdem, welche Mulden besetzt sind, liegen entweder die Orangen der dritten oder erst der vierten Lage direkt über denen in der ersten Lage. Das ist auch bei Metallatomen so. Die unterschiedlichen Gittertypen heißen hexagonal dicht beziehungsweise kubisch dicht (auch kubisch flächenzentriert). Darüber hinaus gibt es noch eine maßgebliche weitere Gitterstruktur, die in der Fachwelt als kubisch raumzentriert (oder innenzentriert) bekannt ist.

Welche Struktur ein Metall jeweils bildet, das hängt unter anderem von Größe, Kernladung und Elektronenkonfiguration der Atome ab. Und auch Temperatur und äußerer Druck spielen eine Rolle. So gibt es zahlreiche Metalle, die abhängig von diesen Bedingungen ihre bevorzugte Gitterstruktur ändern. Solche Phasenübergänge spielen eine wichtige Rolle beim Verständnis des Verhaltens von Metallen. Und damit auch für Werkstoffentwickler, die Metalle mit bestimmten Eigenschaften schaffen wollen.



Mit einer elektronischen Landkarte zu einem neuen Material: Die Verteilung der Elektronendichte, die durch die verschiedenen Farben der waagerechten Ebene veranschaulicht wird, verrät den Forschern, wie viel Mangan (Mn; rote Kugeln) sie in ein Eisengitter (Fe; goldfarbene Kugeln) einbauen müssen, damit ein Stahl besonders fest wird.

Verdiensten von Neugebauers Abteilung gehört es, die Dichtefunktionaltheorie auch für so komplexe Systeme wie metallische Strukturwerkstoffe anwendbar gemacht zu haben.

### ATOME KLEBEN NICHT STARR AN EINER STELLE

„Wir geben unserem Computerprogramm zum Beispiel vor, wie 100 Titanatome räumlich angeordnet sein sollen“, sagt Neugebauer. Das Programm weiß, dass Titan 22 Elektronen besitzt, darunter vier äußere, die für das Bindungsverhalten mit anderen Atomen eine Rolle spielen. Es kann auch einbeziehen, dass die Atome nicht starr an einer Stelle kleben, sondern gegeneinander schwingen. Selbst die magnetischen Eigenschaften mancher Elemente spiegeln die Rechnungen korrekt wider.

Das Schöne: Neugebauer muss für seine Rechnungen nicht einmal wissen, welche Lage die Titanatome im realen Metallgitter tatsächlich haben. „Ich kann beliebige Positionen vorgeben – und dann die Energie des Systems berechnen. Wenn ich das oft genug mache und dabei komplexe Optimierungsalgorithmen benutze, dann ergibt sich ganz automatisch jene Struktur, die bei einer bestimmten Temperatur die energetisch günstigste ist“, erklärt der Wissenschaftler.

Er kann also auch völlig instabile Anordnungen vorgeben – einfach nur, um zum Beispiel deren mechanische Eigenschaften zu untersuchen. Genau das hat Neugebauer im Fall des Titans getan. „Wir haben da einfach mal ein kubisch raumzentriertes Titangitter gerechnet“, so Neugebauer. Das ist in der Realität zwar erst oberhalb von 882 Grad stabil. Aber das war zunächst egal. Der Physiker wollte einfach wissen, wie ein solches Titan auf äußere Belastung reagieren würde. Auch das ermittelt er

theoretisch. Er berechnet dazu die energetischen Zustände von gestreckten oder gestauchten Atomanordnungen – und kann dann die Kräfte ableiten, die für solche Verformungen wirken müssen. „Damit konnten wir zeigen, dass sich kubisch raumzentriertes Titan in der Tat in bestimmte Raumrichtungen leichter verzerren lässt – und damit auch weniger steif ist“, so Neugebauer. Ein erster Schritt.

Nun galt es, einen Weg zu finden, das kubisch raumzentrierte Titangitter (siehe Kasten S. 50) auch bei Raumtemperatur zu stabilisieren. Andere Metalle bilden von sich aus ein solches Gitter. Molybdän, Vanadium, Tantal, Niob und Wolfram etwa. Es lag also nahe, deren Atome einfach in das Titan hineinzumischen. Auch das untersuchten Neugebauer und sein Team zunächst am Computer. Dabei probierten sie jeweils verschiedene Mischungsverhältnisse aus. „Am Ende zeigte sich, dass oberhalb von 30 Prozent Niob oder Molybdän die kubisch raumzentrierte Anordnung energetisch günstiger sein würde als das hexagonal dichte Gitter des reinen Titans“, so Neugebauer. Seine Arbeit war damit beendet, und der Ball lag bei Raabe.

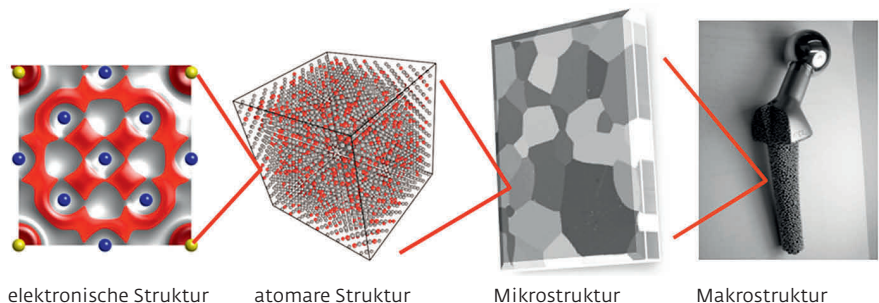
Der konnte die theoretisch vorhergesagte Gitterstruktur bestätigen. „Es ist in der Tat so, dass die kubisch raumzentrierte Struktur durch den Zusatz von Niob oder Molybdän stabilisiert wird“, so Raabe. Doch ehe die endgültige Materialzusammensetzung feststand, liefen auch in Raabes Abteilung die Computer.

„Die Quantenmechanik betrachtet ja lediglich den winzigen Ausschnitt eines Kristalls“, erklärt der Wissenschaftler. Aber: Ein Metall liegt in der Regel nicht als ein einziger Kristall vor, in dem alle Atome regelmäßig angeordnet sind. Vielmehr bilden sich beim Erstarren aus der Schmelze zahllose kleine Einkristalle, sogenannte Körner, die dann jeweils aneinandergrenzen.

### DIE ROLLE VON KORNGRENZEN UND KRISTALLVERTEILUNG

„Mein Team beschäftigt sich damit, wie solche Korngrenzen und die Verteilung der Kristalle die makroskopisch messbaren mechanischen Eigenschaften beeinflussen“, erklärt Raabe. Im Fall der Titanlegierung war das noch relativ einfach. „Da ordnen sich die einzelnen Kristalle praktisch regellos an, das heißt,

Vom Elektron zur künstlichen Hüfte: Von der elektronischen Struktur lässt sich auf die atomare Struktur schließen. Daraus ergibt sich die Mikrostruktur, die wesentlich die Eigenschaften einer Makrostruktur bestimmt. Diesem Weg folgend, entwickelten die Düsseldorfer Forscher eine Titanlegierung für künstliche Hüftgelenke, die dem menschlichen Knochen ähnlicher ist als reines Titan. Der Knochen, der das Implantat umgibt, bildet sich daher nicht zurück.





keine Raumrichtung wird bevorzugt“, so Raabe. Mit einfacher Statistik konnten die von Neugebauer eingespeisten Daten daher auf ein größeres Bauteil wie etwa ein Hüftimplantat hochgerechnet werden.

**PRÄZISE VORHERSAGEN DES GEWÜNSCHTEN VERHALTENS**

Am Ende aller Betrachtungen und Experimente stand schließlich eine definierte Legierung, die außer Titan und Niob noch etwas Zirconium und Tantal enthielt. Experimente zeigten, dass dieses Material nur noch doppelt so steif ist wie der menschliche Knochen. Reines Titan dagegen ist mehr als fünfmal

so steif. Raabe ist bis heute beeindruckt von der Qualität der quantenmechanisch berechneten Vorhersagen.

Seither sind er und Neugebauer ein eingespieltes Team, das regelmäßig zusammenarbeitet. Und es gibt ja auch genügend zu tun. Neue metallische Werkstoffe werden überall gebraucht. Leichtere Stahlarten für den Automobilbau etwa, um Kraftstoff zu sparen. Bei Kraftwerks- und Flugzeugturbinen könnten Verbesserungen die Lebensdauer erhöhen. Und noch fehlt es an optimalen Stählen für langlebige Windradgetriebe.

In der Regel sind die Anforderungen noch sehr viel komplexer als im Fall der Titanlegierung. Denn häufig sollen sich

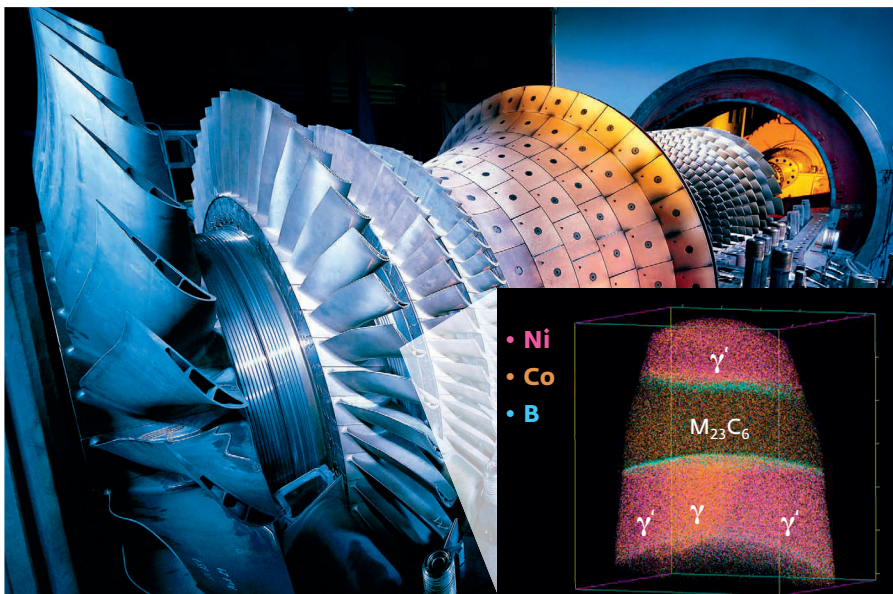
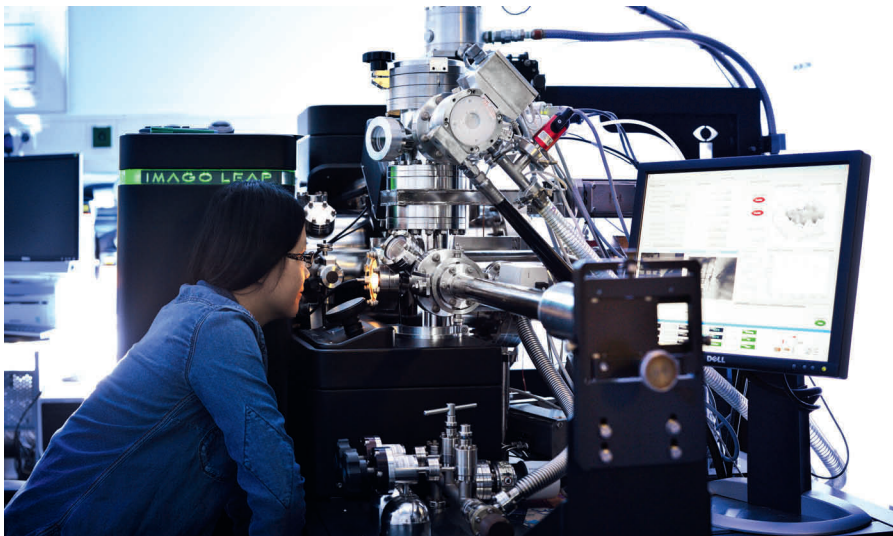
manche Eigenschaften im Laufe eines Werkstofflebens sogar ändern. „Zunächst sollte ein Stahlblech ja leicht verformbar sein, damit man mit möglichst geringem Energieaufwand zum Beispiel eine Kühlerhaube daraus ziehen kann“, sagt Raabe. Im Auto muss diese Kühlerhaube dann aber stabil und robust sein und darf sich bei äußerer Krafteinwirkung nicht sofort verformen. Völlig starr und spröde wiederum soll sie aber auch nicht sein. „Dann würde sie einfach zersplintern, wenn Sie vor den Baum fahren“, so Raabe. „Sie soll sich dann aber verformen und dabei möglichst viel Energie aufnehmen.“

Das gewünschte Verhalten möglichst präzise einzustellen ist ein zentraler Punkt der Düsseldorfer Materialforscher. Und wie beim Implantat beginnt auch das mit dem Betrachten der Lage der Atome im Metallgitter. „Die Verformbarkeit von Metallen basiert zu einem großen Teil auf den im Kristallgitter enthaltenen Gitterfehlern“, erklärt Raabe.

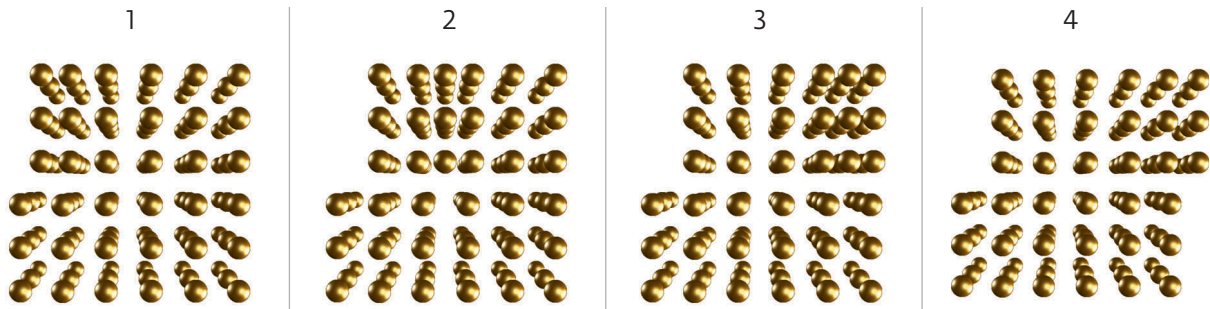
**VERSETZUNGEN BEGÜNSTIGEN DIE VERFORMBARKEIT**

Die Atomanordnung in einem Gitter ist nie ganz ideal. Statistisch verteilt, gibt es immer wieder Stellen, an denen Atome fehlen. Oder ganze Atomreihen. Gerade diese Liniendefekte, auch Stufenversetzungen genannt, sind es, die die Verformbarkeit von Metallen begünstigen. „Wenn man etwa einen Kupferdraht verbiegt, werden solche Liniendefekte jeweils eine Reihe weitergereicht, und das bewirkt einen atomaren Verformungsschritt. Das kann sich durch einen ganzen Kristall fortpflanzen, und am Ende hat sich eine ganze Metallschicht etwas verschoben“, so Raabe. Ganz so wie bei einem Teppich, durch den man eine Falte schiebt. Am Ende hat man den ganzen Teppich etwas ver-

Wo sitzen die Atome? Mengji Yao bedient die Atomsonde (oben), die ein genaues Bild liefert, wie sich die Elemente in einer Probe verteilen. Mit dieser Methode klärten die Düsseldorfer Forscher auf, dass sich das Bor in einer Legierung, die Nickel (Ni), Cobalt (Co) und Bor (B) enthält und für Kraftwerksturbinen eingesetzt wird, an den Grenzen von Kristalliten mit unterschiedlichen Zusammensetzungen und Strukturen ( $\gamma$ ;  $\gamma'$  oder  $M_{23}C_6$ ) befindet; dort wirkt Bor wie Kitt zwischen den Kristallkörnern (unten).



Fotos: Frank Vinken (oben), Siemens (unten, großes Bild), MPI für Eisenforschung (kleines Bild)



Ein wandernder Fehler: Eine Stufenversetzung, bei der eine Atomlage im Kristallgitter unvollständig ist, wandert durch einen Kristall, wenn ein Material verformt wird. In Bild 4 dieser schematischen Sequenz ist zu erkennen, wie sich daraus eine plastische Verformung ergibt.

lagert. Und das mit deutlich weniger Kraft als nötig wäre, um den Teppich als Ganzes zu verschieben.

Die Kräfte zum Verformen von Metallen können die Düsseldorfer inzwischen gut aus dem atomaren Aufbau herleiten. Neugebauer schaut dabei in seinem Betrachtungsrahmen von rund 100 Atomen zunächst, wie groß die äußere Kraft sein muss, um eine einzelne Versetzung von einigen fehlenden Atomen eine Reihe weiterwandern zu lassen. Diese Befunde fließen dann in Dierk Raabes Betrachtungen größerer Materialausschnitte ein.

Raabe muss allerdings noch eine Reihe weiterer Effekte berücksichtigen. Zum Beispiel, dass Versetzungen auch an Hindernisse stoßen und sich dabei in mehrere neue Versetzungen

aufspalten können. Aus diesem Grund nimmt die Zahl der Versetzungen im Laufe einer Verformung immer weiter zu. „In einem größeren Werkstück, etwa vom Umfang eines Kubikmeters, kann die an der Verformung beteiligte Gesamtlänge solcher Defekte immerhin bis zu einem Lichtjahr betragen“, sagt Raabe. Das sind fast zehn Billionen Kilometer.

Bei anhaltender äußerer Krafteinwirkung sind die Versetzungen irgendwann so zahlreich, dass sie sich gegenseitig blockieren. „Dann lässt die Verformbarkeit nach“, so Raabe. Das kann jeder an einer einfachen Büroklammer nachvollziehen. Jene Stellen, an denen der Draht bereits geknickt wurde, sind besonders schwer zu verformen. Mitunter brechen sie.

Die besondere Kompetenz der Düsseldorfer liegt darin, das Verhalten von Versetzungen zu modellieren. Gitterfehlerdynamik heißt dieses Gebiet. „Wir schauen uns an, wie schnell sich die Versetzungen in einem Kristall unter Krafteinwirkung fortpflanzen, wo sie sich auffächern, wo sie blockieren und wie sie miteinander reagieren“, sagt Raabe. Ein ungeheuer komplexes Unterfangen, schließlich tummeln sich in einem einzigen Kriställchen schon mal Millionen solcher Liniendefekte. Und die beeinflussen sich sogar über eine gewisse Entfernung gegenseitig. „Das ist wie in einem rappenden Bus“, sagt Raabe. „Wenn vorn noch ein weiterer Fahrgast einsteigt, wirkt sich das bis nach hinten aus, weil jeder Fahrgast etwas weiterrückt, die vorderen mehr, die hinteren immer weniger.“

### VOM EINZELNEN GITTERFEHLER ZUM GANZEN KRISTALL

Am Ende haben Raabe und sein Team es mit einer Reihe komplizierter Gleichungen zu tun, die es zu lösen gilt. Genau dabei helfen auch Befunde aus den quantenmechanischen Rechnungen Jörg Neugebauers. „Das mechanische Verhalten eines ganzen Kristalls aus der quantenmechanischen Beschreibung des einzelnen Gitterfehlers abzuleiten, das ist etwas, was wir hier erfunden haben“, sagt Raabe.

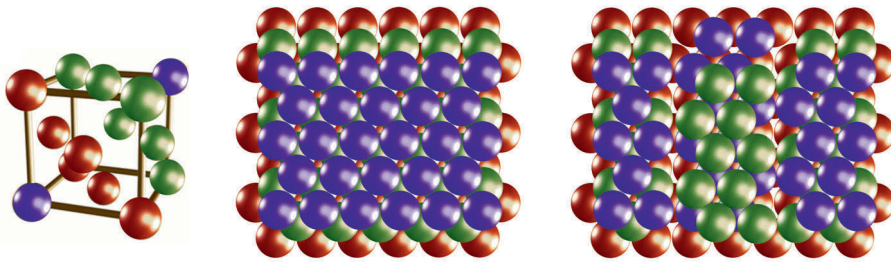
Dabei muss das Team noch etwas anderes berücksichtigen, was auch schon beim Titanprojekt eine Rolle spielte. Nämlich den Umstand, dass manche Metalle verschiedene Kristallgittertypen ausbilden können – mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften. >

### GPS FÜR ATOME

Wie sich die Atome unterschiedlicher Elemente in einem größeren Materialausschnitt tatsächlich verteilen, lässt sich aus den quantenmechanischen Rechnungen für kleine Ausschnitte nur bedingt ableiten. Daher ist es nötig, sich die Verhältnisse in den realen Materialien anzuschauen, sobald man sie einmal hergestellt hat. Wie eine Art GPS für die einzelnen Teilchen wirkt die Atomsondentomografie. Hochspannungspulse schlagen die Atome dazu aus einer hauchdünnen Materialprobe einzeln und nacheinander heraus, und ein elektrisches Feld lenkt sie zum Detektor. Die Zeit, die sie bis dorthin unterwegs sind, ist ein Maß für ihre Masse und ihre Ladung – und damit ein Hinweis auf das Element. Der Ort, wo sie den Detektor erreichen, erlaubt wiederum Rückschlüsse auf ihre Position im Probenmaterial. Auf die Art entsteht ein bis auf das einzelne Atom aufgelöstes dreidimensionales Abbild der Probe.

Gerade bei komplexen Legierungen gibt ein solcher Blick auf die tatsächliche Elementverteilung im Werkstoff interessante Hinweise. So war es auch bei den Arbeiten an einer neuen Materialgeneration für künftige Kraftwerksturbinen. Dabei handelt es sich um eine Nickellegierung, die auch Bor enthält. Erst die Atomsondentomografie zeigte, dass sich die Boratome nicht einfach im Nickelgitter verteilen. Vielmehr setzen sie sich bevorzugt an die Korngrenzen zwischen den einzelnen Kristallen. Dort wirken sie offenbar wie ein Kitt – und verstärken den Zusammenhalt der Körner.





Falsch gestapelt: Die Farben der einzelnen Atomlagen stehen für die Positionen der Atome relativ zu den nächsten und übernächsten Atomlagen darunter. Die normale Anordnung für einen kubisch flächenzentrierten Kristall, dessen Elementarzelle links zu sehen ist, entspricht in dieser Darstellung der Abfolge Rot, Grün und Violett. Bei einem Stapelfehler sind die Positionen in einem Teilbereich verschoben (rechts), sodass sich die Stapelfolge Rot, Violett, Grün ergibt. Stapelfehler machen ein Material steifer; sie gezielt einzubauen macht einen Stahl fester.

Mitunter kann eine Kristallstruktur aufgrund einer äußeren Kraft punktuell in eine andere übergehen. „Dann wird vielleicht an einer Stelle eine Atomlage in eine nur bedingt stabile Position verschoben, und es entsteht ein sogenannter Stapelfehler“, so Raabe. „Der führt dazu, dass zum Beispiel ein kubisch flächenzentriertes Gitter in einer nanoskopisch kleinen Zone zu einem hexagonalen Gitter wird.“

**STAPELFEHLER BEEINFLUSSEN DIE VERFORMBARKEIT**

Und das hat Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften. Die Grenzfläche zwischen zwei solchen Kristallgittertypen wirkt nämlich wie ein Stoppchild für eine Versetzung. Die Folge: Die Verformbarkeit lässt an dieser Stelle nach, das Material wird dort spröde – und kann schließlich sogar brechen. Diese frühzeitige Ermüdung wollen Dierk Raabe und seine Mitarbeiter verhindern. Also erhöhen sie die Energie, die einwirken muss, damit sich ein Stapelfehler bildet und mithin punktuell die Struktur ändert. Inzwischen kann Raabe seinem Kollegen Neugebauer ziemlich genau vorgeben, was er sich vorstellt. „Ich frage dann zum Beispiel, wie denn eine Legierung aussehen müsste, in der die Umwandlung der Kristallstruktur erst oberhalb einer Zugspannung von 0,8 Gigapascal einsetzt.“

Neugebauer und sein Team simulieren daraufhin die Atomverschiebung, die zu einem Stapelfehler und damit zur lokalen Änderung der Gitterstruktur führt. „Wir ermitteln genau die energetische Hürde, die dabei genom-

men werden muss“, so Neugebauer. Diese Stapelfehlerenergie steht mit der Zugspannung in einem definierten Verhältnis. Neugebauer spielt bei seinen aufwendigen Rechnungen dann beliebige Kombinationen aus Eisen- und anderen Atomen durch. So lange, bis eine bestimmte Legierung den von Raabe gewünschten Grenzwert hat.

Auf diese Weise haben die Düsseldorfer Forscher inzwischen einen neuen Stahl geschaffen, der in mehrfacher

Hinsicht Maßstäbe setzt. „Erstmals ist es uns gelungen, so viel Aluminium in einen manganhaltigen Stahl einzubauen, dass dieser rund zehn Prozent leichter ist als üblicher Stahl“, so Raabe. Zehn Prozent, das kann für ein Auto schon mal 100 Kilogramm weniger Gesamtgewicht ausmachen. Aber das war nicht das einzige Highlight. „Bisher waren Stähle mit nennenswerten Aluminiumgehalten spröde – und damit unbrauchbar“, so Raabe. Der neue Stahl ist dagegen extrem verformbar und würde bei einem Crash sehr viel Energie aufnehmen. Ein Verhalten, das die vereinzelt Aluminiumatome im Gitter noch verbessert haben.

Derzeit gibt es knapp 2500 Stahlsorten; und damit mehr als doppelt so viele wie noch zur Zeit der Jahrtausende. Und es gibt immer noch Bedarf, das Material weiter zu optimieren. Dabei ist es heute möglich, die Eigenschaften allein auf Basis der chemischen Zusammensetzung vorherzusagen und die gewünschten Metalle damit gezielt zu designen. Das hätten sich noch vor zehn Jahren wohl nur wenige vorstellen können. ◀

**AUF DEN PUNKT GEBRACHT**

- Wie steif ein Stahl oder eine andere Legierung ist und wie gut sich das Material verformen lässt, sind zwei der Eigenschaften, die Forscher für jedes Einsatzgebiet gezielt einstellen wollen.
- Max-Planck-Forscher berechnen die Materialeigenschaften und fangen dabei mit den quantenmechanischen Wechselwirkungen zwischen einer begrenzten Teilchenzahl an. Sie haben es möglich gemacht, das quantenmechanische Verhalten für komplexe Materialien wie Legierungen mit mehreren Komponenten zu berechnen.
- Die mechanischen Eigenschaften hängen stark von der mikroskopischen Struktur des Materials ab. Fehler im Kristallgitter spielen hierbei eine große Rolle. Was mit den Fehlstellen passiert, wenn das Metall zum Beispiel verformt wird, untersuchen die Düsseldorfer Forscher. So erhalten sie Hinweise, wie sich ein Material für eine Anwendung optimieren lässt.

**GLOSSAR**

**Dichtefunktionaltheorie:** Um die Eigenschaften etwa eines Kristalls oder anderer Systeme aus vielen Atomen zu berechnen, nutzt dieses Verfahren die Elektronendichte an jedem Punkt im Kristallgitter. So ist es nicht mehr nötig, die Wechselwirkungen aller Elektronen untereinander zu betrachten. Der Rechenaufwand sinkt drastisch.

**Stapelfehler:** Stellt man sich Atome als Kugeln vor, die in einem Kristall übereinandergestapelt werden, gibt es für die dritte Atomlage zwei Möglichkeiten der Anordnung: direkt über den Atomen der ersten Schicht oder versetzt dazu. Diese Anordnung ist für eine Kristallstruktur vorgegeben; Abweichungen von diesem Muster werden als Stapelfehler bezeichnet.

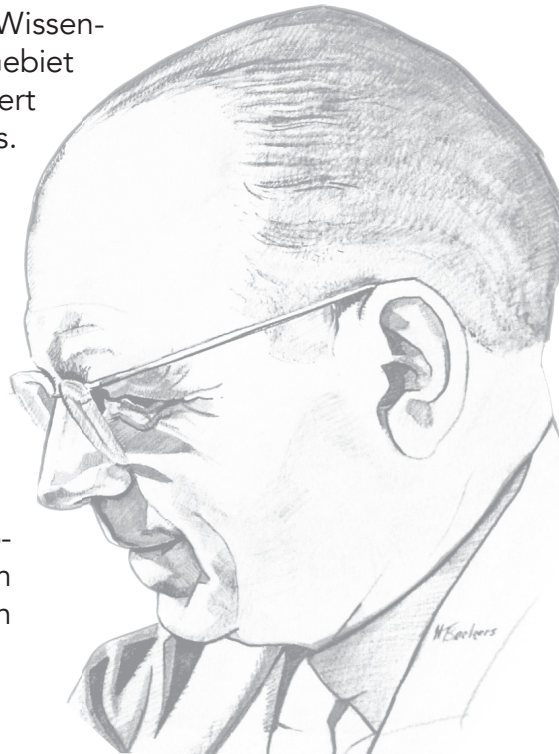
**Stufenversetzung:** Bei diesem auch Liniendefekt genannten Fehler im Kristallgitter endet eine Reihe von Atomen, sodass die benachbarten Reihen versetzt werden müssen, um die Lücke zu füllen.

Der Ernst Haage-Preis zeichnet seit 2006 junge Wissenschaftler für herausragende Leistungen auf dem Gebiet der chemischen Energiekonversion aus und fördert insbesondere den wissenschaftlichen Nachwuchs. Die Auszeichnung wird zu Ehren des 1968 verstorbenen Mülheimer Unternehmers Ernst Haage von der Ernst Haage-Stiftung verliehen und ist mit einem Preisgeld von € 7.500,- dotiert. Nominiert werden können promovierte WissenschaftlerInnen einer deutschen Forschungseinrichtung, die in der Regel nicht älter als 40 Jahre alt sein sollen und noch nicht in einem unbefristeten Anstellungsverhältnis stehen.

Nominierungen können ab sofort bis zum 30. September 2014 schriftlich beim Stiftungskuratorium eingereicht werden. Folgende Unterlagen sollten Teil der Kandidatenvorschläge sein:

- zweiseitige Laudatio
- tabellarischer Lebenslauf
- vollständige Publikationsliste
- bis zu drei Sonderdrucke von Arbeiten der nominierten Person.

Eigenbewerbungen können nicht berücksichtigt werden.



FORSCHUNGSPREIS  
„CHEMISCHE ENERGIEKONVERSION“

## AUSSCHREIBUNG 2014 ERNST HAAGE-PREIS

Direktorium des  
Max-Planck-Institutes  
für Chemische Energiekonversion  
z.Hd. Frau Julia Mayrhofer  
Stiftstr. 34-36  
D-45470 Mülheim an der Ruhr  
Stichwort: Ernst Haage-Preis



Weitere Informationen zum Ernst Haage-Preis,  
zur Stiftung und Preisverleihung stehen unter  
<http://www.cec.mpg.de/institut/preise.html>  
zur Verfügung.

Prof. Dr. Robert Schlögl  
Prof. Dr. Wolfgang Lubitz  
Prof. Dr. Frank Neese



MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR  
CHEMISCHE ENERGIEKONVERSION

Mit dem Preis sollen exzellente grundlegende wissenschaftliche Leistungen auf dem Gebiet der chemischen Energiekonversion ausgezeichnet werden, z.B. in den Bereichen:

- Wasserstoff als Energieträger/-speicher
- Photovoltaik-Speicherlösungen
- Elektrochemische Speicher
- Biomasse – Bioenergie
- CO<sub>2</sub> Umwandlung
- Wasserstoffoxidation bzw. Elektrolyse
- Stickstoffreduzierung
- Artificielle und natürliche Photosynthese
- Entwicklung neuer experimenteller und theoretischer Methoden die in der Energieforschung neue Anwendungsfelder ermöglichen.