



Ungewöhnliche Klänge im Max-Planck-Institut für Eisenforschung: Dierk Raabe testet die Akustik des Treppenhauses. Das Waldhorn war sein Hauptinstrument am Wuppertaler Konservatorium. Nur das Putzen des korrosionsanfälligen Metalls machte dem Schüler keinen Spaß.

Grenzgänger zwischen metallischen Dimensionen

Mit 16 Jahren studierte **Dierk Raabe** Kontrabass und Waldhorn am Wuppertaler Konservatorium. Heute betreibt er als Direktor am **Max-Planck-Institut für Eisenforschung** in Düsseldorf die Quantenrevolution der Werkstoffwissenschaften.

EIN PORTRÄT VON **ROLAND WENGENMAYR**

Hätten sich die Lebensträume des jungen Dierk Raabe erfüllt, dann würde er heute nicht im lichtdurchfluteten Konferenzraum am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf sitzen. Passenderweise geben schwere Eisenträger, die an den Eiffelturm erinnern, der mit viel Glas modernisierten Bauhaus-Architektur ein solides Gerüst. Doch metallische Werkstoffe sind in Raabes Leben Liebe auf den zweiten Blick. Der erste intensive Kontakt war eher abträglich. Das lag an seinem Musikinstrument, einem Waldhorn. „Diese alten Instrumente mussten jede Woche mit so einem ekligen Metallputzzeug gewienert werden“, erzählt er: „Das war eher was für Korrosionsfreunde.“ Der Materialwissenschaftler zählt eindeutig zu den Korrosionsfeinden.

Als 16-Jähriger bestand er die Aufnahmeprüfung am Wuppertaler Musikonservatorium. Auf diesen Weg gebracht hatte ihn vor allem eine engagierte Musiklehrerin. So schien ein Leben als professioneller Musiker zwischen Brahms, Beethoven und Wagner

vorgezeichnet. „Ich bin dann am Nachmittag nach der Schule nach Wuppertal gefahren“, erzählt Raabe. Der sehr persönliche Unterricht am Konservatorium machte ihm Spaß. Er übte fleißig Kontrabass, inzwischen sein Hauptinstrument, und Waldhorn. Nur die Schule interessierte ihn immer weniger: „Ich wollte damals kein Abi mehr machen.“ Doch dann kam die Krise.

VON BRAHMS UND BEETHOVEN ZUR METALLPHYSIK

Dierk Raabe quälte sich mit der Frage, ob er eine falsche Entscheidung für sein Leben getroffen habe. Die frühe professionelle Ausbildung als Musiker machte ihm deutlich, dass sein weiteres Leben sich um „zwei, drei Instrumente“ drehen würde. „Ich muss das vorsichtig ausdrücken, denn ich will ja keinem Künstler auf die Füße treten“, sagt er, „aber das war mir doch ein bisschen zu einseitig.“ Also machte er das Abitur. Über seinen Vater und Onkel, die bei Krupp arbeiteten, war er früh in Kontakt mit dem Thema Stahl gekommen. Nicht zuletzt wegen dieser fami-

liären Vorbelastung studierte er an der RWTH Aachen Metallkunde und Metallphysik. „Das Fach fand ich interessant, weil es zwischen den Ingenieurs- und Naturwissenschaften angesiedelt ist“, erzählt Raabe, „denn zur Lehre gehörten auch Chemie und Physik.“

Offensichtlich war diese Entscheidung richtig, denn einseitig ist sein Forschungsgebiet sicher nicht. Es dreht sich zwar fast alles um metallische Werkstoffe, doch die sind überall; wie kaum andere Werkstoffe formen sie unser Lebensumfeld. „Das ist ja ein sehr altes Gebiet, es geht auf die Bronzezeit zurück“, betont er, „und heute ist es ein Rückgrat-Thema unserer Industriegesellschaft.“ Entsprechend entwickelt sich das Gespräch zum Parforceritt durch unsere technische Kultur. In den folgenden Stunden wird es um Hochtemperaturwerkstoffe für Kraftwerksturbinen gehen, um hochfeste Stähle für Autobleche, Speziallegierungen für Flugzeugfahrwerke, Hüftgelenksimplantate, Goldkontakte in elektronischen Chips und korrosionsfeste Bauteile für Meerwasser-Entsalzungsanlagen. >

oben	Voller Durchblick: Dierk Raabe schaut in die Probenkammer der neuen Atomsonde. Dieses Gerät kann Atom für Atom den Aufbau der winzigen Kristalle in Metallwerkstoffen entschlüsseln.
unten	In der Ultrahochvakuumkammer (Bildmitte) werden die ultrafeinen Probenspitzen aufbewahrt. Im angeflanschten Vakuumrohr (Vordergrund rechts) steckt eine Stange, mit der die Forscher die Proben in die große Analysenkammer (Hintergrund) schieben können. Dort tragen Pulse aus Laserlicht oder elektrischer Hochspannung die Probenspitze Atom für Atom ab. Diese elektrisch aufgeladenen Atome (Ionen) beschleunigt ein elektrisches Feld zu einem flächigen Detektor. Die Flugzeit bis dort enthüllt die Atomsorte, der Einschlagsort auf dem Detektor zeigt ihre ursprüngliche Position im Kristall.

Schnell zeigt sich, dass Raabe mit Mr. Spock aus der Science-Fiction-Serie *Star Treck* ein Lieblingswort teilt: „Faszinierend!“ Sonst hat er mit dem kühl-reservierten Spitzohrträger allerdings nicht viel gemein. Mit leicht rheinischem Zungenschlag sprudelt es aus ihm nur so heraus. Immer wieder springt er vom Tisch auf, skizziert schnell etwas an der Tafel, und schon sitzt er seinem Gast wieder gegenüber. Von seinen Gesprächspartnern erwartet er ganz selbstverständlich die Fähigkeit, in minimaler Zeit ein Maximum an Information aufnehmen zu können. Langeweile kommt jedenfalls nicht auf.

MAN STAUNT, DASS MAN DA WIEDER LEBEND RAUSKOMMT

Sehr früh mahnte Raabe aber auch, „dass man da den roten Faden erkennen muss“. Diese Sorge ist unbegründet. Bei jedem der vielen Beispiele wird klar, dass immer das komplexe Innenleben von metallischen Legierungen im Fokus steht. Das mikroskopische Verhalten dieser Gemische aus Eisen, Nickel, Kohlenstoff, Kobalt, Titan, Chrom, Aluminium und anderen Zutaten aus dem Elemente-Supermarkt des Periodensystems hat die Wissenschaft noch keineswegs völlig verstanden. Deshalb muss die Industrie auch heute noch Strukturwerkstoffe für neue mechanische Anforderungen oder extreme Temperaturen mühsam empirisch entwickeln.

Die Suche nach neuen Werkstoffen gleicht also nach wie vor intelligentem Ausprobieren auf Basis von Erfahrung. Gäbe es eine solide Theorie, könnten Materialwissenschaftler viel zielgerichteter vorgehen und wären zugleich of-

feiner für neue Entdeckungen. „Eine solche Theorie der Entwicklung neuer Legierungen existiert nicht“, sagt Raabe und hat damit auch schon das Traumziel seiner Forschung vorgestellt: „Ich kann erst wirklich neue Werkstoffe gezielt designen, wenn ich als Wissenschaftler genau verstehe, was da passiert.“

Diese Zusammenhänge und die Eigenschaften von Werkstoffen lassen ihn immer wieder staunen. Schon ist er bei Materialien, denen die meisten bedenkenlos ihr Leben anvertrauen. „Nehmen Sie ein Flugzeug“, sagt Raabe begeistert: „Man staunt jedes Mal, dass man da wieder lebend aussteigt!“ Mit seinen Händen veranschaulicht er, wie die Druckkabine aus einer Aluminium-Kupfer-Legierung sich in der dünnen Höhenluft um fast 20 Zentimeter im Durchmesser aufbläht: „Wussten Sie das?“ Dann kommt er zu den Turbinenschaufeln direkt hinter der Brennkammer der Flugzeugtriebwerke, die mit bis zu tausend Grad Celsius glühen. „Man kann seinem Schöpfer nur auf Knien danken, dass die nicht in Kleinteilen hinten rausfliegen“, sagt der Wissenschaftler und lacht.

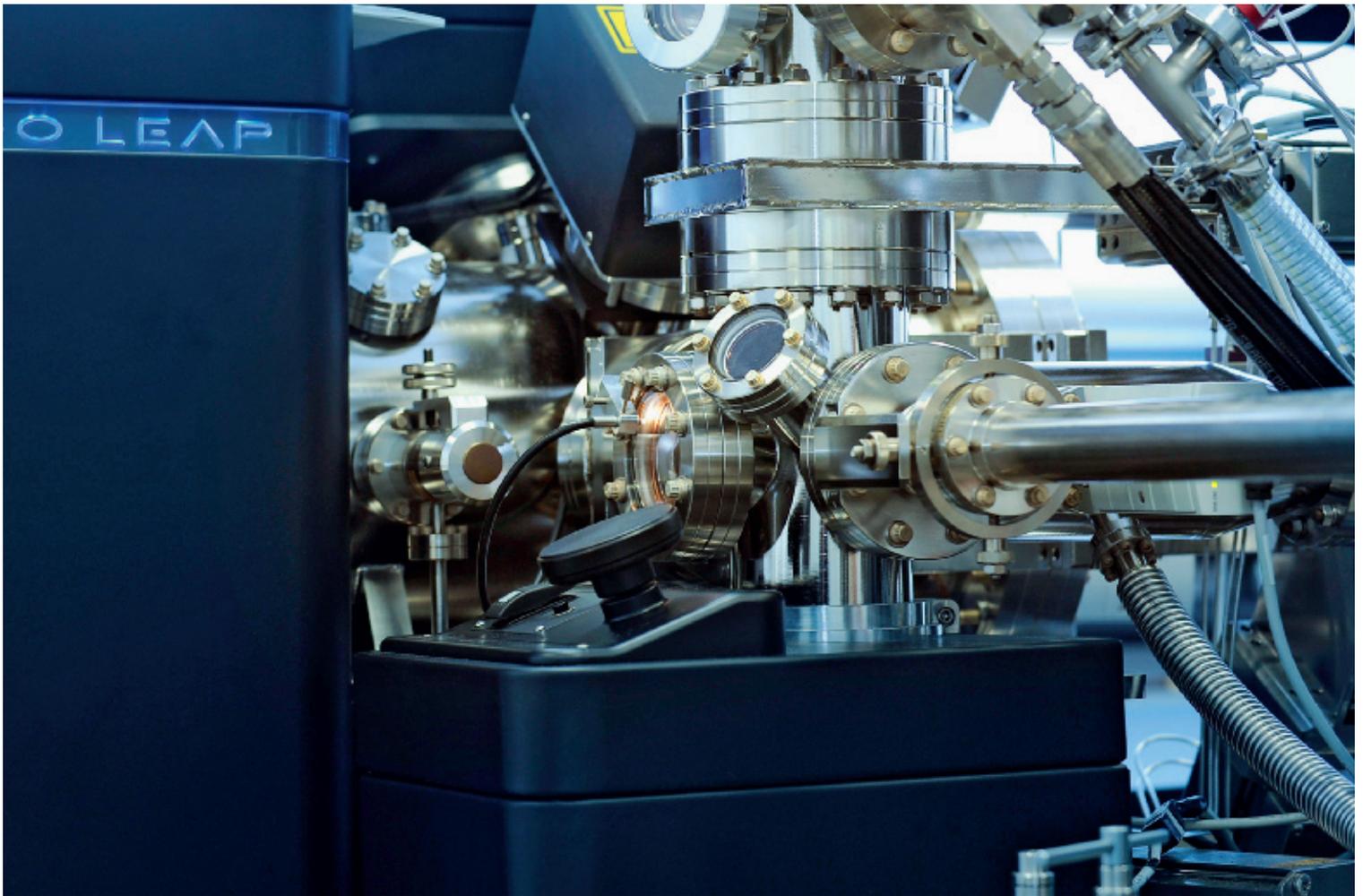
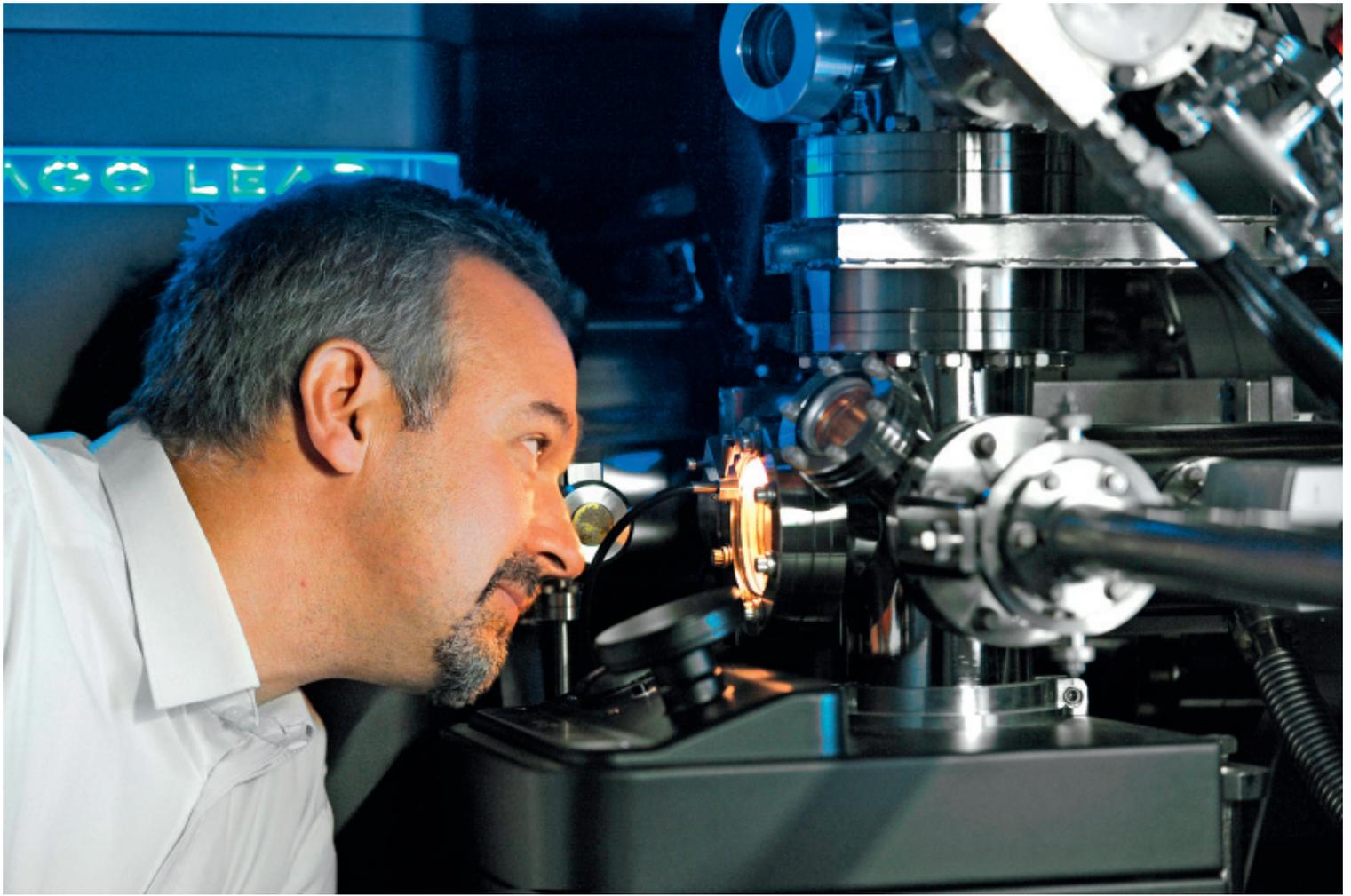
Natürlich weiß er sehr gut, warum das nicht passiert. Doch er will das mechanische Verhalten solcher Werkstoffe tiefgehend verstehen. Und da kommt die Quantenmechanik ins Spiel, die das Verhalten einzelner Atome und Elektronen beschreibt. Ersten Kontakt zu dieser grundlegenden, aber schwer zu verstehenden Theorie bekam der angehende Ingenieur während seines Studiums über eine gute Physikvorlesung. Inzwischen ist sie für ihn ein Arbeitspferd geworden, dank der intensiven Zusammenarbeit mit seinem Direktorenkollegen Jörg

Neugebauer und dessen Theoriegruppe. Der Umgang mit quantenmechanischen Grundlagen ist in der werkstoffwissenschaftlichen Ausbildung ungewöhnlich, denn sie steht an den meisten Universitäten dem Maschinenbau nahe. Wer aber Materialien für große technische Bauteile entwickelt, braucht sich traditionell nicht um einzelne Atome und Elektronen zu kümmern.

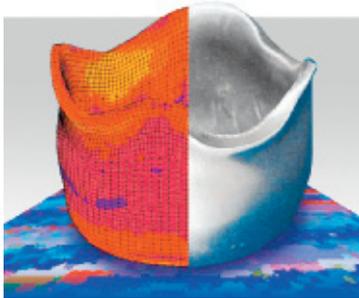
DIE QUANTENTHEORIE WIRD ZUM ARBEITSPFERD

Diese Haltung jedoch wollen Dierk Raabe und seine Institutskollegen radikal ändern. Wenn Raabes Traum in Erfüllung geht, dann wird es den Maschinenbauern wie einst den Elektrotechnikern ergehen: Diese mussten sich bereits nach der Erfindung des Transistors vor rund sechzig Jahren an quantenmechanische Designwerkzeuge gewöhnen. „Mit unserer langfristig angelegten Forschungsarbeit wollen wir dazu beitragen, dass man in vielleicht 15 Jahren Werkstoffe komplett auf Basis der Quantenmechanik entwickelt“, sagt Raabe: „An diese Vision glaube ich knallhart!“

In seiner wissenschaftlichen Karriere entwickelte Raabe schon sehr früh Computersimulationen, mit denen sich die Eigenschaften von Werkstoffen theoretisch vorhersagen lassen. Seit seiner Promotion 1992 in Aachen ist das sein zentrales Forschungsgebiet. Damals arbeitete er am Institut für Metallkunde und Metallphysik als Gruppenleiter. Seine ausgezeichneten Ergebnisse belohnte die Deutsche Forschungsgemeinschaft mit einem renommierten Heisenberg-Stipendium. Damit ging er 1997 nach seiner Habili-



» Mit unserer langfristig angelegten Forschungsarbeit wollen wir dazu beitragen, dass man in vielleicht 15 Jahren Werkstoffe komplett auf Basis der Quantenmechanik entwickelt. An diese Vision glaube ich knallhart!



Metalle fließen beim Umformen nicht gleichmäßig wie zäher Honig, sondern in bevorzugte Richtungen. Diese kritische „Zipfelbildung“ kann die von Raabes Team entwickelte Software realistisch simulieren (links).

tation in die USA. Dort forschte er an der Carnegie Mellon University in Pittsburgh und am Hochfeld-Magnetlabor in Tallahassee in Florida. In der Max-Planck-Gesellschaft war man von Raabes innovativen Methoden so beeindruckt, dass man ihn 1999 mit nur 34 Jahren als einen der jüngsten Max-Planck-Direktoren an das Max-Planck-Institut für Eisenforschung berief.

„Der Vorteil war vielleicht, dass ich zwischen den Ingenieur- und Naturwissenschaften sitze und viel simuliert habe“, erzählt er weiter. Diese komplexen Simulationsprogramme darf man sich aber nicht so vorstellen, dass man in eine Eingabemaske ein paar gewünschte Materialeigenschaften eingibt und danach vom Computer das Kochrezept für eine neue Legierung ausgespuckt bekommt. Die Simulationsprogramme im Werkstoffdesign sind sehr komplex. Allerdings vereinfachen viele Simulationen die Metalle in einer entscheidenden Hinsicht: Sie vernachlässigen die komplizierte Mikrostruktur – so wie Schiffskonstrukteure sich nicht um einzelne Wassermoleküle kümmern. „Man nennt das Homogenisieren“, erklärt Raabe.

Bei vielen Anwendungen sind solche Vereinfachungen legitim. Tatsächlich sind aber Metalle und metallische Legierungen auf komplizierte Weise körnig. Sie bestehen aus vielen kleinen Kristallen, die – je nach Werkstoff – zwischen einigen Mikrometern, einem tausendstel Millimeter und mehreren Millimetern groß sind. In diesen kleinen Kristallen sind die Atome sehr regelmäßig angeordnet, wie in einem Diamanten oder Bergkristall. Bei Legierungen wird die Sache noch komplizierter, weil die atomare Zusammensetzung von Kristall zu Kristall variieren kann.

Das Zusammenspiel dieser Kristallkörner bestimmt aber wesentliche Werkstoffeigenschaften. So kann es zum Beispiel passieren, dass ein Blech beim Kaltumformen, etwa für einen Kotflügel, unschöne Nasen bekommt. Das Metall fließt nämlich in der Presse nicht wie ein zäher Honig gleichmäßig überallhin, sondern bevorzugt bestimmte Richtungen. Daran sind die kleinen Kristalle schuld. Sie geben wegen ihrer geschichteten Atomlagen in einer Vorzugsrichtung nach – wie Sandwiches, deren Brotscheiben sich auf dem glitschigen Belag am liebsten parallel zueinander verschieben.

AUDI UND MERCEDES NUTZEN DAS SIMULATIONSPROGRAMM

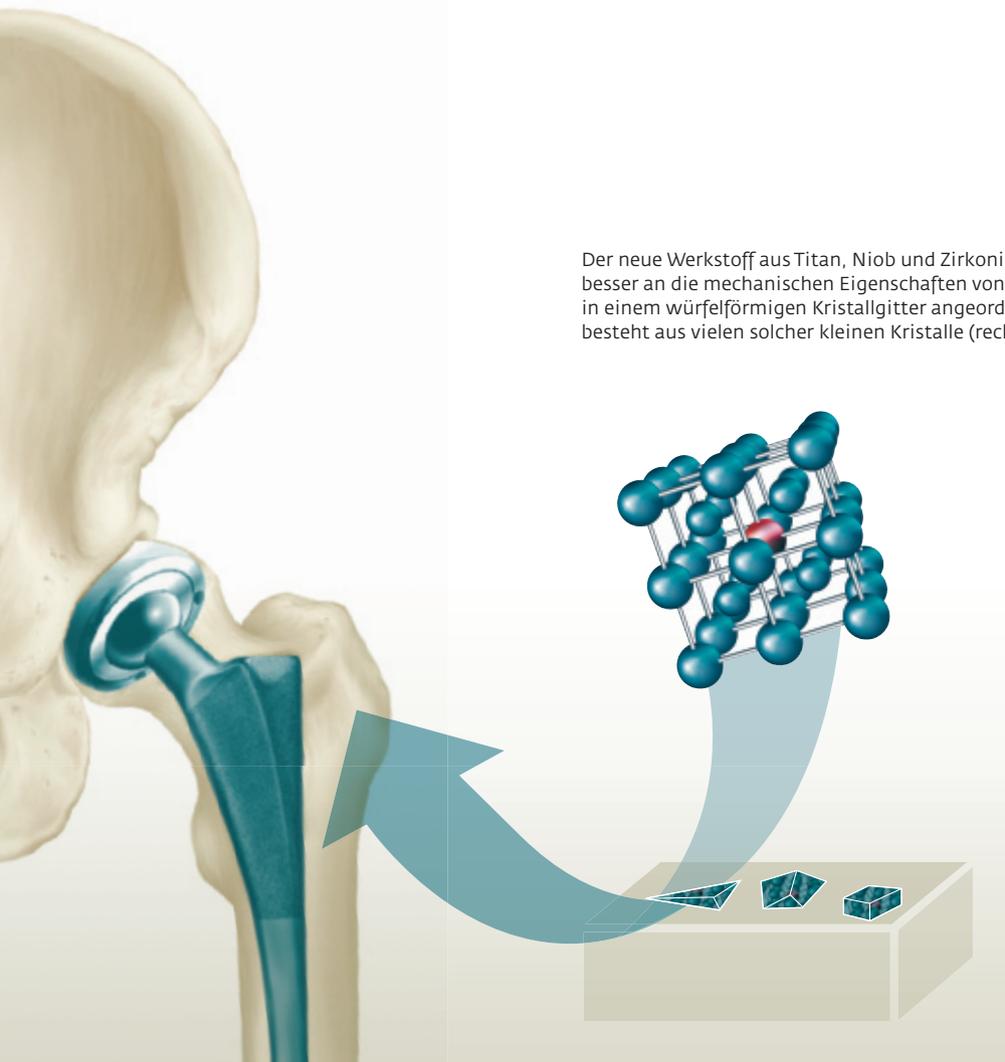
Für die Automobilindustrie mit ihrem Hang zu immer kniffliger gefalteten Karosseriedesigns stellt das ein wachsendes Problem dar. Deshalb hat Raabe mit seinem Team vor einigen Jahren ein Simulationsprogramm entwickelt, das Autobauer wie Audi und Mercedes heute einsetzen. Sie berechnen damit das Verhalten von Stahlsorten in den Pressen voraus. Das spart teure Tests und hohe Ausschussraten beim Anfahren der Produktionslinien für ein neues Modell.

Die Düsseldorfer haben einen geschickten Weg gefunden, in ihrem Simulationsprogramm das Verhalten der kleinen Kristalle auf das Umformverhalten ganzer Werkstücke zu übersetzen. Müsste der Computer Körnchen für Körnchen das Zusammenspiel vieler Millionen virtueller Kristalle simulieren, würde er zu lange brauchen. Deshalb kam Raabes Team auf die Idee, jeweils alle Kristalle mathematisch zusammenzufassen, die in die gleiche



Foto: Frank Vinken (2)

Dierk Raabe erklärt an der Tafel, wie die neue Atomsonde funktioniert. Die Wissenschaftler wollen damit den atomaren Aufbau komplexer Metalllegierungen präzise entschlüsseln.



Der neue Werkstoff aus Titan, Niob und Zirkonium passt Hüftgelenksimplantate besser an die mechanischen Eigenschaften von Knochen an. Die Atome sind in einem würfelförmigen Kristallgitter angeordnet (rechts oben), der Werkstoff besteht aus vielen solcher kleinen Kristalle (rechts unten).

Richtung orientiert sind – schließlich zeigen sie das gleiche Fließverhalten. Das verkürzte die Rechenzeit um den Faktor hundert.

DAS MULTISKALENPROBLEM

Nicht nur die unterschiedlichen Größenordnungen vom Atom über mikrometergroße Kristalle bis zum metergroßen Werkstück ergeben ein kompliziertes „Multiskalenproblem“, wie Raabe das nennt. Noch extremer dehnt sich die Spanne der Zeitskalen: Sie reicht von den Bewegungen der Elektronen innerhalb von Femtosekunden, Billiardstel Sekunden, bis zu Jahren, in denen ein Werkstück korrodiert oder durch Kriechen einer Dauerbelastung nachgibt.

„Diese Skalen sind mit Rechner-simulationen nicht zu überbrücken, auch in dreißig Jahren nicht“, sagt Raabe: „Also müssen wir das theoretisch überbrückbar machen.“ Dabei

hilft den Düsseldorfern eine Entdeckung: Die genaue quantenmechanische Beschreibung dessen, was sich auf der mikroskopischen Skala zwischen wenigen Atomen in den kleinen Kristallen abspielt, kann schon gute Aussagen liefern. Ein Beispiel sind die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffs. „Die ersten Arbeiten hier zusammen mit den Kollegen von der Theorie haben eine Präzision in der Vorhersage bestimmter Phänomene erzielt, die mich echt verblüfft hat“, erzählt Raabe. Mit der sehr anspruchsvollen Anwendung der Quantentheorie beschäftigt sich das Team des Direktorenkollegen Jörg Neugebauer. Die Zusammenarbeit klappt prima: „Wir träumen so ziemlich dieselben wissenschaftlichen Träume“, so Raabe.

Beim quantenmechanischen Werkstoffdesign geht es zentral um die Elektronen. Sie bilden den Kleber, der die Atome zusammenkittet. Diese Klebefkräfte kann die Quantenmechanik

auf der atomaren Skala sehr präzise beschreiben. Aus den Formeln lässt sich direkt ableiten, wie sich der Kristall zum Beispiel mechanisch verhalten wird. Nun besteht ein großes, „makroskopisches“ Werkstück zwar aus vielen Kristallen, doch diese legen die Grenzen der Werkstoffeigenschaften fest – so wie eine Kette nur so stabil wie ihre einzelnen Glieder sein kann.

„Mein Traum ist das elektronische Design von Werkstoffen“, erklärt Raabe. Gegenüber den empirischen Entwicklungsmethoden hat dieser elementare theoretische Ansatz eine große Stärke: Er ermöglicht es, völlig neue Werkstoffe zu entwickeln. Die Empirie dagegen kann nur bereits Bekanntes variieren.

VÖLLIG NEUE TITANLEGIERUNG FÜR HÜFTIMPLANTATE

Dierk Raabe will Maschinenbauer und traditionell ausgerichtete Werkstoffwissenschaftler von den Möglichkeiten des quantenmechanischen Ansatzes überzeugen. Dazu sollen beeindruckende Demonstrationsprojekte dienen. Eines ist eine völlig neue Titanlegierung für Hüftgelenksimplantate. „Pro Jahr erhalten rund eine Million Menschen weltweit so eine künstliche Hüfte“, erklärt Raabe. Leider lockern sich die neuen Gelenke nach einigen Jahren und müssen ersetzt werden. Das Problem ist der Knochen, der sich zurückbildet. Titan ist gut fünfmal steifer als Knochen, deshalb nimmt das metallische Gelenk wesentlich mehr Kräfte auf. Wie ein Muskel, der nicht mehr trainiert wird, baut daraufhin der unterforderte Knochen ab.

Den Düsseldorfern gelang es, eine wesentlich weichere Titanlegierung zu entwickeln. Sie passt sich mechanisch viel besser an den Knochen an, weil sie eine andere Kristallstruktur als Titan besitzt. Möglich war die Entwicklung dieses völlig neuen Werkstoffs aus bioverträglichem Titan, Niob und Zirkonium nur mithilfe der Quantenmechanik. Die Düsseldorfener verhandeln bereits mit Herstellern solcher Prothesen.

Die gesellschaftliche Relevanz seiner Forschung spielt für Raabe eine große Rolle. Auf die Titanlegierungen kamen die Düsseldorfener allerdings auch, weil diese auf der atomaren Ebene noch relativ einfach beschreibbar sind. „Es war also in mehrerer Hinsicht eine strategische Entscheidung“, sagt Raabe. Er träumt allerdings schon davon, viel komplexer aufgebaute Hochtemperaturwerkstoffe noch hitzefester zu machen. Das sind Gemische aus gut einem Dutzend verschiedener chemischer Elemente. Motiv sind die riesigen Turbinen in heutigen Kohlekraftwerken: Könnte man deren Betriebstemperatur „von etwa 580 auf 720 Grad Celsius erhöhen“, so Raabe, dann würden sie Kohle wesentlich effizienter in Energie umwandeln und erheblich weniger Kohlendioxid in die Luft blasen. „Für eine Kilowattstunde Strom muss ich dann nicht mehr ein halbes Kilo Kohle da hineinschütten“, sagt Raabe: „Das könnte weniger als ein Drittel Kilo sein!“

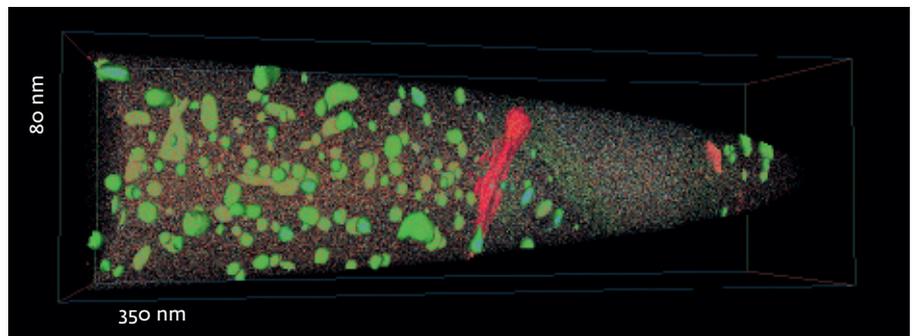
Vor vier Jahren verlieh die Deutsche Forschungsgemeinschaft Raabe den Gottfried-Wilhelm-Leibniz-Preis. Dieser höchstdotierte deutsche Wissenschaftspreis bescherte ihm 1,55 Millionen Euro an zusätzlichem For-

schungsbudget. Von diesem Geld hat er nun auch ein Gerät angeschafft, das Atomsonde heißt. Es kann anhand einer feinen Materialprobe ermitteln, auf welchen Plätzen der Kristallstruktur die verschiedenen Atome genau sitzen. Mit diesen Daten hofft Raabe, auch die Hochtemperaturstähle der quantenmechanischen Berechnung zugänglich zu machen.

Wenn Raabe von seinen vielen Projekten, Partnerschaften und Kontakten zu anderen Wissenschaftlern erzählt, zeigt sich der leidenschaftliche Kommunikator und Netzwerker. Ob er das wäh-

rend seiner Zeit als Orchestermusiker gelernt hat? Nach kurzem Nachdenken bestätigt er, dass es da eine Verbindung zur Wissenschaft gäbe: Künstler seien auch ausgeprägte Individualisten und doch müssten sie sich zu einem gemeinsamen Wohlklang zusammenfinden.

Wichtig ist ihm zudem die Kreativität, die ein Musikstudium vermittelt. Zum Musikmachen kommt er allerdings kaum noch. „Die Atmosphäre an unserem Institut ist so gut“, lacht er, „dass ich mich zu Hause dann doch lieber mit einem wissenschaftlichen Thema beschäftige, als Musik zu machen.“ ◀



Dierk Raabe vor der leistungsfähigen Computeranlage zur Datenauswertung der Atomsonde. Sie muss die Sorten und die Kristallpositionen von 10 bis 100 Millionen Atomen pro Analyse aus den Messdaten errechnen. Dabei entstehen Grafiken, die etwa das stark vergrößerte atomare Innenleben einer superfeinen nadelspitzenförmigen Probe in einer Atomsonde zeigen. Dieses Gerät kann aufdecken, an welchen Positionen des atomaren Kristallgitters die verschiedenen Atome (unterschiedliche Farben) einer Legierung im Kristallgitter sitzen.