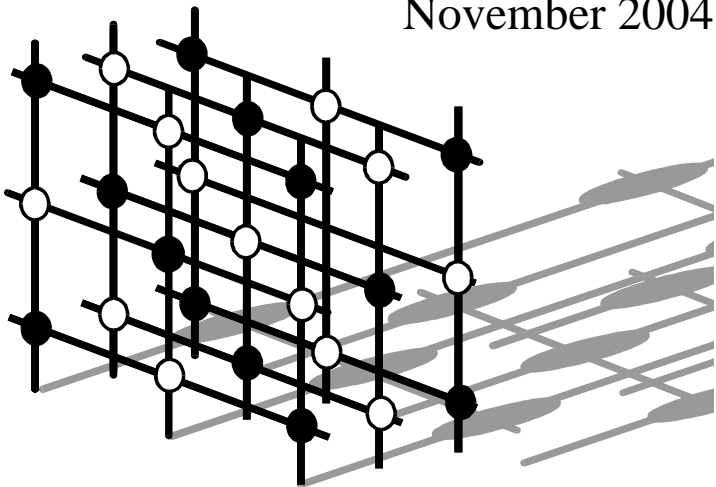




Nieuwsblad voor Kristallografen

Jaargang 14, nummer 29
November 2004





N.V.K.

Het Nieuwsblad Voor Kristallografen is een uitgave van de Nederlandse Vereniging voor Kristallografie.

Jaargang 14

Nummer 29

November 2004

Redactie:

Paul Verwer, Dirk De Ridder, Jasper Plaisier, Willem Vermin

Vormgeving: Jasper Plaisier

Kopij voor nummer 30 opsturen vóór 20 februari 2005 naar

E-mail: plaisier@chem.leidenuniv.nl

Postadres:

Jasper Plaisier

Anthony Fokkerweg 97

2316 ZG Leiden

tel: 071-5274414 of 071-5147987

Voor snelle berichtgeving naar de leden van de NVK gebruikte men het E-mail adres: nvk@science.uva.nl. Aanmeldingen of wijzigingen doorgeven voor de nvk-lijst: e-mail naar nvkbeheer@science.uva.nl.

De redactie kan niet verantwoordelijk worden gesteld voor de inhoud van ingezonden stukken.



Inhoudsopgave

Redactioneel	4
Van de voorzitter	5
" 2π or not 2π , that is the question"	7
De Belgische Kristalgroeicompetitie	10
De molecularisering van het wereldbeeld	14
Jaarvergadering NVK	18
Persoonlijke herinnering aan Prof. Dr. C. Romers	20
Wat is het verstrooiingspatroon van jong bloed?	22
De AIO-School "Kristallografie" 2003	24
Verslag van de Werkgroep PoederDiffractie over het NVK- verenigingsjaar 2002/2003	26



Redactioneel

Het is al weer geruime tijd geleden dat het vorige nummer van het Nieuwsblad voor Kristallografen verscheen. Hoewel ons plan was met een zekere regelmaat, zeg 3-4 maal per jaar een nieuwsblad uit te brengen, bleek dat in de praktijk niet altijd mogelijk of zinvol. Daar staat tegenover dat we nu ook echt weer een blad met volop inhoud kunnen brengen! Toch blijft ons streven het blad met een grotere regelmaat uit te brengen.

Er zijn vanuit de redactie een aantal ontwikkelingen te melden.

Ten eerste dat Willem Vermin, een van onze redacteuren van het eerste uur, besloten heeft te stoppen met zijn redactionele werk: zijn werkzaamheden zijn inmiddels ver verwijderd geraakt van de kristallografie, zodat de link met het vakgebied inmiddels wel erg verwaterd was. We willen Willem bij deze hartelijk danken voor zijn inzet en enthousiasme waarmee hij jarenlang een van de stuwende krachten achter het blad is geweest!

Daarnaast is besloten het blad voortaan elektronisch uit te brengen. Dit betekent een belangrijke en noodzakelijke verlichting van het werk van de redactie, omdat het drukken en versturen van het blad een kostbare en tijdrovende onderneming is.

Het vertrek van Willem Vermin betekent ook dat de redactie, nog meer dan al het geval was, versterking zou kunnen gebruiken. Natuurlijk hebt u eigenlijk geen tijd om zoiets er nog bij te doen, maar dat hebben de huidige redacteuren ook niet, en ook zij laten zich daar niet door weerhouden! U ziet, u past op deze manier uitstekend in ons team, dus stuur een mailtje naar de redactie, of schiet ons aan op de jaarvergadering; we kunnen uw inzet goed gebruiken!

Paul Verwer



Van de voorzitter.

Bij onze komende jaarvergadering op 5 november 2004 zal ik, na twee volledige termijnen van vier jaar te hebben 'gediend', het voorzitterschap van onze vereniging overdragen aan een opvolger. Het bestuur heeft Dr René de Gelder bereid gevonden zich kandidaat te stellen voor deze functie. We stellen U daarmee een kandidaat voor die uitstekend past in het profiel dat het bestuur voor ogen stond. Een wetenschapper die actief in het vakgebied werkzaam is zowel in onderzoek als in onderwijs. Een 'jongere', waarmee ik een kandidaat bedoel die een generatie jonger is als de generatie van de oprichters, is goed voor het imago van de kristallografie. Het vakgebied kristallografie heeft in de universitaire gemeenschap niet meer het aanzien van zo'n veertig jaar geleden. Een emeritus als voorzitter maakt dat niet beter.

Laat ik wat uitwijden over dat aanzien. Lang geleden was de kristallografie een eenduidige discipline. Vorm, structuur en eigenschappen van kristallen werden bestudeerd door 'Kristallografen'. Er waren aan alle universiteiten leerstoelen in dat vakgebied. Naarmate men ontdekte dat de kristallijne fase zich in veel meer materialen voordeed dan men aanvankelijk kon bevroeden werden de kristallografische methoden essentieel voor iedereen die zich met de (vaste-) stof bezig hield en dat werden er in de loop der jaren steeds meer. Kristallografie als "het beschrijven van kristallen" is op zichzelf geen doel meer. Ook niet als met die 'beschrijving' de inwendige structuur op atomaire schaal bedoeld wordt. De structurele ordening van atomen in een materiaal of in een molecuul is veelal bepalend voor het gedrag ervan. Het gevolg van deze ontwikkeling is dat door zeer veel onderzoekers 'kristallografie' bedreven wordt zonder dat men een gedegen kennis van de achtergronden van de gebruikte methoden heeft. Die kennis, in zeg maar een eeuw door kristallografen ontwikkeld, pik je niet in een achternamiddag op. Een tweede gevolg is dat de status van de kristallografie als wetenschappelijke discipline gestaag minder wordt. Met als gevolg dat het aantal onderzoeksgroepen waarin kristallografie het centrale thema is ook gestaag minder wordt.

De NVK heeft naar mijn idee op deze beide punten een functie. Eén is het bevorderen van het onderlinge contact tussen onderzoekers die zich met kristallografische methoden bezig houden. Daarin spelen onze secties een rol en ook het symposium bij onze jaarbijeenkomst. Daar met name kan men zien wat er



in andere takken van onderzoek kristallografisch gebeurt. Aan de andere kant speelt de NVK een rol door juist die jonge onderzoekers te helpen die de nodige kristallografische kennis in hun opleiding hebben gemist: de AIO-School.

Deze gang van zaken is simpelweg het lot van een wetenschapsgebied dat multidisciplinair is geworden. Het vergaat wiskundigen ook zo. Het is hen vaak een doorn in het oog als ze zien hoe de wiskunde bedreven wordt door "leken". Ook het (zuivere-)wiskunde-onderwijs kalft snel af, zeker nu de computer met allerlei geavanceerde programmatuur, wiskundige oplossingen uitspuwt, die soms kant noch wal raken.

Voor ons moge dit een schrale troost zijn, maar het lijkt mij noodzakelijk dat we niet gaan navelstaren op het feit dat de "zuivere kristallografie" steeds minder de aandacht krijgt. We moeten enerzijds de samenhang tussen al de verschillende 'voorkomens' van kristallografie koesteren en bevorderen. Anderzijds moeten we ons naar buiten richten en overal waar we hulp kunnen bieden bij het repareren of liever nog bij het voorkomen van verkeerd gebruik van de kristallografie ons best doen. En bedenk dat er veel plezier te beleven valt in al die interdisciplinaire onderzoeksgebieden. Uiteindelijk heb ikzelf ook het grootste deel van mijn actieve wetenschappelijke leven buiten of in de randgebieden van de kristallografie doorgebracht en ik zie daar met voldoening op terug.

Fokke Tuinstra



" 2π or not 2π , that is the question"

Zeker een halve eeuw lang bestaat over de reciproke ruimte en het reciproke tralie een controverse tussen structuuronderzoekers en vaste stof onderzoekers. Studenten worden geconfronteerd met twee verschillende formuleringen. Het is meer dan een minteken en een triviale schaalfactor 2π die soms wel en dan weer niet optreedt. Ernstiger is dat er discrepanties in uitkomsten, fout gebruik van literatuurgegevens en zinloze, emotioneel geladen, discussies uit voortkomen. In diepste wezen berust de discrepantie, evident zichtbaar in leer- en handboeken (zie b.v. Kittel (2000) en Cowley (1995)), op een verschil in uitgangspunten.

Structuuronderzoek berust op diffractie, dat is de optica (James, 1967). Daarin wordt een, in de richting van vector s , lopende harmonische golf geschreven als:

$$A \cdot \exp[2\pi i (vt - \mathbf{r} \cdot \mathbf{s})] = A \exp i(\omega t - \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}). \quad (1)$$

Daarbij is $|s| = 1/\lambda$ en $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$. Op elke plaats \mathbf{r} manifesteert zich een trilling waarvan de fasehoek (in het complexe vlak), zoals gebruikelijk, met de tijd toeneemt. In de richting van $+\mathbf{s}$ (of $+\mathbf{k}$) neemt, op elk tijdstip, de fase met toenemende \mathbf{r} af, zoals gebruikelijk bij een lopende golf in de \mathbf{s} (of \mathbf{k}) richting, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{s}$ is de fotonimpuls. Bij interferentie van monochromatische golven laten we de tijdfactor weg:

$$A(\mathbf{r}) = A_0 \cdot \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}), \quad \{\text{of } A_0 \cdot \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\} \quad (2)$$

De vaste stoftheorie gaat uit van het Blochtheorema om golffuncties in een kristal te beschrijven:

$$\psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (3)$$

Het Blochtheorema (Kittel, 2000) berust op het feit dat van een reeks van kristalrooster-translaties de volgorde mag worden verwisseld. Uit de wiskundige groepentheorie volgt dan het Blochtheorema (de translatiegroep is Abels). Met de vectoren \mathbf{k} worden de quantumtoestanden gekarakteriseerd; \mathbf{k} is een "kwantumgetal". Er is vanuit dit standpunt geen enkele aanleiding om een factor 2π in de exponent toe te voegen, alhoewel die in de gezaghebbende literatuur rond 1940 (Seitz, 1940; Brillouin, 1946) aanvankelijk wel werd geïntroduceerd. Construeer je uit de formule (3) een lopende golf dan wordt die:

$$A \exp i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \omega t) = A \exp[2\pi i (\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - vt)] \quad (4)$$

Hier neemt in de richting van \mathbf{k} de fase toe en op elke plaats manifesteert zich een trilling waarvan de fase met de tijd afneemt!

Het verschil.

Bij toepassen van (2) raakt een golf die een langere weg afgelegd in fase achter. In de formulering van (3) raakt de fase van zo'n golf juist vóór. In de optica en in de diffractie, waar golven met fase en al, worden opgeteld, is dit onnatuurlijk.

Voor een diffractie-experiment, waar de intensiteit evenredig is met de structuurfactor maal zijn toegevoegd complexe, zou dit niets uitmaken, behalve wanneer complexe atoomvormfactoren in het spel zijn. Die voldoen, in de literatuur die onder auspiciën van de IUCr wordt uitgegeven (b.v. International Tables), aan de 'optische conventie' (1). Gebruik van deze gegevens in de formulering (3) of (4), met het plusteken in de exponent, leidt dan tot onjuiste structuurfactoren en berekende intensiteiten.

Bij gebruik van fouriertransformaties (de amplitude na diffractie is evenredig met de fouriertransform van het verstrooiend vermogen) leidt de formulering (2) er toe dat in de fourierintegraal het plusteken staat bij 'heentransformeren', dat is náár de reciproke S- of K-ruimte toe en het minteken bij 'terugtransformeren':

Hierin is $\mathbf{S} = (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$, met $|\mathbf{s}| = |\mathbf{s}_0| = 1/\lambda$, \mathbf{s}_0 heeft de richting van de invallende en

$$A(\mathbf{S}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{r} \cdot \mathbf{S}) d\mathbf{r}; \rho(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{S}) \exp(-2\pi i \mathbf{r} \cdot \mathbf{S}) d\mathbf{S}$$

\mathbf{s} de richting van de gediffracteerde bundel. Zowel bij heen- als terugtransformeren komt de factor 2π alleen in de exponent voor. De operatie is 'symmetrisch'.

Gebruikt men (3) en (4) dan is het teken juist andersom. Moet men nu ook letten een voorfactor:

Bij gebruik van \mathbf{k} , is heen en terugtransformeren niet symmetrisch. Bij terugtrans-

$$A(\mathbf{K}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i \mathbf{r} \cdot \mathbf{K}) d\mathbf{r}; \rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A(\mathbf{K}) \exp(i \mathbf{r} \cdot \mathbf{K}) d\mathbf{K}$$

formeren moet een voorfactor $1/(2\pi)^3$ worden toegevoegd.

2π als schaalfactor.

De metriek in de K- en S-ruimten verschillen: $|\mathbf{K}| = 2\pi|\mathbf{S}| = 2\pi/\lambda$. De K-ruimte is met een factor 2π opgerekt t.o.v. de S-ruimte. De inwendige producten van een vector \mathbf{r} uit de directe ruimte met een vector in de S- of in de K-ruimte verschillen een factor 2π . In beide ruimten geldt dat, voor elastische verstrooiing, de uiteinden van de vectoren \mathbf{S} en respectievelijk \mathbf{K} , uitgezet vanuit de oorsprong op een bol (van Ewald) moeten liggen. Immers $|\mathbf{s}| = |\mathbf{s}_0|$ en respectievelijk $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$. De straal van de bol van Ewald heeft in de S-ruimte de grootte $1/\lambda$ in de K-ruimte $2\pi/\lambda$.



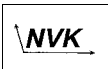
In het bijzondere geval van een ideaal kristal gelden voor diffractie de Laue condities. Zij stellen dat alleen op punten van het reciproke tralie $\mathbf{t}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ de verstrooiingsamplitude van nul verschilt. Daarvoor geldt in de K-ruimte $\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{c}^* = 2\pi$; $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^* = 0$ etc. en in de S-ruimte $\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{c}^* = 1$; $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^* = 0$ etc.¹

Als je met golffuncties, golfgetallen en -vectoren werkt ligt de K-ruimte voor de hand. Dat leidt tot echter tot de niet-symmetrische fouriertransform en fouten bij gebruik van structuurgegevens. Werk je met optica en meetkundige voorstellingen (kristalberekeningen), dan ligt de S-ruimte voor de hand.

Literatuur: Seitz, F., *The Modern Theory of Solids*, McGraw-Hill (1940);
James, R.W., *The optical Principles of the Diffraction of X-Rays*, Bell & Sons LTD, (1967)
Brillouin, L., *Wave Propagation in Periodic Structures*, McGraw-Hill (1946)
Cowley, J.M., *Diffraction Physics*, Elsevier (1995)
Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley (2000)

Fokke Tuinstra, September. 2004

1 In oudere literatuur vindt men soms een variant waarin de producten $\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = \lambda$, etc. De straal van de bol van Ewald is dan 1 en het reciproke tralie rekt en krimpt met λ .



De Belgische Kristalgroeicompetitie

Aan de Belgische Kristalgroeicompetitie, het voorbije schooljaar voor de vierde maal georganiseerd door het Nationaal Comité voor Kristallografie, namen 113 scholen deel. Onder begeleiding van de leraar wetenschappen trachtten leerlingen gedurende een periode van vier weken het mooiste kristal van kaliumdiwaterstoffsfaat KDP te groeien.

De Belgische kristalgroeiwedstrijd, een initiatief van het Nationaal Comité voor Kristallografie, kadert in de promotie van natuurwetenschappen bij leerlingen in het secundair onderwijs en geniet tevens de steun van de Koninklijke Vlaamse Academie van België voor Wetenschappen en Kunsten. Kristallen zijn inderdaad fascinerend voor jong en oud, en kristallen groeien is een boeiend experiment dat gemakkelijk te integreren is in de lessen fysica of chemie. Door het wedstrijdelement wordt getracht een extra stimulans te geven aan de leerlingen, die meestal in groepjes deelnemen. Bedoeling is in een periode van vier weken, tussen de Krokus- en Paasvakantie, een zo groot en perfect mogelijk enkelkristal te groeien (dus geen aggregaat van kristallen) van een opgelegde verbinding. De competitie wordt ondersteund door een website die meer informatie geeft over kristallen, kristallografie en ook een praktische handleiding voor het groeien van enkelkristallen. De leerlingen worden begeleid door hun leerkracht, maar kunnen bij problemen ook beroep doen op een lokale coördinator in hun provincie.

Hoe deelnemen?

De te kristalliseren verbinding wordt slechts bekend gemaakt rond Kerstmis en rond deze periode starten ook de inschrijvingen via de website van de Kristalgroeicompetitie. Inschrijven gebeurt door de leerkracht en per school wordt slechts één inschrijving voorzien. Het product wordt net voor de Krokusvakantie naar de geregistreerde scholen verzonden. De hoeveelheid is slechts voldoende voor enkele groepen of klassen. Uit ervaring weten we dat de leerkrachten meestal verkiezen in groepsverband te werken, of met de meest gemotiveerde leerlingen. Ideaal gezien moet de kristalgroei immers dagelijks gevolgd worden. Door in groepjes te werken kan men dit via een beurtrol realiseren, bijvoorbeeld onder de middagpauze. De bekomen kristallen worden net voor de Paasvakantie verzonden naar de lokale coördinator. Er wordt aangeraden voor het verzenden reeds een selectie te maken in de school. De beoordelingscriteria van de jury kunnen via de website opgevraagd worden, en zijn gebaseerd op het gewicht, de vorm en



helderheid van het ingezonden kristal. Dankzij de sponsering van de firma Acros Organics, die instaat voor de levering van het te kristalliseren product, is de wedstrijd tevens volledig gratis.

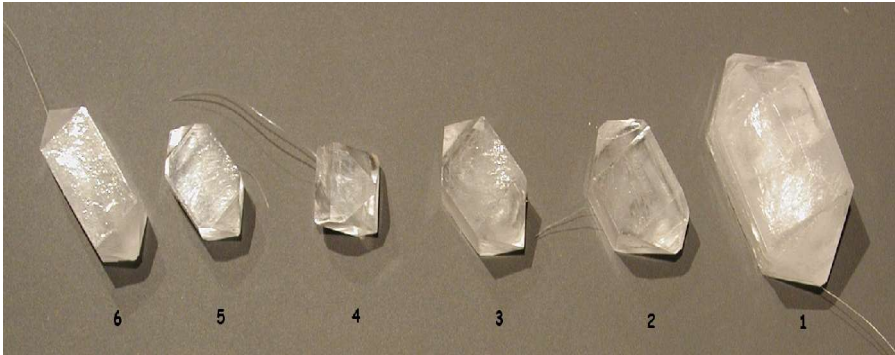
Laureaten editie 2004

Voor de vierde editie van deze wedstrijd werd kaliumdiwaterstoffosfaat (meestal afgekort tot KDP, KH_2PO_4) als te kristalliseren materiaal gekozen. KDP wordt door zijn ferroelektrische eigenschappen veel toegepast in de laserfysica. In totaal namen 113 scholen deel en werden 237 kristallen ingezonden. Tijdens de plechtige prijsuitreiking op 19 mei 2004 in het Paleis der Academiën te Brussel mochten de laureaten hun prijs ontvangen uit de handen van astronaut Frank de Winne.

Het beste kristal ingezonden door de jongste deelnemers (14 jaar) werd gegroeid door leerlingen van de Middenschool Anton Bergmann te Lier. Eervolle vermeldingen voor een maximumscore op vorm en helderheid gingen naar inzendingen van het Heilige-Maagdcollege uit Dendermonde, het Königliches Athenäum Eupen, het Institut Sainte-Marie uit Huy, het Collège Technique Saint-Jean uit Wavre en het Athénée provincial Mixte Waracqué uit Morlanwelz. Het langste kristal werd ingezonden door leerlingen van de Vrije Rudolf Steinerschool uit Gent. De prijs voor de beste school ging naar het Institut Notre-Dame uit Bertrix en Institut Technique Don Bosco uit Brussel.

De derde prijs ging naar leerlingen uit het Sint-Gertrudiscollege te Wetteren (kristal 6 in onderstaande foto) en het Institut Notre Dame te Bertrix (kristal 5). De tweede prijs werd weggekaapt door kristallen van het Sint-Ursulalyceum te Lier (kristal 4) en het Institut Notre-Dame uit Bertrix (kristal 3). Leerlingen uit het Paridaensinstituut te Leuven (kristal 2) en het Heilige-Maagdcollege te Dendermonde (kristal 1) wonnen de eerste prijs, een vijftien centimeter groot bergkristal uitgereikt door Frank de Winne. Alle deelnemende scholen ontvingen een certificaat en de laureaten tevens een boek en aankoopbon geschonken door sponsor Acros Organics.





Winnende kristallen van kaliumdiwaterstoffsfaat (Kristalgroeiwedstrijd editie 2004)

De bekroonde kristallen zullen eind augustus deelnemen aan een internationale wedstrijd en tentoongesteld worden op het tweeëntwintigste Europese Congres voor Kristallografie te Budapest. Gezien het succes van de kristalgroeiwedstrijd wordt het initiatief volgend schooljaar hernomen. Welke te kristalliseren verbinding dan centraal zal staan, wordt pas bekend gemaakt rond kerstmis.

Verdere informatie

Op de drietalige website van de Belgische Kristalgroeiwedstrijd:

<http://www.chem.kuleuven.ac.be/bcc/>

vind je naast de inschrijvingsformulieren, alle verdere informatie over het groeien van kristallen, de beoordelingscriteria, foto's en winnaars van de voorbije edities, de rol van kristallografie, en enkele interessante links.

Prof. Luc Van Meervelt - Departement Chemie K.U. Leuven



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 *anorganische* 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 kristalssystemen 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 *punstroosters* 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 atomenstapelings, 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 principieel 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: Beeckman en Escher' (3). De aanleiding was de 400ste geboortedag van Isaac Beeckman

(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).



Jaarvergadering NVK
POLYMORFIE
5 november 2004

Universiteit Leiden, Havingazaal
Gorleus laboratorium
Programma

- | | |
|---------------|--|
| 10.30 -11.00 | Ontvangst met koffie |
| 11.00 – 11.45 | Prof. dr. J.P. Abrahams (Leiden Univ):
"Polymorfie in Viruskristallen" |
| 11.45-12.30 | Dr P.J.C.M. van Hoof, (Organon)
" De kristallisatie van farmaceutisch actieve stoffen: euforie of
hoofdbreken?" |
| 12.30-13.45 | Lunch |
| 13.45-14.00 | Prof. dr. G. Van den Mooter:(KUL)
"Het gebruik van thermische analyse in de studie van
polymorfie en pseudopolymorfie van geneesmiddelen" |
| 14.30-15.15 | Dr. K. Temst: (KUL).
"De exploratie van polymorfie van magnetische-domeinpatronen
in nanostructuren door middel van de verstrooiing van X-stralen
en neutronen" |
| 15.15-15.45 | Thee |
| 15.45-16.30 | Drs. C. Stoica, Dr. P. Verwer (Radboud Univeriteit
Nijmegen/Akzo Nobel)
"Concomitant polymorphism – control via epitaxial growth" |
| 16.30 -17.10 | Algemene ledenvergadering NVK. |
| 18.00 | Dineren in Leiden |



Directions to the Gorlaeus Laboratorium

With the Car:

Follow the A44 either from the Hague or Amsterdam.

Take the exit (nr8) Leiden/TransFerium (nummer 8) follow the signs to Leiden.

On the N206 the (Plesmanlaan) follow the signs| Bio-Sciencepark.

At the second stop lights turn left following the Bio-Sciencepark sign.

Follow the (Einsteinweg) along the bend until the roundabout.

Take the roundabout halfway. The Gorlaeus Laboratoria is on your right-side, (with the large dish) The paid parking (with chip card) is on your right-hand.



With Public Transport

Train:

From The Hague to Leiden Centraal it is 10 minutes and from Amsterdam 35 minutes, from Rotterdam 30 minutes and Utrecht 45 minutes. Check www.ns.nl for the time schedules. There are trains from Schiphol Airport run regularly to the Central Leiden Station.

Bus (from station Leiden Centraal):

Busline| 43 direction Den Haag, take the bus stop Universiteitsterrein. Check www.connexion.nl for time schedules.

With the Bike (10 minutes) or walking (25 minutes)(from station Leiden Centraal):

Behind the Leiden Central station on the side of LUMC head in the direction of the main entrance of the LUMC. Follow the right side until the end of the parking garage (Albinusdreef). At the roundabout turn left the Sandiforddreef . Follow this road until the end (straight ahead at the roundabout. On the Zernikedreef until the end of the street turn left into the Einsteinweg. The Einsteinweg leads to the Gorlaeus Laboratorium, Under the round dish of the Gorlaeus paid parking is available.



Persoonlijke herinnering aan Prof. Dr. C. Romers

Gaarne aanvaard ik de taak om enige momenten stil te staan bij de mens Prof. Dr. C. (Kees) Romers. Ik heb hem voor het eerst leren kennen tijdens mijn bijvakpracticum (1958), waar hij me de eerste beginselen van de kristallografie heeft bijgebracht. Het was de tijd van de fotocamera, de lichtbak, de Beevers-Liptonstrips en de rekenliniaal. Wij waren bezig de structuur op te lossen van het charge-transfer complex $(\text{CH}_3)_3\text{N}[\text{Br}_2]$ maar ondervonden grote moeilijkheden met de kristallen, die zeer onstabiel bleken. Je zag ze zo onder het Lindemanglas weg diffunderen. Dit betekende 's nachts doorwerken, ten einde nog meer kristallen te verkrijgen. Uiteindelijk bleek uit de Patterson dat we helemaal niet te maken hadden met een charge-transfer complex, maar met een Br_3^- ion. Hier maakte ik voor het eerst kennis met het enthousiasme van Kees. Voor mij was dit tevens het moment, dat ik besloot om zelf ook kristallograaf te worden. We hebben later het charge-transfer complex nog gesynthetiseerd (lichtgeel poeder, later overgaand in de oranje Br_3^- - verbinding). Overigens was dit nog niet het einde van onze ellende, want ook de Br_3^- verbinding verloor haar Br_2 met als resultaat een perfecte opname van $\text{N}(\text{CH}_3)_4^+\text{Br}^-$.

Kees was altijd de drijvende kracht achter de Leidse groep. We hadden een soort verdeling. De studenten losten de structuren op en Kees zorgde voor de publicaties. Er werd hard gewerkt. Er kwam eens een student die bij ons wilde afstuderen en ook wel wilde opschieten. In de groep van Kees was hij aan het goede adres. Na de pensionering van Kees hebben we nog in samenwerking met Prof. Dr. D.W.J. Cruickshank (Manchester) een artikel gepubliceerd over annuleen-18. Dit was een bijzonder fijne ervaring. Soms was Kees het niet met mijn plannetjes eens, maar als ze dan weer eens extra mooi uitvielen, zoals wanneer ik een paar waterstofbruggen met het programma ORTEP getekend had, werd hij razend enthousiast, begon in zijn handen te wrijven en riep luid uit: "Dit is mooi!".

Kees was een groot liefhebber van muziek, literatuur en schilderkunst. Hij herkende elk muziekstuk en wist dan ook nog te vertellen, wie het vertolkte. Mijn man en ik hadden eens het voorrecht om na een congres in Rome (1963) samen met hem in een huurauto naar huis te rijden. We hebben daar toen een tiendaagse vakantie van gemaakt waarin we zwierven door de straten van Rome, Perugia en Florence terwijl we van een dol enthousiaste Kees les kregen in de Italiaanse



schilderkunst. Terug gingen we via de Gothardtpas in Zwitserland weer naar huis. Onderweg genoten we van de prachtige natuur.

Ook na zijn pensionering heeft Kees bepaald niet stil gezeten. Hij heeft o.a. zijn studie Italiaans opgepakt en heeft zich op grondige wijze de wereldliteratuur eigen gemaakt, hetgeen resulteerde in een uit ongeveer 100 bladzijden bestaande essay: "The influences of myth and fairy-tale on literary genres". In 1999 kreeg ik van Kees een exemplaar toegestuurd. Daar er nogal wat geteld en gerekend werd, kon ik het niet nalaten alles te controleren. We hebben toen besloten dit automatisch, door de computer te laten doen door middel van EXCEL. Dit resulteerde in de 2e versie (met groene kaft). Dr. Carolyn Knobler heeft zich vervolgens over het Engels gebogen en nog het nodige commentaar gegeven. Aanvankelijk waren we daar niet zo blij mee, maar bij nader inzien moesten we toch toegeven dat ze gelijk had, want het verkeerde gebruik van voorzetsels en verkeerde woordvolgorde leidt tot kromzinnen. Deze laatste verbeteringen werden aangebracht en dit resulteerde tenslotte in deel 3 (hard gele kaft). Al met al heeft dit werk ruim 10 jaar geduurd en werden er 507 boeken in opgenomen. Het was een waar genoegen om dit werk samen met hem te doen. Terwijl wij door het stuk heengingen werd Kees helemaal lyrisch over de schoonheid van de literatuur en begon dan te zingen.

In het najaar van 2002 begonnen Kees zijn krachten duidelijk af te nemen en kreeg hij last van onbeheerste bewegingen. Tot zijn grote verdriet durfde hij toen niet meer naar concerten te gaan, wat hem veel levensvreugde ontnam. Het stuk kwam net op de valreep klaar. Ik heb Kees het laatste jaar enorm gemist. We hadden altijd goed contact met elkaar. Dat wij vaak met dankbaarheid aan Kees, die op 25 maart 2003 overleed, mogen terugdenken.

Namens allen die van hem hielden.

E.W.M. Rutten-Keulemans *

* † 20-9-2004



Wat is het verstrooiingspatroon van jong bloed?

De WPD, de WerkGroep Poederdiffractie, is meer dan alleen een constructieve en nuttige onderdeel van de NVK. Het werkgroepgebeuren is oer-gezellig, de leden enthousiast en alleen door hun baas tot afscheid nemen te dwingen. Dat is natuurlijk positief, maar nieuwe meningen en jonge visies moeten met de regelmaat van de klok te horen zijn.

De WPD vergadert, ongeveer zes maal per jaar enkele uren, nu meestal in het bruisende Amsterdam. Het doel van de werkgroep is de belangen van de poederdiffractie en de kristallografie in Nederland (en ook daarbuiten) te ondersteunen. De WPD organiseert eens in de twee jaar (ook dit jaar weer) in december een themadag over een actueel onderwerp binnen de poederdiffractie op een originele locatie. De WPD onderhoudt contacten tussen universiteiten en industrie: zie de ledenlijst hieronder. De werkgroep denkt na over onderwijsvernieuwingen op zeer verschillende kennis- en toepassingsniveaus van poederdiffractie en kristallografie. De WPD houdt zich verder intensief bezig met standaardisatie van röntgen- en neutronendiffractiemethoden op Europees (CEN) niveau en van daaruit wereldwijd (ISO): ISO-procedures worden ontworpen om wereldwijd succesvol diffractie te bedrijven en om aan te refereren. De WPD heeft een idee bedacht om een poederdiffractometer te bouwen, die op Mars bodemonderzoek kan doen. Tenslotte vraagt de werkgroep zich af hoe het diffractiepatroon van jong bloed eruit ziet. Weet jij het, heb je een idee of wil je gewoon een keer komen rondneuzen bij de WPD, mail dan even met een van de leden van de werkgroep.

Jan L. de Boer
RU Groningen
email: J.L.de.Boer@chem.rug.nl

Rob Delhez
Laboratory of Materials Science, TU Delft
email: r.delhez@tnw.tudelft.nl

Sjerry J. Van der Gaast
Kon. Nederlands Inst. Onderzoek van de Zee
e-mail: gaast@nioz.nl



Rob B. Helmholtz
Laboratorium voor Kristallografie, UvA
email: rbh@science.uva.nl

Jan B. van Mechelen
Laboratorium voor Kristallografie, UvA
email: Janvm@science.uva.nl

Stefan Melzer
Ceramics Research Centre, Corus RD&T
e-mail: stefan.melzer@corusgroup.com

Celeste A. Reiss
PANalytical BV
email: Celeste.Reiss@PANalytical.com

Leo Woning
Bruker Nonius BV
email: Leo.Woning@bruker-nonius.com



De AIO-School "Kristallografie" 2003.

Sinds vorig jaar wordt de "AIO-School Kristallografie", die onder auspiciën van de NWO-CW-Studiegroep "Kristal- en Structuur-Onderzoek" jaarlijks in de herfst wordt gehouden, georganiseerd door de NVK. In principe is het nu de Sectie Onderwijs van onze vereniging die deze taak op zich heeft genomen. Dat klinkt als een nogal drastische organisatorische verandering. De werkelijkheid is dat het dezelfde personen zijn die de school afgelopen jaren organiseerden, alleen nu niet min of meer á titre personel via KSO, maar als leden van de NVK. De Sectie Onderwijs heeft er een klus aan. De financiën vallen nu onder de eindverantwoordelijkheid van de NVK- penningmeester Huub Kooijman. De continuïteit is ook wat beter gewaarborgd. Immers de NVK voorziet formeel in de bemensing van de organisatie.

We hebben afgelopen jaar, zoals U zult begrijpen, niet anders gehandeld dan de voorgaande jaren. We hebben weer dezelfde 'formule' gebruikt: De School is bedoeld voor promovendi die geen solide achtergrond in de kristallografie hebben en in hun werk geconfronteerd worden met begrippen, methoden en theorieën uit de kristallografie. Natuurlijk zijn ook promovendi met een rigide kennis van en ervaring in kristalstructuuronderzoek van harte welkom om hun kennis op te frissen en/of uit te breiden. De behandelde thema's zijn toegesneden op de praktijk van het onderzoek. Vragen zoals: wat zijn de voetangels en klemmen waar je vooral niet in terecht moet komen, wat is de 'state of the art' in een bepaald onderwerp; waar zitten in het nederlandse taalgebied de deskundigen op dat speciale gebied, enzovoort. Met dit nieuwe uitgangspunt is de cursus de laatste jaren steeds vol bezet met het maximum aantal deelnemers is (25). Vanwege de afwisseling van theorie met praktische oefeningen kunnen we geen groter aantal aan.

In 2003 was het onderwerp: "Diffraction as a Tool", we waren van 20 t/m 24 oktober te gast bij de Universiteit van Amsterdam. De cursus werd opgezet door Rob Helmholtz, Luc Van Meervelt en ondergetekende, waarbij Rob de financiële en organisatorische zaken onder zijn hoede had en Luc en ik ons meer met de keuze van de inhoud en de docenten bezighielden. Op maandag 24 oktober begonnen we met "Fundamentals ": Kinematische theorie, Fourier transformaties, oefeningen en illustratieve voorbeelden, docenten Sybolt Harkema, Huub Kooijman en Fokke Tuinstra. Dinsdag: "Structure Determination". Luc Van Meervelt ging stapsgewijs door een éénkristalstructuurbepaling en Rob Helmholtz deed hetzelfde voor een structuurbepaling met poederdiffractie. Voor woensdag



was het onderwerp 'Diffraction in Material Science' waar Rob Delhez de diffractie aan metalen en anorganische materialen behandelde en Loes Kroon die aan polymeren en organische stoffen. Donderdags kwamen de 'Pitfalls and Errors' aan de orde waarbij Martin Lutz waarschuwde voor de fouten die je kunt maken bij éénkristallen en G. Vanhoyland (LUC, België) de praktijk van de poederdiffractie belichtte. René de Gelder liet daarna zien hoe je met je diffractiegegevens van databases gebruik kunt maken. De vrijdag was gewijd aan Large Facilities. Jeroen Goedkoop gaf een introductie over gebruik van synchrotron straling en Ad van Well (IRI-TUD) over het gebruik van neutronenbronnen.

Op woensdagmiddag kregen we een rondleiding langs de geavanceerde poederdiffractie-apparatuur in Amsterdam. Daarna reisde de hele groep af naar Utrecht waar we bij de groepen van Piet Gros en Ton Spek rondgeleid werden om kennis te nemen van de State of the Art van éénkristal (inclusief eiwit) onderzoek. Deze dag werd afgesloten met een gezamenlijke maaltijd in een Utrechtse gelegenheid.

Op ons als organisatoren kwam de cursus positief over. Men was geïnteresseerd, er werd actief aan de oefeningen deelgenomen ook de excursiemiddag werd met veel animo gevolgd. De afstemming tussen de verschillende docenten was goed. De deelnemers hadden een diverse achtergrond en waren voor een groot deel niet nederlandsstalig (de cursus wordt in het engels gegeven). Ze kwamen uit Amsterdam, Antwerpen, Delft, Eindhoven, Groningen, Nijmegen Utrecht en Twente. Een poging van Rob om achteraf via een enquête onder de deelnemers hun oordeel te krijgen mislukte vanwege de minimale respons.

Gezien het feit dat we de laatste jaren steeds volgeboekt zijn gaan we er van uit dat we in een behoefte voorzien. De opzet lijkt succesvol. Dat hebben we ook voor een groot deel te danken aan de inzet van de docenten, grotendeels leden van de NVK, die ik daarvoor nogmaals wil bedanken.

Voor 2004 staat de AIO-School geplanned op 25-29 Oktober in Nijmegen. Als onderwerp is: "Crystalline Samples: How to obtain, how to characterize and how to handle them." Aspecten als Groei en Stabiliteit, Karakterisatie, zowel macroscopisch als microscopisch en Hanteren van allerelei soorten kristallen onder verschillende omstandigheden komen aan de orde.

We rekenen weer op de welwillende bijdragen van onze leden als docent (of cursist) en op een 'volle bak' met enthousiaste deelnemers.



Verslag van de Werkgroep PoederDiffractie over het NVK- verenigingsjaar 2002/2003

De Werkgroep PoederDiffractie bestond dit jaar uit : Rob Delhez (TU Delft), Céeleste Reiss (PANalytical B.V., voorheen Philips Analytical), Leo Woning (Bruker-Nonius, terug van weggeweest), Jan van Mechelen (Univ. van Amsterdam), Jan de Boer (Rijksuniversiteit Groningen), Sjerry van der Gaast (NIOZ), Stephan Melzer (Corus, vanaf september) en Rob Helmholtz (Univ. van Amsterdam), tevens secretaris.

De Werkgroep heeft het afgelopen jaar zo'n tien vijf keer vergaderd en heeft zich met de volgende hoofdthema's bezig gehouden : de Themadag Poederdiffractie, de Standaardisatie van de Poederdiffractie in Europees verband, de toekomst van de poederdiffractie in Nederland en via haar vertegenwoordigers in het Mars Diffractometer Project Team (MDPT) met de mogelijkheid tot deelname aan een toekomstige Marsmissie met als doel in-situ röntgenografisch onderzoek aan bodemmonsters, o.a. om te zoeken naar tekenen van (vroeger) leven.

De themadag zal dit jaar op 13 december bij Bruker-Nonius in Delft worden gehouden met als titel "Powder Diffraction Software. What is behind the buttons"?

De Europese Europese Werkgroep (WG10) van Technische Commissie "Non-destructive Testing" [TC138] van het Europese centrum voor normalisatie [CEN] voor de Standaardisatie van de Poederdiffractiemethoden kwam dit jaar 2 keer in Italië bijeen in Londen, Brescia, Pisa, Korfoe, Parijs en Grenoble Pisa en 1 keer tijdens EPDIC-8 in Upsala in Zweden. De volgende 2 standaarden zijn nu officieel en dus verkrijgbaar: EN-13925-1:2003 "Non destructive testing ? X-ray diffraction from polycrystalline and amorphous material ? General Principles" en EN-13925-2:2003 "Non destructive testing ? X-ray diffraction from polycrystalline and amorphous material ?documenten betreffende "General Principles" en "Procedures" zijn inmiddels goedgekeurd, van het document "Instruments" wordt nu het laatste concept gereed gemaakt, en van het document "Terminology" wordt de tweede versie nu becommentarieerd door de deelnemende landen. Daarna wordt het document Reference Materials onder handen genomen. Van het document "Test method for residual stress analysis by X-ray diffraction" wordt de eerste versie herzien. Parallel hieraan wordt er door



een AdHoc-groepen [AHG7] gewerkt aan een standaard voor röntgen- en neutronendiffractiespanningsmetingen. Dit document zal naar verwachting behalve een Europese ook een wereldwijde ISO-standaard worden.

Procedures?. De voortgang van de stukken over instrumenten (1 bijeenkomst), terminologie, neutronenspanningsmetingen (3 bijeenkomsten) en röntgenspanningsmetingen (2 bijeenkomsten) is voorspoedig.

Van de Een te schrijven brief over de zorgelijke toestand met betrekking tot het subkritisch zijn van de (poeder)diffractie, waarvoor de WPD een opzet heeft gemaakt, kan gezegd worden dat deze zich nagenoeg in een eindstadium bevindt. is inmiddels door het bestuur van de NVK aan verschillende instanties verstuurd.

Met betrekking tot het Marsproject is inmiddels een projectteam opgericht, het Mars Development Diffractometer Project Team (MDPT), waarin naast de leden van de werkgroep verder zitting hebben Prof. Dr. Pascale Ehrenfreund en Ir. Inge L. ten Kate van de Leidse Sterrenwacht en drs. Arno A. Wielders van TNO/TPD in Delft., waarin namens de WPD Rob Delhez en Sjerry van der Gaast zitting hebben, komt als regel maandelijks bijeen. Zij houden de WPD van haar bijeenkomsten op de hoogte. Deze opsplitsing in twee commissies heeft geleid tot een lagere vergaderfrequentie voor de WPD. Er is inmiddels een projectvoorstel bij de ESA ingediend, dat samenwerking met een Engelse en een Franse groep behelst, terwijl er contact gelegd is met een Italiaanse groep, die ook een XRD-projectvoorstel heeft ingediend. Na diverse informele contacten kwam dit team voor het eerst in September bij elkaar. In October vond er oriënterend overleg plaats met een medeweronderzoeker van het NASA/AMES Research Center uit Californië. Daarnaast zijn er contacten aan het ontstaan met onderzoekers uit Leicester in Engeland, Orléans in Frankrijk, Pescara in Italië en Barcelona in Spanje. Ook wordt er nu een projectvoorstel bij ESA's "Call for ideas for Pasteur Instrument Payload for the ExoMars Rover Mission" ingediend, gebaseerd op het ontwerpidee voor een gecombineerd transmissie/reflectie-diffractometer, dat in augustus op een SPIE conferentie op Hawaii namens het MDPT gepresenteerd werd door Arno Wielders. Er wordt nu gemikt op een lancering van het transmissie-instrument in 2007 of 2009, en een lancering in 2013 van het volledige tweetrapsinstrument.



Opgavebon voor het lidmaatschap van de Nederlandse Vereniging voor Kristallografie

Ondergetekende _____ geeft zich op als lid van de NVK
_____ geeft de volgende wijziging(en) door

Naam: _____

Initialen: _____ Titel: _____

Huis:

Adres: _____

Postcode: _____ Plaats: _____

Telefoon: _____

Werk:

Instituut: _____

Adres: _____

Postcode: _____ Plaats: _____

Telefoon: _____ Fax: _____

E-mail: _____

Interessegebied: _____

Aankruisen wat van toepassing is:

65+ ...() A.I.O ...() student ...()

lid K.N.C.V. ...()

Dit formulier zenden aan:

Dr. H. Kooijman

Department of Crystal and Structural Chemistry

Padualaan 8

3584 CH Utrecht

h.kooijman@chem.uu.nl

De contributie bedraagt:

voor leden KNCV of NNV:

voor 65⁺ leden:

voor AIO's en studenten:

* studenten, lid KNCV en <26 jaar:

13,50 per jaar

11,00 per jaar

9,00 per jaar

4,50 per jaar

gratis.

Gironummer: 7366901, NVK, Bilthoven