

Outstanding Models

Ausgezeichnete Modelle

The dynamics of atoms inside glass and computer simulations that make it possible to project the physical properties of materials are the main focuses of the researchers who were recognized with the Otto Schott Research Award 2007.

Die Dynamik von Atomen in Glas sowie Computersimulationen zur Vorhersage physikalischer Eigenschaften von Materialien sind Arbeitsschwerpunkte der mit dem Otto-Schott-Forschungspreis 2007 prämierten Wissenschaftler.



Dr. Hans-Joachim Konz, member of the SCHOTT Corporate Management Committee (middle), together with the award winners, Professor Himanshu Jain (left) and Professor Walter Kob (right).

Dr. Hans-Joachim Konz, Mitglied der SCHOTT Konzernleitung (Mitte), mit den Preisträgern Professor Himanshu Jain (links) und Professor Walter Kob (rechts).

BERNHARD GERL

At the beginning of July, the two researchers Professor Himanshu Jain and Professor Walter Kob were honored with the Otto Schott Research Award valued at 25,000 euros during the »International Congress of Glass 2007« in Strasbourg. This award is bestowed every other year on an alternating basis with the Carl Zeiss Research Award to recognize exceptional scientific achievements in fundamental research and technology development in the areas of specialized materials, components and systems for applications in optics,

Anfang Juli wurde den beiden Forschern Prof. Dr. Himanshu Jain und Prof. Dr. Walter Kob im Rahmen des »International Congress of Glass 2007« in Straßburg der mit 25.000 Euro dotierte Otto-Schott-Forschungspreis verliehen. Die Auszeichnung wird im jährlichen Wechsel mit dem Carl-Zeiss-Forschungs-

preis für herausragende wissenschaftliche Leistungen in Grundlagenforschung und Technologieentwicklung in den Bereichen Spezialwerkstoffe, Bauteile und Systeme für die Anwendungen in Optik und Elektronik, Solarenergie, Gesundheit und Wohnen verliehen. Beide Forschungspreise werden vom

electronics, solar energy, health and lifestyle. Both research awards are governed by the Donors' Association for the Promotion of Sciences and Humanities in Germany.

„Jellyfish model“ explains the movement of atoms inside glass

Professor Himanshu Jain (Lehigh University, Bethlehem/PA, U.S.A.) has been heading the National Science Foundation's »International Materials Institute for New Functionality in Glass (IMI-NFG)« since 2004. He received the award for his outstanding contributions towards promoting the basic understanding of the dynamics of atoms in glass. He was previously recognized by the international »Zachariasen Award« for exceptional contributions towards glass research.

Professor Jain's research focuses on useful functionalities of glass through fundamental understanding, including unique phenomena caused by light and their application in new devices, corrosion of glass in nuclear environments or glasses for use in photonic applications, such as sensors, infrared optics, waveguides, photo- and nano-lithography, to list a few examples. In the process, he has investigated atomic movement and how it might be influenced by the inherent composition or external factors, such as temperature, electric field, etc. According to existing theories, there are two fundamentally

Stifterverband für die deutsche Wissenschaft verwaltet.

„Jellyfish-Modell“ erklärt Atombewegungen im Glas

Prof. Himanshu Jain (Lehigh University, Bethlehem/PA, USA) leitet seit 2004 das »International Materials Institute for New Functionality in Glass (IMI-NFG)« der NSF (National Science Foundation). Er erhielt die Auszeichnung für herausragende Arbeiten zur Förderung des grundlegenden Verständnisses der Dynamik von Atomen in Glas. Bereits früher wurde er mit dem internationalen »Zachariasen Award« für außergewöhnliche Beiträge zur Glasforschung ausgezeichnet. Professor Jains Forschung konzentriert sich auf das grundlegende Verständnis der Funktionalitäten in Glas, beispielsweise durch Licht hervorgerufene neuartige Phänomene und deren Anwendung in neuen

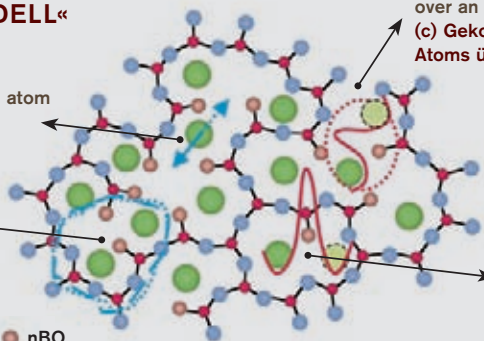
Geräten, Glaskorrosion in nuklearen Umgebungen oder Gläser für photo-nische Anwendungen wie Sensoren, Infrarot-Optiken, Wellenleiter, Foto- und Nanolithographie. Dabei untersuchte er die Atombewegungen und wie sie von der Zusammensetzung des Glases oder äußeren Faktoren, beispielsweise Temperatur, elektrischen Feldern usw. beeinflusst werden. In bisher existierenden Theorien gibt es zwei grundlegende Arten von Atombewegungen bei Umgebungstemperatur: die Schwingungen eines Atoms um eine Ruhelage und die Diffusion, in der ein Atom oder Ion über eine größere Strecke in der Glasstruktur herumwandert. Eine wichtige Eigenschaft dieser Ionen-diffusion ist, dass sie mit fallender Temperatur exponentiell abnimmt. Bei etwa 200 Kelvin müsste sie vollständig eingefroren sein. Doch Kernspinexperimente zeigten, dass es neben der Diffusion eine weitere >

»JELLYFISH MODEL«
»JELLYFISH-MODELL«

(a) Vibrations of an alkali atom
(a) Schwingungen eines Alkaliatoms

(d) Wiggling of jellyfish
(d) Schlängeln eines Jellyfish

● Na ● Si ● BO ● nBO



(c) Coupled hop of a single atom over an energy barrier
(c) Gekoppelter Sprung eines einzelnen Atoms über eine Energiebarriere

(b) Diffusive hop of single atom over an energy barrier
(b) Sprung eines einzelnen Atoms durch Diffusion über eine Energiebarriere

Atomic movements in glass, schematically shown for a sodium silicate glass as an example (Si: red; sodium: green; bridging oxygen (BO): purple; non-bridging oxygen (nBO): brown): (a) Vibrations of a sodium ion about its site, observed at $\sim 10^{12}$ - 10^{13} Hz, independent of temperature (b) Diffusion of a sodium ion via hopping over an energy barrier, observed at \geq room temperature and low frequencies, (c) Coupled hop of a single sodium ion, observed at \geq room temperature and moderately high frequencies (kHz-MHz), and (d) "Jellyfish" type wiggling motion of a group of atoms including both the network modifier and former atoms, observed at low temperatures (< 200 K) and low/moderate frequencies as well as at room temperature and microwave frequencies.

Atombewegungen in Glas; schematisch gezeigt am Beispiel eines Natrium-Silicat-Glases (Silizium: rot, Natrium: grün, Brückensauerstoff (BO): lila, Trennstellensauerstoff (nBO): braun). (a) Schwingungen eines Natriumions auf seinem Platz, beobachtet bei $\sim 10^{12}$ - 10^{13} Hz, unabhängig von der Temperatur. (b) Diffusion eines Natriumions durch Hüpfen über eine Energiebarriere, beobachtet bei Raumtemperatur und kleinen Frequenzen. (c) Gekoppelter Sprung eines einzelnen Natriumions, beobachtet bei Temperaturen größer als Raumtemperatur und etwas höheren Frequenzen (kHz-MHz). (d) Quallenartige Schlangelbewegung einer Gruppe von Atomen, die sowohl die Netzwerk-wandler als auch die anderen Atome umfasst, beobachtet sowohl bei niedrigen Temperaturen (unter 200 K) und geringen bis etwas höheren Frequenzen als auch bei Raumtemperatur und Mikrowellen-Frequenzen.



Photo | Foto: Private/Private

different types of atom movements at ambient temperature: vibration of an atom about its mean position, and long range diffusion wherein a given atom may wander around in the glass structure. An important characteristic of this ion diffusion is that it slows down exponentially with decreasing temperature. If a glass is cooled below ~ 200 K, ion hopping should effectively freeze. However, nuclear spin relaxation experiments showed that there must be more to ion movement in glass than just vibrations and diffusion. Studies established the basic characteristics of this atomic movement; however its physical description remained a mystery until a clue dawned on Professor Jain during a boat ride he took to the Isle of Skye, off Scotland's west coast. Watching the hundreds of jellyfish in the Sea of the Hebrides, he noted that they were not swimming, but rather wiggling without moving very far. The following description of the dynamics of atoms at low temperatures emerged as a result: The "jellyfish" movements are from a group of atoms which collectively move between different configurations, much like the wiggling of a jellyfish in the ocean. These fluctuations are much slower than typical atom vibrations and depend on the material's local and medium range structure. The "jellyfish" movements also occur at room temperature, but become significant only at much higher frequencies. Thus the dynamic properties of glass such as dielectric loss at microwave frequencies are directly predicted from the low frequency studies at low temperatures.

Prof. Kob's main research field includes the dynamics of simple liquids, glasses and polymers with aid from computer simulations.

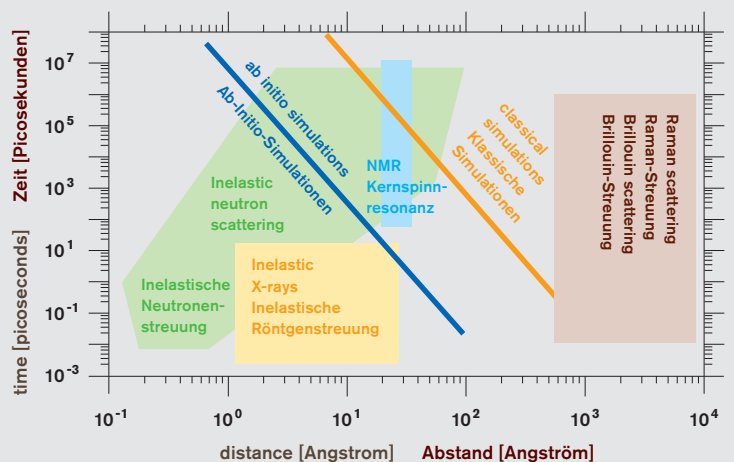
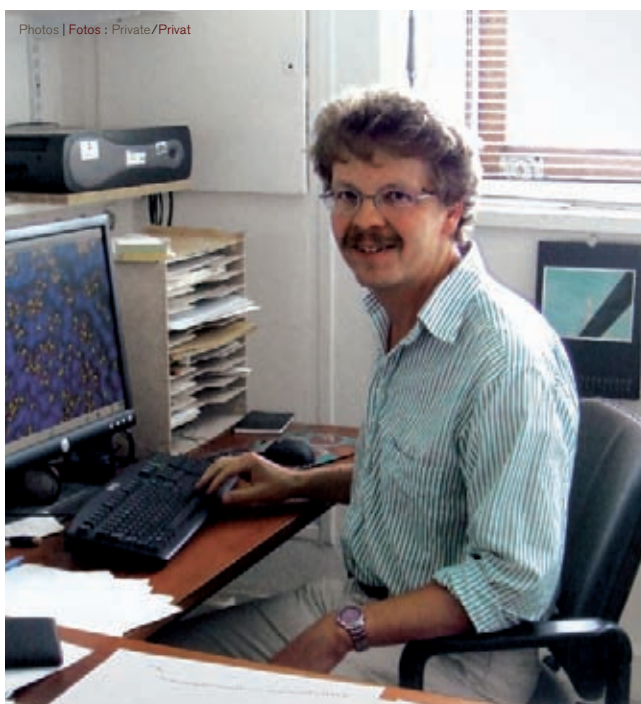
Prof. Kobs Forschungsschwerpunkt ist die Untersuchung einfacher Flüssigkeiten, Gläser und Polymere mit Hilfe von Computersimulationen.

Möglichkeit der Ionenwanderung in Glas geben muss. Durch intensive Forschungen konnten die grundlegenden Eigenschaften dieser Atombewegung charakterisiert werden, doch die zugrundeliegende Physik blieb ungeklärt, bis Professor Jain mit einem Boot zur Isle of Skye an Schottlands Westküste fuhr. Im Meer der Hebriden sah er Hunderte von Quallen (engl. „jellyfish“) im Wasser und beobachtete, dass sie nicht schwammen, sondern sich schlängelten (engl. „wiggle“), ohne dabei sehr weit voran zu kommen. So entstand die „Jellyfish“-Theorie der Dynamik von Atomen bei tiefen Temperaturen: Die „Jellyfish“ Bewegungen rühren von einer kollektiven Bewegung einer ganzen Gruppen von Atomen zwischen verschiedenen Konfigurationen her, ganz ähnlich dem Schlängeln einer Qualle im Meer. Sie sind viel langsamer als typische Atomschwingungen und hängen von der Struktur des Materials in der direkten oder nahen Umgebung ab. Die „Jellyfish“ Bewegungen existieren auch bei Raumtemperatur, werden aber erst signifikant bei höheren Frequen-

zen. Deshalb können die dynamischen Eigenschaften von Glas – wie beispielsweise der dielektrische Verlust bei Mikrowellenfrequenzen – unmittelbar durch die Untersuchung niedriger Frequenzen bei tiefen Temperaturen vorhergesagt werden.

Simulationen zur Dynamik unterkühlter Flüssigkeiten

Der gebürtige Schweizer Dr. Walter Kob ist als Professor am Institut für Physik der Université de Montpellier 2 tätig. Seit 1995 ist er Direktor des Laboratoire des Colloïdes, Verres et Nanomatériaux. Er erhielt den Otto-Schott-Preis für seine herausragenden Arbeiten zur Erforschung statischer und dynamischer Eigenschaften von Gläsern und unterkühlten Flüssigkeiten mittels Computersimulationen. Seine Forschungsgebiete umfassen unter anderem die Dynamik unterkühlter Flüssigkeiten und die Natur der Glasumwandlung, die Struktur und Dynamik von Gelen, Natriumsilikat-Schmelzen und -Gläsern oder die Alterung von gläsernen Systemen. Der Schwerpunkt seiner Forschung



Time and length scales that are accessible by various experimental techniques (colored regions) and scales that are accessible by means of classical and ab initio simulations, region below the orange and blue line, respectively.

Zeit- und Längenskalen, welche mit verschiedenen experimentellen Techniken zugänglich sind (eingefärbt) sowie Skalen, welche mit Computersimulationen erforscht werden: klassische Simulationen unterhalb der orangen, ab initio Simulationen unterhalb der blauen Linie.

Simulations show dynamics of supercooled fluids

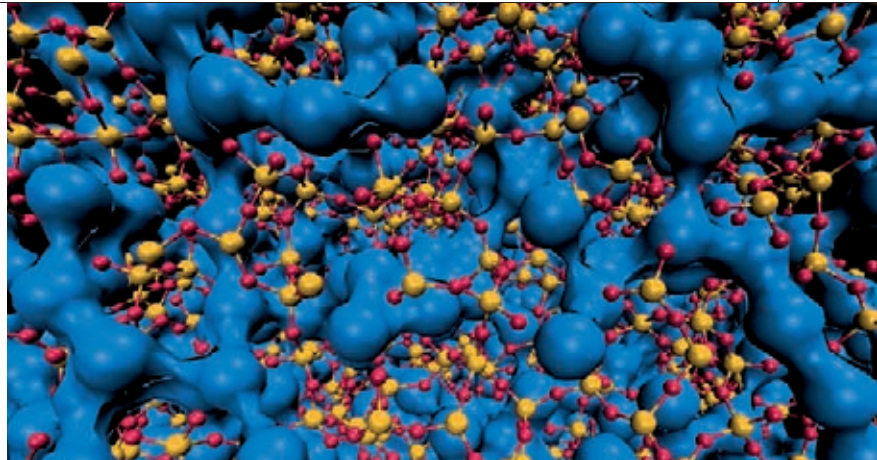
Born in Switzerland, Professor Walter Kob is full professor at the Institute for Physics at the Université Montpellier 2. He has been serving as Director of the Laboratoire des Colloïdes, Verres et Nanomatériaux, since 1995. Professor Kob received the Otto Schott Award for his outstanding work in researching the static and dynamic properties of glasses and supercooled liquids with the help of computer simulations.

The research fields of Professor Kob include the dynamics of supercooled liquids and the nature of glass transformation, the structure and dynamics of gels, sodium silicate melts and glasses and aging of systems made of glass. His research focuses mainly on investigating the static and dynamic properties of disordered systems, such as simple liquids, textured glasses, Potts glasses or polymers, with aid from computer simulations and other statistical mechanics methods. These computer simulations were developed in the last decade in order to obtain insight into the microscopic properties of materials.

This is possible, because all of the properties of the material can be calculated, once the type of the atoms and their positions are known. The key point is that each atom interacts with all of the other atoms. Once the nature of the forces (chemical species) and the relative distance of the atoms are known, they can be used to calculate how each one of the particles is moving in space and time. If one waits long enough, the movement of the particles will be the same as in a real system, hence the simulation can be used to calculate the properties of the real material. To calculate the forces between the particles, one has two possibilities: Within so-called "ab initio" calculations, the forces between the atoms are calculated directly from the positions of the nuclei of the atoms and their electronic structure. Thus, no empirical parameter or experimental data enters the calculation and this method enables the simulation for all material.

In the »classical force fields« approach, one postulates the interactions between the atoms and then uses these postulated forces to solve Newton's equations of motion. The precise form of these forces is determined from experimental data or from ab initio simulations. For this reason, this approach is not independent from experiments or more sophisticated simulations, but is approximately 10,000 times faster. Much larger systems can be simulated in the same time, as a result. Computer simulations are not yet a "perfect" tool, because the properties of glasses depend on the cooling rate with which the glass has been produced and in simulations these rates are many orders of magnitude higher than the rates used in real life. Nevertheless, in the near future, simulations will be part of the standard tools of research in any material science laboratory.

< | klaus.bange@schott.com



Snapshot of a sodium-trisilicate glass as obtained from a molecular dynamics computer simulation. The yellow and red spheres are the silicon and oxygen atoms, respectively (not drawn to scale). The blue spheres are the sodium atoms.

Aufnahme eines Natriumtrisilikatglases, welches mittels einer Computersimulation erzeugt wurde. Die gelben und roten Kugeln stellen die Silizium- und Sauerstoffatome dar (nicht maßstabgetreu), die blauen sind die Natriumatome.

gilt der Untersuchung der statischen und dynamischen Eigenschaften ungeordneter Systeme, wie beispielsweise einfache Flüssigkeiten, strukturelle Gläser, Potts-Gläser oder Polymere mit Hilfe von Computersimulationen und anderen statistischen Methoden. Diese Computersimulationen wurden im letzten Jahrzehnt entwickelt, um die mikroskopischen Eigenschaften von Materialien zu erforschen. Dies ist möglich, da alle physikalischen Eigenschaften eines Materials berechnet werden können, sobald die Atomsorte und die Positionen aller Teilchen bekannt sind.

Ausgangspunkt der Simulationen ist die elementare Tatsache, dass alle Atome eines Körpers miteinander wechselwirken. Sobald man die Natur dieser Kräfte (abhängig von der Atomsorte) und den relativen Abstand der Teilchen zueinander kennt, kann beides dazu benutzt werden, um zu berechnen, wie sich jedes Teilchen in Raum und Zeit bewegt. Bei entsprechend langer Wartezeit stimmten die Bewegungen der Teilchen in der Simulation mit denen eines realen Systems überein, und die physikalischen Eigenschaften des echten Materials lassen sich bestimmen. Um die Kräfte zwischen den Teilchen zu berechnen, gibt es zwei Möglichkeiten: In der sogenannten

„Ab-initio-Berechnung“ werden die Kräfte zwischen den Atomen direkt aus den Positionen der Atomkerne und der Elektronenstruktur der Atome berechnet. Es gehen also keine empirischen Parameter oder experimentelle Daten in die Berechnung ein. Deshalb kann jedes Material mit dieser Technik simuliert werden.

Im klassischen Feldtheorie-Ansatz postuliert man die nahen und weitreichenden Wechselwirkungen zwischen den Atomen und benutzt diese Postulate für die Simulation. Die genaue Form dieser Kräfte wird experimentell oder mit "Ab-initio-Simulationen" bestimmt. Deshalb ist dieser Ansatz von Experimenten oder komplexeren Simulationen abhängig. Sein großer Vorteil: Er ist 10.000 mal schneller, deshalb können weit größere Systeme in derselben Zeit simuliert werden. Noch sind Computersimulationen nicht das „perfekte Werkzeug“, denn die Eigenschaften von Glas hängen von der Abkühlrate bei der Herstellung ab. Doch in Simulationen sind diese Kühlraten viele Größenordnungen höher als in der Wirklichkeit. Trotzdem werden Simulationen in naher Zukunft ein Standardwerkzeug in der Forschung und vielen wissenschaftlichen Laboratorien sein.

< | klaus.bange@schott.com