

Den Otto Schott Forschungspreis 2001 erhielten Professor Dr. Reinhard Conrath (RWTH Aachen) sowie das russische Team Dr. Boris Anatoljevich Shakhmatkin und Dr. Natalia Mikhailovna Vedishcheva (Russische Akademie der Wissenschaften, St. Petersburg) für herausragende wissenschaftliche Leistungen.

# Meilensteine für Glaswissenschaft



**M**it dem alle zwei Jahre verliehenen Preis will der Technologiekonzern Schott eine breitere Öffentlichkeit auf neue wissenschaftliche Leistungen auf dem Gebiet der Glaswissenschaften und Glaskeramiken in Grundlagenforschung und Applikation aufmerksam machen und Kenntnisse über die Bedeutung der Glaswissenschaft für den technischen Fortschritt fördern. Die prämierten Arbeiten sind ein Spiegelbild des internationalen hohen Niveaus im Bereich Glaswissenschaften. Prof. Conrath wurde ausgezeichnet „für sein äußerst vielseitiges, auf strukturellen Beziehungen von Phasengleichgewichten basierendes Konzept zur thermodynamischen Modellierung von Oxidschmelzen und -gläsern, und für die mittels dieses Konzepts erzielten bahnbrechenden Ergebnisse bei der Berechnung von physikalischen und chemischen Eigenschaften – insbesondere der chemischen Resistenz – von technischen Mehrkomponentengläsern.“

Das russische Team erhielt den Otto Schott Forschungspreis „für die Entwicklung eines exakten, auf Verbindungsgleichgewichten basierenden thermodynamischen Modells von Oxidschmelzen und -gläsern, und für die beeindruckenden Ergebnisse, die durch den Einsatz dieses Modells bei der Berechnung von physikalischen Eigenschaften von binären glasbildenden Systemen erzielt werden konnten.“

Die Verleihung des mit insgesamt 25.000 Euro dotierten Preises fand im Rahmen eines internationalen Glaswissenschaftskongresses am 1. Juli 2001 in Edinburgh (Schottland) statt ■

## Genauigkeit unter Beweis gestellt

**Fragen an Prof. Dr. Gerd Müller, Leiter des Fraunhofer-Instituts für Silicatiforschung in Würzburg, Mitglied des Kuratoriums des Otto Schott Forschungspreises.**

**Wie zuverlässig arbeiten die neuen Modelle auf der Basis rein thermodynamischer Daten?**

Während des letzten Jahrzehntes haben beide Forschergruppen beeindruckende und nach Meinung des Kuratoriums überzeugende Belege dafür geliefert, dass ihre Modelle funktionieren und zuverlässige Ergebnisse erbringen – in vielen Fällen mit dem gleichen Genauigkeitsgrad wie die experimentellen Daten.

**Welche Charakteristika können mit der neuen Methode ermittelt werden?**

Sowohl Eigenschaften wie Volumen, Wärmeausdehnung oder Wärmekapazität, die sich direkt auf thermodynamische Funktionen und ihre Ableitungen beziehen, als auch Transporteigenschaften wie Diffusion, Ionenleitfähigkeit oder

sogar eine so komplexe Größe wie die Viskosität.

**Ist ein praktischer Nutzen absehbar?**

Das Otto Schott Kuratorium ist überzeugt, dass sich die thermodynamischen Modelle in der Praxis als äußerst nützlich erweisen werden. Deshalb befürwortet und fördert Schott Glas die enge Zusammenarbeit aller Preisträger.

**Was konkret heißt das?**

Wir hoffen, dass bald Software-Pakete für die Entwicklung und Optimierung von vielkomponentigen technischen Gläsern zur Verfügung stehen. Zum jetzigen Zeitpunkt errechnen die Modelle die Eigenschaften aus den Zusammensetzungen. Mit Hilfe geeigneter Algorithmen und leistungsfähiger Computer sollte in absehbarer Zeit das umgekehrte Problem, nämlich die Vorausberechnung geeigneter Zusammensetzungen zur Erzeugung der jeweils gewünschten Eigenschaften direkt lösbar sein ■

## Von der Strukturanalyse zur Glastechnologie

Prof. Dr. Reinhard Conrads



Die Preisverleihung 2001 fand im Rahmen eines internationalen Kongresses in Edinburgh statt: (von links nach rechts) Kurator Prof. Dr. Gerd Müller, Dr. Boris Anatoljevich Shakhmatkin, Dr. Natalia Mikhailovna Vedishcheva, Prof. Reinhard Conrads sowie Schott-Vorstand Dr. Udo Ungeheuer.

**W**elcher prinzipielle Zusammenhang besteht zwischen der chemischen Zusammensetzung eines Glases und seinen Eigenschaften? Diese Frage hat Wissenschaftler und Technologen seit Beginn der systematischen Glasforschung im 19. Jahrhundert intensiv beschäftigt. Otto Schott erkannte früh die Notwendigkeit, die Frage von einem sehr weit gefassten wissenschaftlichen Konzept her anzugehen:

*„Ein allgemein planmäßiges, die ganze anorganische Natur umfassendes Studium der Schmelzerscheinungen ist noch nicht versucht worden; es fehlt uns daher auf diesem Gebiete noch vieles, ehe wir dazu gelangt sein werden, mit Sicherheit auf Grund fester Gesetze die Reaktionen bestimmen zu können, wie dies in wässrigen Lösungsmitteln bei gewöhnlicher Temperatur der Fall ist.“*

Otto Schott, 1880, zitiert nach: W. Vogel, Glaschemie (Springer Verlag, Berlin 1992)

Die Natur des Glases, seine Transparenz, Homogenität und Isotropie signalisiert zwar besondere Einfachheit – aber das Gegenteil ist der Fall. Während das Anliegen von Otto Schott im Bereich der metallischen Werkstoffe heute weitgehend umgesetzt ist, hat sich das Glas als „Sonderzustand der Materie“ einer grundlegenden Quantifizierung immer wieder entzogen. Bei der Ableitung von Glaseigenschaften aus der Zusammensetzung behilft man sich mit der intensiven Sammlung experimenteller Daten, man verknüpft, wertet statistisch aus und inter- bzw. extrapoliert dann ins unbekannte Terrain.

### Thermodynamik als neue Methode

In den letzten Jahren zeichnete sich eine neue, grundlegende Strategie ab. Es wurde darauf verzichtet, die Eigenschaften des Glases vor allem über seine

Struktur zu verstehen – ein Weg, der trotz hohen Forschungsaufwandes bisher nur zu erklärenden, qualitativen Aussagen geführt hat. Stattdessen wurden die Methoden der Thermodynamik als komplementäre Sichtweise herangezogen und konsequent auf die Gegebenheiten bei vielkomponentigen Gläsern übertragen. Das ist zwar weniger anschaulich als eine strukturelle Deutung, liefert dafür aber quantitative Aussagen. Das Glas wird über seine Energiedifferenz zu seinem kristallinen Gegenstück (oder Referenzsystem) gleicher chemischer Zusammensetzung beschrieben.

### Komplexe Abläufe analysierbar

Dieses Referenzsystem aufzuspüren ist für einkomponentige Gläser (z. B. Kieselglas und Cristobalit) einfach; mit Hilfe geochemischer Methoden gelingt es auch für Gläser mit vielen Komponenten. Damit ist im Prinzip die Nutzung der umfangreichen thermodynamischen Datenbanken und Tabellenwerke endlich auch für die Glastechnologie erschlossen. Schon jetzt lassen sich etliche Glaseigenschaften, etwa die chemische Beständigkeit, per Desk Top modellieren, noch bevor die erste Versuchsschmelze und der erste Korrosionstest angesetzt werden. Von einer systematischen Weiterentwicklung des Verfahrens darf man erwarten, dass zeit- und kostenintensive Arbeiten nach dem Prinzip von „Trial and Error“ (Versuch und Irrtum) deutlich reduziert werden können.

Die neue Modellierungsstrategie ist aber nicht allein auf die Vorhersage von Glaseigenschaften beschränkt. Auch komplexe Reaktionsabläufe, an denen ein Glas oder seine Schmelze als Reaktionspartner beteiligt ist, sind nun einer quantitativen Behandlung zugänglich. Technologisch relevante Beispiele sind die Bestimmung des Energiebedarfs eines einschmelzenden Glasgemenges oder die Verdampfung einzelner Komponenten einer Schmelze unter der Wirkung einer Ofenatmosphäre ■

## Modell liefert zuverlässige Ergebnisse

Dr. Boris A. Shakhmatkin  
 Dr. Natalia M. Vedishcheva  
 Institut für Silicatchemie der russischen Akademie der Wissenschaften  
 St. Petersburg, Russland

**G**las ist ein sehr alter Werkstoff. Die ersten Glasprodukte entstanden bereits 3000 Jahre v. Chr. im alten Ägypten. Seit Jahrtausenden experimentieren Menschen mit Glas, um bestimmte Eigenschaften und Effekte zu erzielen. Heute verfügen wir über eine immense Palette von Kunst-, Gebrauchs- und Industrieglas und über eine große Anzahl von Methoden und Verfahren, um die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Gläsern gezielt zu analysieren und zu modifizieren.

### Vorteilhafte Alternative

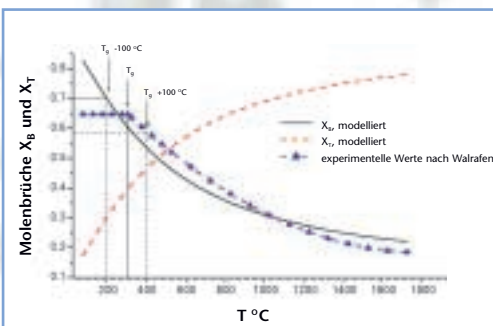
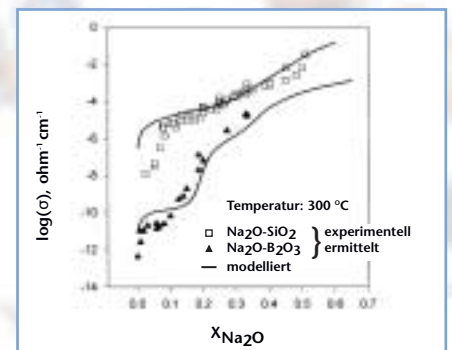
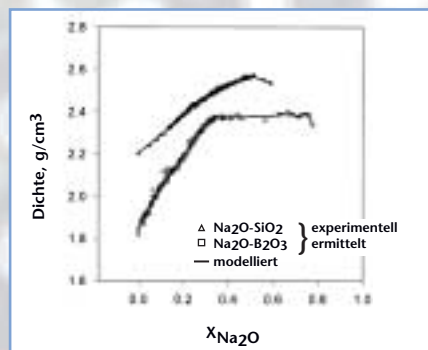
Die Eigenschaften von glasbildenden Oxidsystemen, auf denen viele unserer Industriegläser basieren, sind mittlerweile experimentell ausgiebig erforscht. Hochentwickelte Verfahren wie MAS-NMR, EPR und EXAFS ermöglichen eine genaue Analyse der Glasstruktur. Traditionell werden Veränderungen in der Struktur als Ursache für veränderte Glaseigenschaften angesehen. Weder ein besseres Verständnis der Beziehung zwischen Struktur und Eigenschaften eines bestimmten Systems noch detaillierte Kenntnisse über die Eigenschaften selbst ermöglichen jedoch, a priori vorauszusagen, wie dieses System auf die Hinzufügung neuer Komponenten reagieren wird. Um diese Frage zu beantworten, muss das jeweilige System in einer neuen Versuchsserie oder Versuchsreihe analysiert werden – und das ist, insbesondere im Fall von vielkomponentigen Gläsern, ein aufwendiges, zeitraubendes Verfahren. Die Möglichkeit, das Verhalten glasbildender Systeme zu modellieren, ist deshalb eine sehr vorteilhafte Alternative.

Mit Hilfe eines rein thermodynamischen Modellierverfahrens, das auf der Vorstellung assoziierter Lösungen basiert, kann eine Vielzahl von Glaseigenschaften auf der Basis eines einheitlichen Ansatzes vorausgesagt werden, und zwar für extrem große Konzentrations- und Temperaturbereiche, ohne Verwendung freier Fit-Parameter und mit einem guten Genauigkeitsgrad. Das Verfahren ist im Prinzip anwendbar auf Systeme mit einer beliebigen Anzahl von Komponenten von unterschiedlicher chemischer Beschaffenheit (basische und saure Oxide). Auf diesem Weg werden zunächst die Gleichgewichtskonzentrationen aller in einem Glas befindlichen Spezies als Funktion der Glaszusammensetzung, der Temperatur und des Drucks bestimmt. Damit lassen sich folgende Eigenschaften vorhersagen: Dichte, Brechzahl, Wärmekapazität, elektrische Leitfähigkeit, die Diffusionskoeffizienten von Ionen, die Redoxgleichgewichte, die chemische Beständigkeit sowie die Kristallisationsneigung.

### Erfolgreiche Anwendung

Theoretisch können noch viele andere physikalische Eigenschaften mit Hilfe des Modells assoziierter Lösungen berechnet werden. So wurden beispielsweise Gleichungen für die Kompressibilitäts- und Wärmeausdehnungskoeffizienten und für die magnetischen und mechanischen Eigenschaften von Gläsern abgeleitet.

Außer den Glaseigenschaften können auch Strukturmerkmale, zum Beispiel die Verteilung der strukturellen Grundeinheiten, als eine Funktion von Glaszusammensetzung und Temperatur modelliert werden. Die gute Übereinstimmung zwischen den modellierten und den experimentell ermittelten Abhängigkeiten ist ein Hinweis darauf, dass das thermodynamische Modell erfolgreich angewendet werden kann, um den Einfluss der Temperatur auf die Glasstruktur abzuschätzen ■



Beispiel für die Temperaturverteilung von B<sub>3</sub>O<sub>6</sub>-Boroxolringen (XB) und B<sub>3</sub>O<sub>3</sub>-Dreiecken (XT) in glasiem Boroxid (T<sub>g</sub> ist die Glasübergangstemperatur; experimentelle Werte nach G.E. Walrafen et al., J. Chem. Phys. 72 (1980), S. 113).

Errechnete Abhängigkeiten für die Dichte und die elektrische Leitfähigkeit in Natriumsilicat- und Natriumboratgläsern, zusammen mit den entsprechenden experimentellen Daten (nach O.V. Mazurin et al., Properties of Glasses and Glass-Forming Liquids, Nauka, Leningrad 1975). Die Genauigkeit der Modellierungen entspricht in etwa der Genauigkeit der experimentellen Messungen.