

# Alles fließt ...

Nachwuchsgruppe erforscht das Entstehen von Materialeigenschaften

Von Thomas Voigtmann



An flüssigen Metallen werden physikalische Parameter gemessen, die zur Modellierung der Materialeigenschaften entscheidend sind.

Zwischen Experimenten an Metallschmelzen unter Schwerelosigkeit und einer so alltäglichen Substanz wie Wandfarbe lassen sich überraschenderweise Verbindungen herstellen. Eine Gruppe von Nachwuchswissenschaftlern des DLR-Instituts für Materialphysik im Weltraum in Köln und der Universität Konstanz erforscht die Gemeinsamkeiten. Per Computersimulation und mit Kenntnissen der theoretischen Physik will sie beschreiben, wie Materialien ihre Eigenschaften ausprägen.

Moderne Materialien werden oft aus Schmelzen, dem verflüssigten Zustand bei hohen Temperaturen, hergestellt. Ein bekanntes Beispiel ist das Gießen von Bauteilen, bei denen eine metallische Schmelze in eine Gussform gefüllt wird und dort erstarrt. Bei diesem Erstarrungsvorgang bilden sich Mikrostrukturen, die einen entscheidenden Einfluss auf das fertige Material haben. Im Prinzip lassen sich dessen Eigenschaften je nach Bedarf einstellen, sei es über die Zusammensetzung der Schmelze, sei es, indem die Guss- und Abkühlvorgänge kontrolliert beeinflusst werden. Dieses „Materialdesign“ spielt eine große Rolle bei der Herstellung von Hochleistungsmaterialien für viele moderne Produkte, etwa im Flugzeug- und Fahrzeugbau.

## Verstehen, was die Atome tun

Welche Mechanismen spielen sich nun in solchen komplexen Systemen auf atomarer Ebene ab? Wie bestimmt diese Dynamik im Kleinen die Materialeigenschaften im Großen, bei-

spielsweise die Festigkeit oder Verformbarkeit von Bauteilen? Dies mit Theorie, Experiment und Simulation am Computer zu erforschen, ist das Ziel der Materialphysik.

Im Bereich der Experimente kommt dem DLR dabei eine besondere Rolle zu. Denn gerade bei den metallischen Schmelzen verlangt die Bestimmung grundlegender physikalischer Parameter nach Experimenten unter Welt-raumbedingungen. Im Labor auf der Erde erzeugt die Schwerkraft oft ungewollte, unkontrollierbare Strömungen in der Schmelze und verfälscht das Messergebnis. Um aber den Einfluss von Strömungen auf die Dynamik und auf die Erstarrung der Schmelze zu verstehen, bedarf es systematischer Messungen unter kontrollierten Bedingungen. Diese sind in vielen Fällen erst unter Schwerelosigkeit beziehungsweise unter reduzierter Schwerkraft, der so genannten Mikrogravitation, möglich.

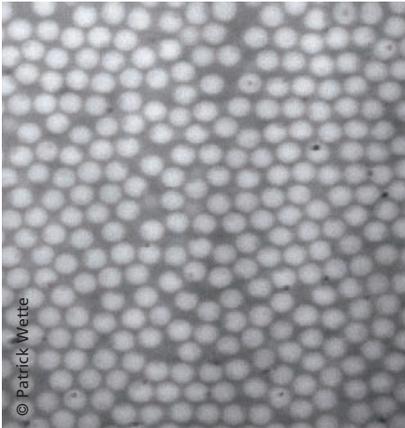
Das DLR-Institut für Materialphysik im Weltraum plant und realisiert solche Experimente zum Beispiel auf Parabelflügen und mit Hilfe von Höhenforschungsraketen. Diese bieten jeweils über einige Sekunden oder

Minuten hinweg nahezu schwerkraftfreie Bedingungen. Als nächster Schritt sollen ähnliche Experimente auch auf der internationalen Raumstation ISS, die jüngst um ein materialwissenschaftliches Labor erweitert wurde, durchgeführt werden.

Diese Mikrogravitationsexperimente müssen, damit sie von möglichst großem Nutzen sind, gezielt ausgewählt und ausgewertet werden. Ein breit angelegtes Programm am Boden begleitet sie. Dazu gehört auch die Simulation am Computer. In der so genannten Molekulardynamik-Simulation nutzt man aus, dass im Prinzip die Dynamik jedes einzelnen Atoms wohlverstanden ist: Bereits die auf Isaac Newton zurückgehenden Bewegungsgleichungen beschreiben deren Bewegung recht gut.

## Simulation von Vielteilcheneffekten

Erst die Wechselwirkung vieler solcher Atome untereinander birgt die große Fülle von noch zu erforschenden Phänomenen. Diese werden im



Mikroskopaufnahmen der Teilchen in einem kolloidalen Modellsystem sollen Aufschluss über reale Metallschmelzen geben.

Computer nachgestellt, mit einigen tausend oder mehr Teilchen, deren gemeinsame Bewegung berechnet – eben simuliert – wird. Bei intelligenter Wahl der Parameter des Modells lassen sich damit bereits viele Aspekte realer Systeme erfassen.

In zahlreichen Fällen hilft nun die Kenntnis der Physik: Wenn die Atome sehr dicht gepackt sind und häufig „zusammenstoßen“, spielen die Details der Wechselwirkung weniger eine Rolle als vielmehr die Tatsache, dass jeder der häufigen Zusammenstöße verhindert, dass sich einzelne Teilchen gegenseitig durchdringen. Allein daraus können die Experten viele „generische“ Aspekte, quasi die Grundbausteine der Materialeigenschaften, verstehen.

## Analog zur weichen kondensierten Materie

Diese Allgemeingültigkeit schafft eine Verbindung zu einem scheinbar gänzlich anderen Gebiet der Physik, dem der weichen kondensierten Materie. Dieses Gebiet beschäftigt

sich mit Systemen, die ebenfalls durch die häufige Wechselwirkung ihrer Grundbausteine charakterisiert sind, in denen aber die Rolle der Atome von größeren Bausteinen übernommen wird.

So genannte „kolloidale Suspensionen“ (kurz Kolloide, nach dem griechischen Wort für Klebstoff) etwa bestehen aus eintausendstel bis zehntausendstel Millimeter großen Teilchen, die in einem Lösungsmittel schweben. Zahlreiche Haushaltsprodukte zeugen von Anwendungen im Alltag: Dispersionswandfarbe zum Beispiel besteht aus kleinen Farbpartikeln in einem Lösungsmittel; der Lippenstift oder die Beschichtung von Papier für Tintenstrahldrucker sind weitere Beispiele.

Wie die Vielfalt der Anwendungen schon zeigt, spielen für die Physik die chemischen Details eine untergeordnete Rolle. Auch hier ist für die Dynamik in weiten Bereichen nur wesentlich, dass die Teilchen dicht gepackt sind und sich gegenseitig quasi im Wege stehen. So kommt es zu der vielleicht überraschenden Analogie zwischen der weichen kondensierten Materie und dichten Schmelzen.

Der Größenunterschied zwischen Atomen und Kolloidteilchen macht sich zwar in numerischen Werten bemerkbar: Wandfarbe ist weicher als eine metallische Legierung – daher der Begriff „weiche“ kondensierte Materie. Das qualitative Verhalten fußt aber auf denselben physikalischen Prinzipien und macht Kolloide zu einfach handhabbaren Modellsystemen. Die Bewegung der einzelnen Kolloidteilchen lässt sich nämlich aufgrund ihrer Größe gut im Mikroskop beobachten; etwas, was für einzelne Atome kaum realisierbar wäre.

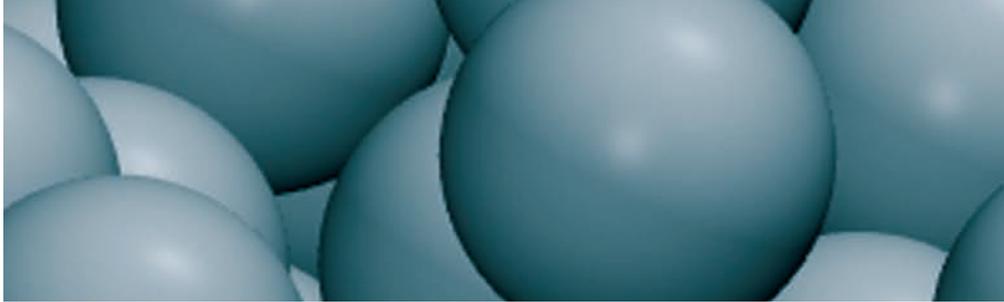
## Im All sinkt nichts zu Boden

Auch auf dem Gebiet der Kolloide können Mikrogravitationsexperimente neue Einsichten in die Dynamik eröffnen. Kleine Dichteunterschiede zwischen dem Lösungsmittel und den Kolloidteilchen können nämlich über lange Zeit dazu führen, dass sich die Kolloide durch die Schwerkraft auf der Erde am Boden des Gefäßes absetzen (wie es Partikel in Farben manchmal tun) und so die Messungen verfälschen. Mikroskopische Untersuchungen an Kolloidsuspensionen auf der Internationalen Raumstation ISS sind deshalb ebenso geplant wie metallphysikalische Experimente.

Das Verhalten von Materie unter externen Strömungen zu studieren, ist die Aufgabe der Rheologie (vom griechischen Wort für „Fließen“). Aus dem Bereich der Kolloide gibt es hier bereits vielfältige Anwendungen und Erfahrungen.

So lässt sich die rheologische Eigenschaft von Zahnpasta durch ihre Zusammensetzung genau so einstellen, dass sie sich leicht aus der Tube drücken lässt, dennoch aber nicht von der Zahnbürste fließt. Ebenso muss Dispersionsfarbe strengen Anforderungen genügen: Sie soll sich gut streichen lassen, also an der Wand leicht genug fließen, darf gleichzeitig aber nicht herabfließen.

Eine spannende Perspektive bietet sich nun mit der Analogie der Kolloide „als große Atome“. Doch dabei stellt sich die Frage: Inwiefern lassen sich Erkenntnisse aus der Rheologie weicher kondensierter Materie wirklich auf den Fluss von metallischen Schmelzen übertragen?



Der Vorteil hierbei: Gerade für die theoretische Physik sind Kolloide einer Beschreibung leichter zugänglich.

Am Computer simulierte Bewegung eines Kolloidteilchens (rot) in einer dichten Flüssigkeit. Benachbarte Teilchen (grau) behindern die Dynamik, daraus entstehen komplexe Materialeigenschaften, die Analogien zu denen von metallischen Schmelzen, aber auch kolloidalen Suspensionen haben.

## Im Gedränge stockt der Fluss

So konnte in Zusammenarbeit mit der University of Edinburgh und der Universität Konstanz gezeigt werden, dass eine dichte kolloidale Flüssigkeit erst fließt, wenn eine bestimmte angelegte Kraft überschritten wird, oberhalb derer sich die Teilchen kollektiv bewegen können. Andererseits kann eine zu starke Strömung dazu führen, dass die Kolloide zu stark zusammengedrängt werden und schließlich gar nicht mehr fließen.

Inwiefern sich solche Ergebnisse aus der Kolloid-Welt auf metallische Schmelzen übertragen lassen, ist nun eine Fragestellung, in deren Lösung auch das Institut für Materialphysik im Weltraum des DLR einbezogen ist. Die Helmholtz-Gemeinschaft fördert seit Beginn 2008 mit einer Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe für fünf Jahre den Austausch zwischen Konstanz und Köln, gewissermaßen als Brücke zwischen materialwissenschaftlichen Experimenten unter Schwerelosigkeit und Materialien, die aus dem Alltag bekannt sind.

### Autor:

Dr. Thomas Voigtmann arbeitet nach Forschungsaufenthalten in Edinburgh und Rom seit letztem Jahr am DLR-Institut für Materialphysik im Weltraum zur Theorie von zähflüssigen Schmelzen und deren Erstarrung. Er leitet dort und an der Universität Konstanz die Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe „Schmelzen unter externen Feldern“.

