

bild der wissenschaft **plus**

Die Preisträger



DER KLAUS TSCHIRA PREIS
für verständliche Wissenschaft

Eine Sonderpublikation in Zusammenarbeit mit der
Klaus Tschira Stiftung gGmbH



ATOME AUF DEM BASAR

Wenn ein Metall in Kontakt mit Luft gerät, oxidiert es spontan, und seine Oberfläche wird von einer Oxidschicht bedeckt. Die Dynamik dieses Vorgangs ist ein frenetisches Treiben von Atomen, die zusammentreffen, miteinander verhandeln, aber auch kollaborieren. Ein Einblick in das Geschehen kann erstaunliche Erkenntnisse mit sich bringen.

von Janina Zimmermann

WENN MAN SICH VORSTELLT, die Hand auf eine kühle, glatte Türklinke zu legen oder eine spiegelnde, dünne Alufolie abzutrennen, denkt man meistens, man fasse ein Metall an – Eisen, Aluminium oder vielleicht Chrom. Wie sehr wir uns dabei doch täuschen. Keines dieser Metalle können wir in seiner reinen Form sehen oder anfassen. Denn kaum tritt ein Metall in Kontakt mit Luft oder Wasser, was schwer zu vermeiden ist, bildet sich innerhalb weniger Picosekunden (10^{-12} Sekunden) eine nanometerdünne Oxidschicht auf der Metalloberfläche. Die Oxidation (vom griechischen „oxys“, sauer) läuft nämlich spontan in Anwesenheit von Sauerstoff ab. Es gibt nur eine Ausnahme: Gold – das einzige Metall, das nicht oxidiert und sich in reiner Schönheit zeigt, was es auch zu Recht zu einem der edelsten und teuersten Metalle macht. Alle anderen Metalle zeigen sich nur bedeckt mit einer äußeren Schutzschicht, etwa so, als ob sie Kleidung an hätten. Je nach Metall kann die Oxidation nach einer Weile anhalten, man spricht dann von Passivierung, oder ungehindert weiter verlaufen und zu dem ungeliebten Phänomen der Rostbildung, also zur Korrosion, führen.

Da die Oxidschicht als einziger Vermittler zwischen dem Metall und der äußeren Umgebung agiert, ist es einerseits sehr wichtig, zu wissen, woraus die dünnen Oxidschichten überhaupt bestehen, und andererseits eine interessante Frage, wie sie sich in so kurzer Zeit bilden. Denn die Oxidschicht bestimmt nicht nur das Aussehen und die Oberflächenbeschaffenheit, sondern auch das physikali-

sche Verhalten und die Einsetzbarkeit eines Metalls. Und Anwendungen, in denen Metalle eine zentrale Rolle spielen, gibt es genug: von der Nanosensorik und Mikroelektronik über Werkzeuge für den täglichen Gebrauch bis hin zum Fahrzeug- oder Brückenbau.

Besonders interessant und heikel wird es jedoch, wenn metallische Materialien im Inneren des menschlichen Körpers Anwendung finden, etwa als Träger- oder Beschichtungsmaterial für medizinische Implantate wie Hüftprothesen, künstliche Herzklappen oder Stents in der Gefäßchirurgie. Hier stellt sich die Frage: Warum werden gewisse Materialien vom Körper abgestoßen oder lösen Allergien und Entzündungen aus? Dafür ist weitgehend die Oxidschicht verantwortlich, denn sie und nicht das Metall ist in direktem Kontakt mit dem menschlichen Körper und bestimmt somit die Verträglichkeit und Tauglichkeit des Implantats. Um das genauer zu verstehen, muss man stark zur Grenzfläche zwischen Oxid und Körper „reinzoomen“ und sich das Geschehen auf der Nanometerskala anschauen. Da passieren nämlich jede Menge chemische Reaktionen. Proteine aus dem Körper haften an der Oberfläche, oder Ionen aus dem Oxid lösen sich und geraten in den Körper. Der Schlüssel zum besseren Verständnis liegt also in der kleinen Nanowelt der Atome und in ihrem gegenseitigen Zusammentreffen.

Aber wie beobachtet man dieses Geschehen? Experimentalphysiker haben erstaunliche Techniken entwickelt, mit denen man

einzelne Atome „fotografieren“ oder gar verschieben kann. Interessant wäre es jedoch, einen Film zu erzeugen, in dem man chemische Reaktionen live beobachten könnte. Da dieses experimentell schwer realisierbar ist, muss man eine andere Methode nutzen, um sich an die Nanowelt heranzutasten: Das Zusammenspiel der Atome kann man mit der Hilfe einzig und allein eines Rechners aus den grundlegenden Gesetzen der Quantenmechanik berechnen. „Ab initio“ nennt man das, also „von Anfang an“, direkt aus den Basisgesetzen der Natur abgeleitet und ohne

DR. JANINA ZIMMERMANN

1981 geboren in Herdecke
2000 Abitur in Triest (Italien)
ab 2000 Grundstudium der Physik an der Universität Stuttgart
ab 2002 Hauptstudium an der Universität Regensburg
2006 Diplom in Physik
2006 bis 2009 Doktorandin am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg
9.11.2009 Promotion zum Dr.-Ing.
seit 2009 EU-Referentin am Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg und wissenschaftliche Mitarbeiterin an der Universität Bremen (Dienstort Freiburg)
Infos: www.hmi.uni-bremen.de/Zimmermann/zimmermann_home.html
janina.zimmermann@iwmm.fraunhofer.de

Fotos: T. Klink für bdw

A woman with blonde hair and blue eyes, wearing a black long-sleeved top, is smiling and holding a grey hip implant model. She is holding the model with both hands, with one hand near her head and the other near her chest. The background is a plain, light grey.

Janina Zimmermann hat den Dreh raus: Sie konnte auf atomarer Ebene zeigen, wie das Metall eines Hüftimplantats beschaffen sein muss, damit es im Körper keine Abwehrreaktion auslöst.



Die Physikerin prophezeit der Prothetik eine positive Zukunft: Die künstliche Gelenkpfanne ist mit einer Kobalt-Chrom-Legierung überzogen und lässt sich so gut in den Beckenknochen integrieren.

DAS SCHÖNE AN DER PHYSIK

Janina Zimmermann im bdw-Gespräch

Sie arbeiten interdisziplinär, unter anderem in Chemie und Medizintechnik. Sehen Sie sich trotzdem als Physikerin?

Ja, ich habe Physik studiert und in meiner Arbeit deren Technik und Methodik angewandt. Das Schöne ist, dass Physik die Naturgesetze beschreibt und so als Basis für alle anderen Fächer dient. Sie legt den Grundstein zur Interdisziplinarität.

32 Computer-Prozessoren, die einen Monat rechneten – da mussten Sie lange warten! Sind Sie geduldig?
Eigentlich nicht! Aber in der Wissenschaft sind langfristiges Denken, Ergebnisse, die auf sich warten lassen und Erfolge erst nach einer langen Anlaufzeit die Regel.

Hatte Ihre Schulbildung in Italien Auswirkungen auf Ihre Studienwahl?
Triest hat eine große Tradition im Bereich Physik. Ich erhielt dort eine exzellente Ausbildung, war motiviert und optimal auf das Studium vorbereitet.

Medizintechnische Anwendungen – bleibt das weiterhin Ihr Bereich?
In Zukunft möchte ich mich mehr mit Wissenschaftskommunikation und -management beschäftigen. Wo Personen aus unterschiedlichen Fachrichtungen aufeinandertreffen, ist verständlicher Austausch gefragt.

andere Hilfsmittel zu benötigen. Man kann so mit verblüffender Genauigkeit die physikalischen Eigenschaften von Festkörpern oder Molekülen berechnen und chemische Reaktionen simulieren und als Film auf dem Bildschirm wiedergeben. Aber der Natur so in die Karten zu schauen, hat seinen Preis. Um eine einzige chemische Reaktion zu simulieren, die in der Natur in einigen Picosekunden stattfindet, braucht man 32 Computerprozessoren, die Tag und Nacht für etwa vier Wochen gleichzeitig rechnen!

DAS AGGRESSIVE MILIEU DES MENSCHEN

In meiner Arbeit habe ich mittels vieler solcher Nanowelt-Filme die Oxidation von metallischen Implantatmaterialien schrittweise und realitätstreu verfolgen können. Oft werden Implantate aus Legierungen hergestellt, das heißt aus Materialien, die aus dem Zusammenfügen von unterschiedlichen reinen Metallen zu einem Mischkristall entstehen, mit dem Ziel, die Werkstoffeigenschaften zu verbessern. Eine typische Hüftprothese aus einer Kobalt-Chrom-Legierung besteht zum Beispiel aus zwei Dritteln Kobalt, dem ein Drittel Chrom beigemischt wurde. In Kontakt mit Luft bildet sich eine passive Chromoxidschicht, mit der das Material optimal für das chemisch aggressive Milieu des menschlichen Körpers gewappnet ist.

Aber wenn Chrom diese bemerkenswerte Eigenschaft hat, warum wird es dann nicht alleine als Implantatmaterial verwendet? Was passiert überhaupt, wenn Sauerstoff-

moleküle auf eine Metalloberfläche treffen? Auf solch einer Oberfläche herrscht ein wirres Treiben und Gewusel, das fast an das Geschehen auf einem orientalischen Basar erinnert. Atome, Moleküle, Ionen nähern sich einander, interagieren, bleiben stehen, neue kommen hinzu, andere gehen – und dieses unaufhaltsam. Das kleine Sauerstoff-Molekül O_2 zum Beispiel ist für die Chrom-Oberfläche sehr verhängnisvoll, da es nichts mehr anstrebt, als sich dem Metall zu nähern und den Chrom-Atomen ihre Elektronen zu klauen. Und das gelingt ihm auch, denn Sauerstoff hat die natürliche Tendenz, Elektronen einzufangen. Diese fließen spontan vom Metall zum Sauerstoff, ebenso wie auf einem Basar das Geld vom Kunden zum Händler fließt. In der atomaren Welt sind eben Elektronen die Währung.

Aber wie so oft, wenn etwas wie Geld im Spiel ist und verteilt wird, wird man sich nicht leicht einig, und es kommt zum Streit. Auch die beiden Sauerstoff-Atome des O_2 -Moleküls mögen mit ihrem ergaterten Elektronen-Reichtum nicht länger zusammenbleiben, und das Molekül spaltet. Die getrennten Sauerstoff-Atome mögen aber genauso wenig alleine bleiben und binden fest an die Chrom-Atome der Oberfläche an. Der beschriebene Prozess stellt nichts anderes als die spontane Oxidationsreaktion dar. Aber dabei bleibt es nicht, denn in der Luft gibt es schließlich unendlich viele solcher O_2 -Moleküle, die sich auf die Oberfläche drängen und Elektronen haben möchten. Deshalb zwingen

sie die Chrom-Atome, aus der Oberfläche auszutreten, um so ins Innere des Materials zu gelangen, wo sich noch viele weitere elektronenreiche Chrom-Atome verstecken. Die Tatsache, was ein ausgeraubtes Chrom-Atom am Anfang der Oxidbildung macht, war völlig unerwartet und in gewissem Maße auch erschreckend. Es umgibt sich mit genau vier Sauerstoff-Atomen, an die es all seine sechs Valenzelektronen ausschüttet, man kann sagen, es wird sein ganzes Kleingeld los.

Was übrig bleibt, ist ein völlig nacktes Chrom-Atom, das sich genau in der Struktur des hochgiftigen Chromat-Ions CrO_4^{2-} angeordnet hat. Es ist so zu einem hochoxidierten, hexavalenten Chrom(VI)-Ion geworden, was nur allzu bekannt für seine allergieerregende und im Extremfall auch krebserzeugende Wirkung ist. Eine verheerende Eigenschaft für ein vermeintliches Biomaterial! In der Tat findet reines Chrom keine Anwendung in medizinischen Implantaten.

Was passiert jedoch, wenn man Chrom nur als Nebenkompente zu einem anderen Metall, wie Eisen oder Kobalt, dazugibt? Oxidiert es immer noch in dem Maße, wie wenn es alleine ist? Das Treiben auf dem atomaren Basar habe ich demnach auch für eine Kobalt-Chrom-Legierungs Oberfläche mittels Nano-Filmen simuliert. Was ich beobachten konnte, war faszinierend. Es zeigte sich, dass Sauerstoff zwar am liebsten Chrom-Atome angreift und ihrer Elektronen beraubt – man nennt das selektive Oxidation –, jedoch treten Kobalt- und nicht Chrom-Atome als erstes bereitwillig aus der Oberfläche hinaus. Das sich bildende Kobalt-Netzwerk steuert gleichzeitig den gezielten Angriff von Sauerstoff auf Chrom, man kann sagen, es bereitet den Weg vor, damit danach alles schneller geht. Ich konnte somit entdecken, dass Kobalt nicht nur hilft, die hochgiftige Phase des Chrom(VI)-Ions zügig zu überwinden, sondern auch die Bildung einer schüt-

zenden Chromoxidschicht aus ungiftigen Chrom(III)-Ionen fördert. Dieses Oxid bleibt stabil und verhindert, dass die gesamte Legierung weiter oxidiert und so wie Eisen rostet.

VORHERSAGEN FÜR NEUE MATERIALIEN

Das Kino auf kleinen Skalen hat es ermöglicht, das wunderbare Zusammenspiel zweier Metalle mit Sauerstoff zu beobachten, bei dem sich ein gegenüber den reinen Metallen wesentlich verbessertes Material ergibt. Noch nie zuvor hat man das Schritt für Schritt verfolgen können. Ich konnte ermitteln, welche Art von Metall-Ionen sich im Oxid aufhalten und folglich eine potenzielle Gefahr für den menschlichen Körper darstellen. Die Kobalt-Chrom-Legierung hat zwar bereits ein breites Anwendungsspektrum, aber dieses Beispiel zeigt dennoch, dass es prinzipiell möglich ist, Vorhersagen für neue Biomaterialien zu treffen, noch bevor man sie in den Körper einbaut. ■



Tanz mit den Atomen: Janina Zimmermann hat sich ein grünes Chrom-Atom geschnappt. Das hängt im Modell mit blauen Kobalt-Atomen und roten Sauerstoff-Atomen zusammen.