

In de natuurkunde is het ontstaan van glas nog steeds een groot raadsel. Liesbeth Janssen wil dit oplossen



Na een koude winternacht vormen zich ijskristallen op een glazen ruit

Liesbeth Janssen werd als jonge natuurkundige gegrepen door glas. Niet door de kristallen schoonheid, maar door het raadsel. Want natuurkundigen weten niet goed wat glas is. Nog niet.

[Interview](#) Liesbeth Janssen door: Elleke Bal 13 december 2020 Trouw

Wie het werk van Liesbeth Janssen leert kennen, kan niet anders dan zich erover verbazen. De achteloosheid waarmee we een slok water uit een drinkglas nemen, door het keukenraam turen, of een bos tulpen in een glazen vaas zetten. Natuurlijk, we weten nog zoveel niet over hoe de wereld in elkaar zit. Maar een drinkglas leek tot nog toe gewoon een drinkglas, en een raam een raam. 'Gewoon' is glas echter niet te noemen.

Hoewel de oude Egyptenaren al glas konden maken, stelt glasvorming tot op de dag van vandaag de meest geleerde natuurkundigen voor een raadsel. “Het diepste en interessantste onopgeloste probleem in de vaste-stoftheorie is waarschijnlijk de aard van glas en de glasovergang”, schreef de Nobelprijswinnende natuurkundige Philip W. Anderson in 1995.

Liesbeth Janssen is sinds 2012 vastberaden om dat probleem op te lossen. Acht jaar geleden – ze zat in het laatste jaar van haar promotieonderzoek in Nijmegen – las ze een wetenschappelijk artikel over glasvorming. Niet haar vakgebied, dat was scheikunde, maar ze was meteen overstag.

Terwijl ze promoveerde op ultrakoude gassen en onderzocht hoe moleculair gas afgekoeld kon worden tot extreem lage temperaturen, liet het glasprobleem haar al niet meer los. Ze mailde een van de auteurs van het artikel dat ze had gelezen, professor David Reichman van de universiteit van Columbia in New York. Haar boodschap in die mail: ik wil na mijn promotie dat probleem oplossen.

Ze wist Reichman te overtuigen en vertrok naar New York voor haar postdoc-onderzoek. Die overgang was niet zo makkelijk, blikte ze terug. “Ik was opgeleid tot scheikundige en moest ineens helemaal opnieuw beginnen in de theoretische natuurkunde.”

Glasvorming staat bekend als een taai natuurkundig thema. Vele wetenschappers voor haar hebben hun tanden erop stukgebeten. Sommigen zeggen het probleem zelfs opgelost te hebben. “Maar geen van die theorieën is compleet, exact of universeel geaccepteerd”, zegt Janssen.

Glas is een toestand

Wat glas zo ingewikkeld maakt, is dat het strikt genomen een fase is. We kennen glas allereerst als een zandachtig materiaal. Ruiten en drinkglazen zijn voornamelijk gemaakt van siliciumdioxide: silicium- en zuurstofatomen. Maar glas is een veel breder begrip; het is ook een toestand waarin een materiaal zich kan bevinden. En dat is een merkwaardig verhaal.

Om te begrijpen waarom die glasfase voor natuurkundigen een mysterie is, is het handig even terug te denken aan de schoolboeken. Daarin kwamen de bekendste fases van onder meer water aan bod: vaste stof, vloeibaar en gas. Oftewel: ijs, vloeibaar water en waterdamp. In al die fases gedragen moleculen en atomen zich anders. Hoe hoger de temperatuur, hoe vrijer die deeltjes zich kunnen bewegen.

In de vaste ijsfase stellen atomen en moleculen zich ordelijk in een rooster op in rijtjes, zij aan zij. In damp dansen ze juist als een stelletje hyperactieve feestgangers in een iets te grote feestzaal door elkaar heen, ze hebben veel ruimte om te bewegen. De vloeibare fase zit daar tussenin. De deeltjes bewegen wel, maar de feestzaal is te klein; het is hutje mutje en ze botsen tegen elkaar aan.

Het vreemde aan glas is dat het een vaste stof is, als ijs. Maar de atomaire structuur lijkt helemaal niet te passen bij die materiaaleigenschap, want die structuur is wanordelijk. Dat fenomeen is tot nu toe onbegrepen. Onder de microscoop lijkt glas vloeibaar. Maar wie een drinkglas vasthoudt, weet dat dat niet zo is.

Janssen: "Vaste stoffen zijn vaak kristallijn. De atomen zijn mooi geordend op een kristalrooster. Maar door glas weten we dus dat er vaste stoffen zijn waarbij je die kristallijne structuur niet hebt. Dat heet ook wel een amorge, of wanordelijke vaste stof. En die glasfase is niet beperkt tot één type materiaal. Die kun je in ieder materiaal creëren."

Ze vertelt over de relatief nieuwe ontdekking dat ook menselijke, levende cellen kunnen schakelen tussen een meer vloeibare en een vaste vorm. Die ontdekking geeft wel aan dat het beter begrijpen van de glasfase grote betekenis kan hebben. De glasfase is overal, zelfs in ons lichaam.

Glas roept diepe fundamentele vragen op over hoe onze wereld zich ordent. Daarom is dit zo'n competitief wetenschappelijk vakgebied.

Gestolde wanorde

De zoektocht van Janssen begon in 2012 in New York. Vanaf 2015 werkte ze verder aan de Heinrich Heine universiteit in Düsseldorf en sinds 2017 zit ze aan de TU Eindhoven. Van onderzoeksfinancier NWO kreeg ze onlangs 800.000 euro om een nieuwe glastheorie te formuleren. Op de vraag of ze daaraan in een lab werkt, moet ze lachen: "Ik zit altijd achter een bureau. We werken aan de ontwikkeling van een betere theorie, en dat begint met pen en papier: het ontwikkelen van de juiste vergelijkingen. En om die vergelijkingen op te lossen, zetten we computers aan het werk."

Om te begrijpen hoe de glasfase ontstaat, wil Janssen zo dicht mogelijk bij het punt komen waarop glas van een vloeibare in vaste stof verandert. In water begrijpen we dat proces op atomair niveau, vertelt Janssen. Als het afkoelt tot onder de nul graden, dan verandert het van een wanordelijke

vloeistof naar geordend kristal. “Dat verklaart waarom het ijs wordt.” Maar bij glasvorming ontbreekt die verklaring, omdat de deeltjes wanordelijk blijven. Toch is er wel iets dat verandert in het glas wanneer dat een vaste vorm aanneemt, en dat is mate van viscositeit: de stroperigheid van een vloeistof. Naarmate je dichterbij het punt van de overgang naar glas komt, zegt Janssen, wordt het een veel stroperiger materiaal. En uiteindelijk wordt het zo stroperig dat het een vaste stof wordt. In amorfe vaste stoffen is de viscositeit minstens een miljard keer groter dan in water.

Hoe komt het nu dat die stroperigheid zo toeneemt, terwijl de atomaire structuur in dezelfde wanorde blijft? Dat is de vraag, zegt Janssen. Ook wil ze weten wat nu maakt dat atomen in glas in het ene geval vrolijk rond kunnen bewegen en zich dan ineens op een bepaalde positie hechten op een vaste plek. En dus heeft ze een actieplan. En dat actieplan is: rekenen. En nog eens rekenen.

Janssen wil de overgang van vloeistof naar glas voorspellen op basis van de meest elementaire wetten van de natuurkunde, zoals de bewegingswetten van Newton. Daarin is ze niet de eerste. De Duitse natuurkundige Wolfgang Götze deed in de jaren tachtig een eerste poging. Maar die bleek toch niet de hele glasovergang te voorspellen, ontdekten anderen al gauw.

Onze intuïtie faalt

Net als Götze wil Janssen weten hoe individuele atomen zich tijdens de overgang naar glas tot elkaar verhouden. Correleren, heet het officieel, als het om de statistische samenhang tussen de atomen gaat. Zoals Janssen het uitlegt: “Gegeven dat één deeltje hier is, wat betekent dat dan voor de waarschijnlijkheid dat we een tweede deeltje op een andere plek vinden?”

Alleen, nu komt het, het gaat dan niet over de samenhang tussen twee of tien atomen, maar om een onvoorstelbaar groot aantal deeltjes. Janssen: “We zitten dus met een stelsel van oneindig veel gekoppelde vergelijkingen.”

Wat Janssen vanaf 2012 voor het eerst deed, was een klein deel van die gekoppelde vergelijkingen proberen op te lossen. “Dat werkte aardig, maar het was nog lang niet exact”, zegt ze daarover. En daarom wil ze het deze keer beter doen, met behulp van machine learning. Algoritmes in zelflerende computers moeten haar helpen te bepalen welke spelers in de netwerken van deeltjes de allerbelangrijkste zijn om te begrijpen.

“We proberen het al veertig jaar door alleen de naaste burens van ieder atoom mee te nemen”, zegt Janssen. “Maar dat lost ons probleem niet op. Dus we moeten anders gaan denken. Kennelijk heeft atoom 1 toch met atoom 2 een

heel stuk verderop contact. Maar wij begrijpen niet waarom. Onze intuïtie faalt. Maar die algoritmes kijken puur naar de data en die proberen daar verborgen correlaties uit te halen.” Omdat algoritmes steeds slimmer worden gemaakt, is Janssen enthousiast over de nieuwe mogelijkheden.

Stel nu dat het haar over een paar jaar inderdaad lukt om de mysterieuze overgang naar glas te doorgronden, wat heeft de wereld daar dan aan? Die kennis kan gebruikt worden op vele manieren, aldus Janssen. En daarvoor hoeft de theorie nog niet perfect te zijn. Ook een betere benadering ervan kan al helpen. Om maar eens met plastic te beginnen. Veel plastics, polymeren, zijn moeilijk te recyclen. En voor een duurzame wereld is dat een urgent probleem. “Je wilt plastic tijdelijk kunnen omsmelten, het meer vloeibaar maken en dan in een nieuwe vorm gieten”, aldus Janssen. “Dan wil je in feite een overgang van glas naar vloeistof kunnen maken. Daar zou onze kennis bij kunnen helpen.”

In het lichaam

En dan is er nog zo’n wonderlijke toepassing. Want ook de cellen in ons lichaam kennen een soort glasovergang, vertelt Janssen. “Cellen kunnen soms heel veel bewegen, net als in een vloeistof. En soms komen ze vast te zitten op een plek en komen ze daar niet meer vanaf, als in glas. Die verschillen in celbeweging blijken consequenties te hebben voor onze gezondheid.”

Zo lijkt het erop dat cellen in de luchtwegen van astma-patiënten beweeglijker zijn dan dezelfde cellen van gezonde mensen. De vraag is: is het misschien mogelijk om aan de hand van die cellen te voorspellen wanneer astma erger wordt, of wanneer het ontstaat?

Janssen werkt al samen in een project met biologen en natuurkundigen om het gedrag van tumorcellen beter te voorspellen. Kanker begint vaak met een ingekapselde, primaire tumor. Daarin zitten cellen vast op één plek, als een glas. Maar bij uitzaaiing komt er een deel van deze cellen los van de tumor. “Die gaan aan de wandel in het lichaam. Die cellen gaan naar een meer vloeibare fase waarbij ze veel beweeglijker worden en loskomen.” Waar een goede theorie van glasvorming mogelijk bij kan helpen, is de vraag of je aan een foto van cellen kunt zien of die op het punt van uitzaaien staan.

Hoop om dichterbij het antwoord te komen

Hoe groot is de kans dat Janssen over, zeg een, twee jaar een theorie heeft die precies verklaart hoe glas ontstaat? “Dat lijkt me erg ambitieus”, lacht ze. “Het is een reuzeproject, om die theorie te ontwikkelen, al die vergelijkingen

uit te werken. En dan nog die computers trainen om die vergelijkingen door te rekenen en dan die antwoorden weer te integreren in de theorie. Daar gaat allemaal veel tijd in zitten.”

Toch is ze hoopvol dat ze dichterbij het antwoord kan komen. Dat is met name omdat algoritmes beter zijn geworden en computers grotere rekenkracht hebben gekregen. “Er is geen betere tijd om dan nu, om dit te gaan doen.”



Wie is Liesbeth Janssen?

Liesbeth Janssen (1983) is theoretisch natuurkundige en universitair hoofddocent aan de TU Eindhoven.

Ze promoveerde in 2012 (cum laude) in de theoretische scheikunde aan de Radboud Universiteit Nijmegen, maar ontwikkelde zich verder tot theoretisch natuurkundige om zich in de glastheorie te kunnen verdiepen. Dat deed ze onder meer met onderzoek aan de universiteit van Columbia in New York en de Heinrich Heine universiteit in Düsseldorf.

Dit jaar ontving ze van onderzoeksfinancier NWO een zogenoemde Vidi-beurs van 800.000 euro. Ze is lid van De Jonge Akademie van de KNAW, voor jonge topwetenschappers.