



Kristallografie in *De molecularisering van het wereldbeeld;* Bijvoet, een resterende vraag

Dezer dagen verschijnt deel 2 van mijn boek *De molecularisering van het wereldbeeld* bij Uitgeverij Verloren (Hilversum; ISBN set 90-6550-731-0). Het betreft de bekorte Nederlandstalige bewerking van het boek *L'Histoire du concept de « molécule »* (Parijs: Springer-Verlag France, 2001), dat ik als (oud-) 'Akademie-onderzoeker' heb kunnen schrijven.

De kristallografie heeft een belangrijke rol gespeeld in de geschiedenis van de molecuultheorie, zo heb al eerder in het *NVK* kunnen melden (1). In deel 1 van mijn boek wordt de theorie van de *integrerende moleculen* van René-Juste Haüy kort behandeld tegen de achtergrond van de anno 1800 algemeen aanvaarde molecuultheorie. De periode 1800-1912/1913 komt in deel 2 uitgebreid aan de orde in een eigen hoofdstuk. Daar wordt eerst een indruk gegeven van de natuurhistorische achtergronden, zoals de verhouding tot de biologie als wetenschap van de levende wezens. Rond 1800 vergeleek men wel de *amorganische* moleculen van de kristallograaf met de *organische* moleculen (de latere *cellen*) van de bioloog, is mij gebleken. Mitscherlich's ontdekking van het verschijnsel *isomorfie* wordt geanalyseerd, waarna de ontwikkeling in de opvattingen omtrent de uitwendige symmetrie aan de orde komt, eerst in de Franse moleculaire traditie van Haüy, Delafosse en Bravais, daarna in de Duits-Engelse, meer geometrische, die van Weiss, Neumann, Whewell en Miller. Neumanns zone-theorie en zijn projectietechnieken worden besproken aan de hand van het mineraal *vesuvianiet*. De deductie van alle principieel mogelijke kristalvormen werd een concrete uitdaging, zo heb ik kunnen constateren. De zeven *kristalsystemen* en hun gecentreerde versies leidden tot de 32 *klassen*. De introductie van de *groepentheorie* door de Franse wiskundige Jordan en de Duitse kristallograaf Sohncke, een leerling van Neumann, markeerde een belangrijk moment. Haar bijdragen aan de theoretische kristallografie, die van de *punthroosters* en hun symmetrie-elementen, komen dan aan bod. De status van de *punten* bleek een verhaal apart: waren kristallen molecuulroosters, eventueel gesuperponeerde molecuulroosters, of moest men ze opvatten als gesuperponeerde *atoomroosters*? Aanvankelijk zag men alles exclusief moleculair: ook hydraten waren, dacht men, *zuivere stoffen*, waarvan het kristalwater verdisconteerd moest worden in de molecuulformule. De gemakkelijke verwijdering en inbouw van dat

kristalwater suggereerden echter later het voorkomen van gesuperponeerde molecuulroosters, die van het zout en die van het water. Iemand als Paul Heinrich von Groth trok daarom, al in 1905 in zijn *Physikalische Krystallographie*, de lijn consequent door: voor hem was elk kristal een atomenstapeling, elke atoomsoort met zijn eigen rooster. Een kristallijne verbinding was dus voor hem een superpositie van evenveel atoomroosters als dat er chemische elementen in voorkwamen. Een volgende paragraaf is gewijd aan de vondsten van Laue, Friedrich en Knipping, enerzijds, en die van vader en zoon Bragg, anderzijds; Debye en Scherrer worden natuurlijk niet vergeten. Het molecuulrooster werd van regel tot betrekkelijke uitzondering, zo is de teneur van de afsluitende paragraaf.

In andere hoofdstukken komt de brugfunctie van de kristallografie herhaaldelijk ter sprake. Zo, bij voorbeeld, bij de bespreking van de isolatie van het tabaksmozaïekvirus door Stanley in 1935. Was het werkelijk *kristallijn*, of niet? Zo ja, dan was een virus een normale chemische stof, al bleef de vermenigvuldiging raadselachtig. Een ander geval betreft de *groepentheorie* die door de theoretisch fysici, onder aanvoering van Landau (vanaf ca.1935), werd geadopteerd om een principiële discrete fysica te funderen. Bij de behandeling van de DNA-structuuropheldering door Watson en Crick speelden verder de Röntgenogrammen van (Wilkins en) Franklin een belangrijke rol; ook hier was de kristalliniteit een concrete vraag, gezien het belang van de vochtigheidsgraad. Twee foto's uit *Acta Crystallographica* van 1953 zijn opgenomen als illustratie. In paragraaf 9.7 wordt de absolute configuratie-bepaling van Bijvoet c.s. besproken. Hiervoor had Bijvoet de Nobelprijs voor Natuur- of Scheikunde kunnen krijgen, dunkt me, als hij zijn vondst tenminste voldoende had geëxploiteerd.

Op weinig terreinen komen esthetiek en natuurwetenschap zo nauw verweven voor als in de kristallografie. Het zal de lezers van het *Nieuwsblad* daarom plezieren, zo stel ik mij voor, dat ik het werk van de grafisch kunstenaar Maurits Cornelis Escher (1898-1972) in mijn studie heb kunnen betrekken. Escher werd wel gekarakteriseerd als een 'kristallograaf van het platte vlak'. In zijn prachtige *Vlakverdelingen* bracht hij verschillende symmetrie-elementen tot uitdrukking. De aimabele Caroline MacGillavry (1904-1993), heel lang de *doyenne* van de Nederlandse kristallografie en kenster bij uitstek van Eschers oeuvre (2), heeft mij daarover veel geleerd. Met haar steun heb ik in 1988 tijdens een congres van de *KNCV* een tentoonstelling kunnen inrichten onder de titel 'Stof en vlak: Beekman en Escher' (3). De aanleiding was de 400ste geboortedag van Isaac Beekman

(1588-1637), de uitvinder van de molecuultheorie. De Zeeuwse natuurfilosoof stelde zich, rond 1620, 3D-stoffen voor als stapelingen van onwaarneembaar kleine stofspecifieke 3D-deeltjes, die hij *homogenea* noemde (het woord *molecuul* bestond nog niet). Hij vergeleek deze met levende wezens: elk deeltje, elk *homogeneum*, werd geacht te bestaan uit bepaalde aantallen van vier atoomsoorten in een bepaalde ruimtelijke ordening. Wat Beeckman bedacht in 3D, deed Escher in 2D: zijn vlakverdelingen vulde hij, zoals bekend, bij voorkeur met 2D levende wezens. Eén van zijn *Vlakverdelingen*, getiteld *Vissen* (E94; 1955), siert het omslag van mijn boek.

De Nederlandse kristallografie gaat voor een belangrijk deel terug op Johannes Martin Bijvoet (1892-1980). Jo Bijvoet was in 1919 onder Andreas Smits afgestudeerd als anorganische chemicus. Hij werd toen belast met de opzet van een vakgroep Röntgenanalyse. In 1939 werd hij in Utrecht benoemd; een jaar tevoren was in samenwerking met Kolkmeijer, zijn rechterhand, en MacGillavry, zijn leerling, het werk *Röntgenanalyse van kristallen* verschenen. Eind jaren veertig deed Bijvoet de ontdekking die bekend zou worden als de ‘absolute configuratie-bepaling’. Bij de behandeling van Bijvoets werkwijze stuitte ik op een ‘laatste’ vraag, die ik bij dezen graag aan de lezers van het *Nieuwsblad* voorleg. Zoals wellicht bekend, werkte Bijvoet met een Röntgen-apparaat dat bedacht was door Karl Weissenberg. Dit levert een puntenpatroon op een kokervormige film die langs het roterende kristal wordt getrokken. Omdat er nogal wat Laue-diagrammen een rol spelen in mijn verhaal (ZnS; DNA-A en DNA-B) heb ik gezocht naar zo’n diagram van NaRb-tartraat, Bijvoets modelstof. Voor zover ik heb kunnen nagaan is er echter nooit een gemaakt. In het proefschrift van zijn leerling Peerdeman (1955)(4) wordt wél aannemelijk gemaakt dat de beide tartraten Laue-diagrammen zouden geven die elkaars spiegelbeeld zijn. Anno 1950 was Laue-achtige apparatuur nog in gebruik, getuige de bovengenoemde foto’s van (Wilkins en) Franklin. Franklin en Gosling vermelden dat Wilkins een ‘Unicam single-crystal camera’ had gebruikt in combinatie met een ‘Raymax tube’; zelf gebruikten zij een ‘Ehrenberg-Spear fine-focus X-ray tube’ (bouwjaar 1951) samen met een ‘North-American Philips micro-camera’ (5). Zo’n Laue-diagram had dus ook van de beide NaRb-tartraten gemaakt kunnen worden. Misschien is dat ook wel gebeurd, al heb ik er geen spoor van teruggevonden. Om kort te gaan: het lijkt me interessant te zien hoe de Laue-diagrammen van de beide NaRb-tartraten er in het echt uitzien en hoe daaruit eventueel de absolute configuratie kan worden afgeleid. Mijn ‘laatste’ vraag luidt daarom: beschikt



iemand misschien over (antieke ?) apparatuur waarmee bedoelde Laue-diagrammen alsnog kunnen worden opgenomen ? Zo ja, dan zal ik proberen geschikte éénkristallen van beide tartraten te vinden dan wel te bereiden. Als iemand suggesties heeft houd ik mij overigens ook op dit punt aanbevolen (6).

In mijn boek komen een reeks historisch belangrijke, nagedane experimenten aan de orde: onder andere Newtons optische *experimentum crucis* (1672) en Stahls gebruik van konings-water voor het oplossen van goud (1700). De reconstructie van een bolektriseermachine uit 1705/1706 mag hier ook genoemd worden (7). De opname van een Laue-diagram van beide NaRb-tartraten zie ik in dit verband als een nieuwe uitdaging.

Graag dank ik bij dezen Aafje Looijenga-Vos, Dick Feil en Henk Schenk voor de bijzondere welwillendheid waarmee zij mijn werk volgen.

- a) *Nieuwsblad* 3 (9) 30-33 (1992). Zie ook: *Nieuwsblad* 8 (18) 3-7 (1997).
- b) C.H. MacGillavry, *Symmetry aspects of M. C. Escher's periodic drawings*, Utrecht: Oosthoek, 1965.
- c) Zie ook: H.H. Kubbinga, 'Stof en vlak: Beeckman en Escher', in: *De Gids* 152 (4) 290-293 (1989).
- d) A.F. Peerdeman, *Determination of the absolute configuration of optically active compounds by means of X-rays*, Universiteit Utrecht, 1955, p.8.
- e) E.R. Franklin en R.G. Gosling, 'molecular configuration in sodiumthymonucleate', *Acta Crystallographica* 6 673-677 (1953).
- f) Henk.Kubbinga@12move.nl
- g) Zie: www.kubbinga.tk

Henk Kubbinga (RuG).