

Vuiltjes frustreren groei van kristallen

Twee Nederlandse studenten scheikunde bereiken deze week het onmogelijke: een artikel in *Science*. Per ongeluk.

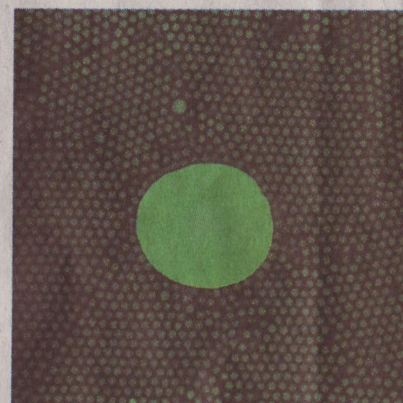
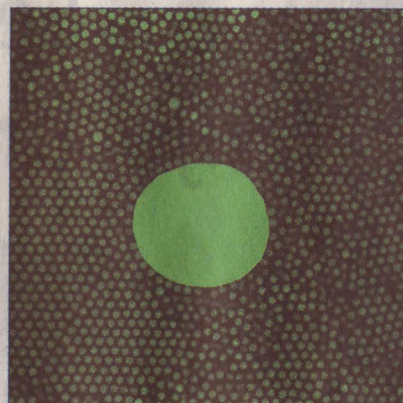
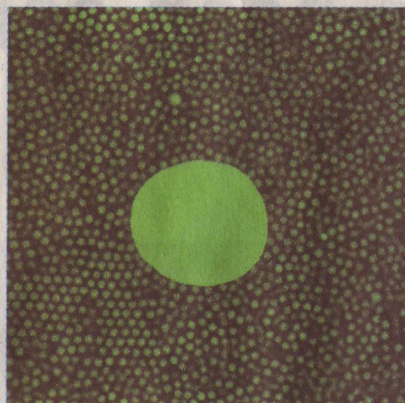
Door Michael Persson

Wat Esther Groeneveld en Hans Scherff in mei vorig jaar verkeerd deden, is niet helemaal duidelijk. De toenmalige eerstejaars scheikundestudenten van de Universiteit Utrecht waren net begonnen aan hun onderzoeksstage, een drieweekse kennismaking met de wetenschap. En waren dus, zacht uitgedrukt, nogal onervaren.

Het is juist die onervarenheid die nu een artikel in *Science* heeft opgeleverd.

Want daar staan hun namen deze week, boven het stuk *Colloidal Hard-Sphere Crystal Growth Frustrated by Large Spherical Impurities*. Over de rol van vervuilingen bij het groeien van kristallen. Mogelijk van belang voor de productie van eiwitten, voor het smeden van metalen, voor het maken van optische instrumenten. Maar daarnaast ook gewoon van belang voor het fundamentele inzicht in de natuur.

De twee eerstejaars moesten minuscule bolletjes maken die in het Van 't Hoff laboratorium van de Universiteit Utrecht worden gebruikt om moleculen te simuleren. De plastic knikkers, met een diameter van een paar duizendste millimeter, worden in een glazen vingerhoedje met vloeistof gestopt waarin ze langzaam naar beneden zakken. Bovenin zijn de bolletjes nog tamelijk ongeordend, zoals ook echte moleculen in bijvoorbeeld water. Maar tijdens het zakken komen de knikkers steeds meer in het gelid te staan. Zoals ook watermoleculen tijdens het bevriezen een kristalrooster vormen. Omdat de geor-



Drie opnamen (zestig bij zestig micrometer) van de 'kristalgroei' van plastic bolletjes rond een vuiltje, de grotere bal in het midden. Kristalgroei komt overeen met het bevriezen van een vloeistof. Chaos betekent vloeibaar, orde staat voor de vaste stof. Het bevriezen, ofwel de groei van het kristal (een mooi geordende stapeling, waarbij elke bol zes andere om zich heen heeft) begint links onder. Na verloop van tijd zijn alle balletjes 'bevoren', behalve die rond het vuiltje. Ook zijn de foutlijnen in het kristal te zien die door de vervuiling zijn ontstaan.

FOTO'S UNIVERSITEIT UTRECHT

dende stapeling van onderaf langzaam naar boven 'groeit', kan met dit soort balletjesexperimenten de kristalgroei tijdens stollingsprocessen worden nagebootst.

De onderzoekers in het Utrechtse lab maken de nepmoleculen zelf. Ze doen wat scheutjes methylnmethacrylaat in een kolf, voegen er een initiator aan toe en verhitten het spul op een verwarmingsplaatje, waarbij de monomeermoleculen een polymeer vormen: polymethylmetacrylaat, alias PMMA, alias plexiglas. In de vorm van bolletjes wordt het spul uit de kolf gevist.

Te grote bollen

De onderzoekers hadden kleine knikkers besteld. Maar toen de studenten Groeneveld en Scherff hun bolletjes uit de kolf haalden, bleken die veel groter dan verwacht.

'We weten nog steeds niet wat er verkeerd is gegaan', zegt dr. Roel Dullens, die met eerste auteur drs. Volkert de Villedieu de stage begeleidde. Misschien

de verwarmingssnelheid, misschien de concentratie. Er zijn veel parameters die het polymerisatieproces beïnvloeden.'

En toen zaten ze dus, met die grote bollen. Wat daarmee te doen? Ze hadden in het lab ook nog een voorraad kleine bolletjes liggen. 'Dus toen bedachten we: hoe gedragen die kleine zich om zo'n grote bol?', zegt Dullens. 'Dat was deels een idee van die studenten.'

In echte vloeistoffen zweven tussen de moleculen vuiltjes die zich tijdens de kristallisatie in het rooster nestelen. Dat sluit daardoor niet meer lekker aan. De grote bollen symboliseren zulke verontreinigingen.

Met een microscoop konden de Utrechtse onderzoekers precies volgen hoe afzonderlijke 'moleculen' zich metertijd, afhankelijk van de grootte van de vervuilende bol, in het kristal gedragen. Omdat de bolletjes afzonderlijk zichtbaar zijn (echte moleculen zijn daarvoor te klein), kan de mate van structuur ook in een statistische grootte worden vastgelegd: de ordenings-

parameter ψ_6 , die aangeeft in hoeverre elk bal netjes zes buurbal om zich heen heeft, zoals in het ideale tweedimensionale pingpongbalrooster.

De groei van een verontreinigd kristal is verre van ideaal, blijkt uit de proeven. Dullens noemt het 'gefrustreerd'. Een frustratie die ook uiterlijk te zien is.

Zo blijft rond de vuilknikkers een schil met chaos bestaan: een vloeibaar laagje in een vaste stof.

Bovendien ontstaan er foutlijnen in het kristal. In zuivere kristallen ontstaan die scheuren ook wel, maar herstellen ze zichzelf.

De lijnen vormen een probleem in optische onderdelen, omdat ze het licht breken en de verkeerde kant op sturen. Het is juist geen probleem bij het maken van bijvoorbeeld staal, omdat de foutlijnen verschillend georiënteerde deelgebiedjes in het kristal laten ontstaan. Daardoor kan een breuk niet langs een rechte lijn doorgroeien en wordt een metaal minder bros. 'Maar met dat soort toepassingen mag iemand anders zich gaan bezighouden', zegt Dullens.