

Oxidation ist ein wichtiger Wirtschaftsfaktor, denn sie ist entscheidend für den Verfall oder die Haltbarkeit von Produkten aus Metall. Die Arbeitsgruppe „Hybrid Materials Interfaces“ im Fachbereich 4 der Universität Bremen hat die Vorgänge bei der Oxidation metallischer Verbindungen am Computer simuliert und kann so das Verhalten im Kontakt mit Luft vorhersagen.

## Metallische Materialien in Kontakt mit Luft

### Kleine Ursache, große Wirkung

■ Janina Zimmermann



Früher als das „höchste und längste Eisenbahnviadukt der Welt“ gefeiert, bleiben die Reste der Kinzua-Brücke auch heute noch eine Touristenattraktion im Allegheny National Forest, Pennsylvania.

Als im Jahre 1882 die damals höchste und längste Eisenbahnbrücke der Welt, die Kinzua-Brücke im US-Staat Pennsylvania, nach drei Monaten Bauzeit vollendet wurde, bezeichnete man sie stolz als das „Achte Weltwunder“. Niemand hätte damit gerechnet, dass 120 Jahre später, im Oktober 2003, ein Tornado sie binnen nur 30 Sekunden zunichte machen konnte: Das historische Bauwerk stürzte fast vollständig in sich zusammen. Lag es an der Gewalt der Natur oder an einem fatalen Konstruktionsfehler? Zweifellos spielte die Stärke des Tornados eine bedeutende Rolle, jedoch waren die Schwachstellen im Bauwerk selbst entscheidend:

Die gesamte Stahlkonstruktion war stark von Rost befallen und konnte den äußeren Kräften nicht mehr standhalten. Stahl oxidiert bekannterweise unter Einfluss von Sauerstoff und Wasser aus der Umgebung. Dadurch kann Rost entstehen, ein poröses Eisenoxyhydroxid, das leicht abbröckelt und das darunterliegende Metall weiterem Sauerstoff ausliefert, der sich in das Material „reinfrißt“. Ganz im Gegensatz dazu stehen Edelmetalle wie Gold, Platin und Silber, an deren Oberflächen der Luftsauerstoff abprallt oder sich allerhöchstens in einer atomardünnen Schicht absetzt, ohne ins Innere des Materials zu gelangen.

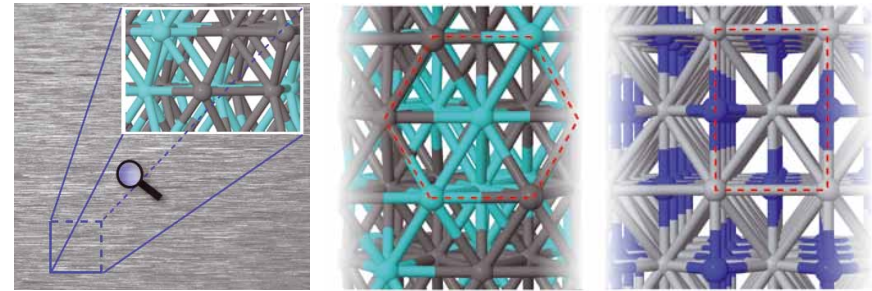
#### Oxidation: Verderb oder Schutz

Warum können sich Metalle so gegensätzlich verhalten? In der Tat sind die Ursachen auf der atomaren Größenskala zu suchen, ab dem Moment wo sich erste Sauerstoffmoleküle ( $O_2$ ) den Atomen der Oberfläche nähern und mit ihnen reagieren. Diese Reaktionen konnten Schritt für Schritt und für unterschiedliche Materialien in der Arbeitsgruppe „Hybrid Materials Interfaces“ (HMI) der Universität Bremen am Computer simuliert und analysiert werden. Mit Hilfe eines Hochleistungsrechners war es möglich, die

chemischen Wechselwirkungen der Atome untereinander mit so hoher Präzision zu beschreiben, wie mit keiner anderen Technik – der Schlüssel zum Verständnis der Oxidationsphänomene. Das lässt sich verdeutlichen anhand zweier Materialien, die als Träger oder Beschichtung in medizinischen Implantaten zum Einsatz kommen: die Kobalt-

nimmt sich ihrer Elektronen an, während die Kobaltatome dabei nur zweite Wahl bleiben. Durch den Austausch von Elektronen bricht einerseits die Bindung im Sauerstoffmolekül, andererseits werden die Chromatome aus der Oberfläche herausgezogen um darüber ein Chromoxid, also ein

Während ein ähnlicher Prozess bei Eisenlegierungen ungehindert weiterlaufen kann, hat Kobalt-Chrom jedoch eine Besonderheit: Das frisch gebildete Chromoxid bröckelt nicht ab, sondern verhindert ein weiteres Eindringen von Sauerstoff-Atomen und dient somit als Schutzschicht für die dar-



Chrom-Legierung (CoCr) und Titanitrid (TiN). Zwei metallische Verbindungen, die jedoch schon in der Kristallstruktur deutliche Unterschiede aufweisen: Die erste kristallisiert ohne eine vorgegebene Anordnung der Elemente in einem hexagonal-symmetrischen Gitter, die zweite in dem bekannten kubischen Kochsalzgitter.

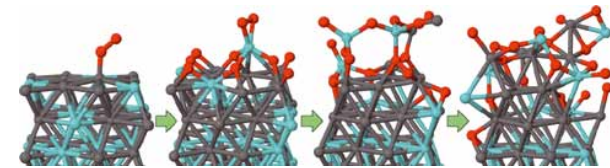
Netzwerk aus Cr- und O-Atomen, zu bilden. Die von Chrom hinterlassenen Leerstellen werden wiederum von einzelnen Sauerstoffatomen genutzt, um ins Innere der Legierung zu gelangen.

unterliegende Legierung. Diese Eigenschaft von Chrom wird auch bei rostfreien Stählen erfolgreich zum Korrosionsschutz genutzt.

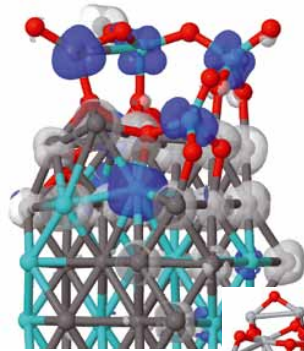
Atomare Gitterstruktur einer Kobalt-Chrom-Legierung (mitte) und von Titanitrid (rechts).

#### Sauerstoff zieht Metallatome aus der Oberfläche

Wissenschaftler der HMI-Gruppe konnten bei der Kobalt-Chrom-Legierung einen entscheidenden Effekt in der Anfangsphase der Oxidation beobachten: Der Sauerstoff steuert gezielt auf die Chromatome der Oberfläche zu und



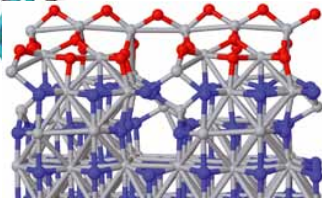
Schnappschüsse aus der Anfangsphase der Oxidation an der Oberfläche einer Kobalt-Chrom-Legierung. Nachdem Sauerstoff sich der Oberfläche nähert bildet sich innerhalb weniger Picosekunden eine Nanometer-dünne Oxidschicht auf der Oberfläche, also ein Netzwerk aus Co- (grau), Cr- (blau) und O-Atomen (rot).



Magnetische Oxidschicht auf einer Kobalt-Chrom-Legierung. Die blauen und weißen Oberflächen zeugen für die antiferromagnetischen Eigenschaften des Oxids.

Bei Titanitrid läuft die Oxidation anders ab: Auftreffende Sauerstoffmoleküle ziehen die Titanatome aus der Oberfläche heraus um ein Oxid zu bilden, während die Stickstoffatome völlig unberührt bleiben. Anders als beim Kobalt-Chrom dringt der Sauerstoff jedoch nicht in die neu entstandenen Lücken auf der

Oberfläche ein. Vielmehr bilden dort die Stickstoffatome untereinander kleine N<sub>2</sub>-Gasmoleküle, die in die Atmosphäre entfliehen. Auch hier schützt nun das stabile Titanoxid das darunterliegende Metall vor weiterer Oxidation.



Atomare Struktur einer oxidierten Titanitrid-Oberfläche. Das gebildete Oxid auf der Oberfläche ist ein Netzwerk aus Titan- (grau) und Sauerstoff-Atomen (rot), während die Stickstoffatome (blau) am Oxidationsprozess nicht teilnehmen.

## Von der Idee bis zur Markteinführung ...

Die InnoWi GmbH ist im Auftrag der Hochschulen und Forschungsinstitutionen im Land Bremen und in Nord-West-Niedersachsen zuständig für die wissenschaftlichen Erfindungen.

Wir beraten und unterstützen die Wissenschaftler/-innen und Mitarbeiter/-innen in allen patent- und vermarktungsrelevanten Fragen von der Idee bis zur Markteinführung.

### Leistungsportfolio der InnoWi im Bereich Erfindungen und Patente

#### Beratung

Informationsveranstaltungen, Seminare z.B. zu Schutzrechten, Kreativ- und Rechercheworkshops

#### Vermarktung

Innovationskommunikation, Vermittlung von Lizenzpartnern, Vertragsverhandlungen und -management

#### Schutzrechtsanmeldung

Ideenanalyse und Erfindungsbewertung, Patent- und Marktrecherche, Patentmanagement

#### Schwerpunkte

Maschinenbau, Verfahrenstechnik, Logistik, Materialwissenschaften, Design, Informationstechnologien, Messtechnik, Elektrotechnik, Chemie, Biotechnologie



**InnoWi**  
Innovationen für die Wirtschaft

**Kontakt:**  
InnoWi GmbH  
Fahrenheitstraße 1  
28359 Bremen  
0421- 96 00 70  
info@innowi.de  
[www.innowi.de](http://www.innowi.de)



### Eine Frage der Elektronen

Diese beiden Beispiele verdeutlichen, dass der treibende Faktor bei der Oxidation der Austausch von Elektronen unter den Atomen ist – ein denkbar kleiner Mechanismus mit riesigem Effekt, man denke nur an



die Kinzua-Brücke. Er führt zum Aufbrechen und zur Neubildung von atomaren Bindungen und bestimmt somit den Ablauf des Oxidationsprozesses in einem Material. Denn jedes Element, sei es Chrom, Titan, Eisen oder Gold, ist einzig in der Anzahl und Verteilung seiner Elektronen.

Mit Hilfe der bei HMI verwendeten Simulationstechnik kann man nun gezielt Werkstoffeigenschaften am Computer testen und Verbesserungen erforschen, noch bevor die Materialien zum Einsatz kommen. Zeit- und ressourcenintensive Methoden von Versuch und Irrtum können umgangen werden zugunsten einer wissenschaftsbasierten Entwicklung, die sich die Vorhersage als primäres Ziel setzt.

Eisenhydroxid, besser bekannt als Rost, frisst sich in einfachen Stahl und liefert die unteren Schichten weiterer Oxidation aus. Am Gold prallt der Luftsauerstoff ab.

Weitere Informationen:  
[www.hmi.uni-bremen.de](http://www.hmi.uni-bremen.de)

### Janina Zimmermann

studierte Physik an den Universitäten Stuttgart und Regensburg und promovierte 2006 bis 2009 in der HMI-Gruppe im Fachbereich Produktionstechnik der Universität Bremen. Für Ihre Dissertation erhielt sie 2010 den Klaus-Tschira-Preis für verständliche Wissenschaft im Fach Physik und den Bremer Studienpreis im Bereich Natur- und Ingenieurwissenschaften. Derzeit arbeitet sie als Projektmanager für europäische Forschungsprojekte am Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg.

