

Aafje Looijenga-Vos

29 april 1928 – 4 november 2018



Aafje Vos (met ponskaarten in de hand) en analist Fré van Bolhuis, in het scheikundig laboratorium aan de Bloemsingel 10 in Groningen. De foto uit 1954 is gemaakt door (de latere prof.dr.) E.F.J. van Bruggen en gepubliceerd in Helvoort, Ton van, *De chemie van de universitaire wetenschapsbeoefening: Een halve eeuw scheikunde in Groningen, 1945-1995* (Hilversum, Verloren, 2008), p. 179.

Aafje Vos werd geboren in Marum, in de provincie Groningen, en groeide op in en om het Overijsselse Vollenhove. Van 1941-1944 bezocht ze de MULO in Zwartsluis en in de jaren 1945-1946 het Christelijk Lyceum te Zwolle, dat ze afsloot met een HBS-B diploma. Hierna besloot ze chemie te gaan studeren aan de Rijksuniversiteit Groningen. In haar eerste jaar hoorde ze een lezing van professor Eelco Wiebenga over röntgenkristallografie en ze was onder de indruk van het idee dat het mogelijk was om de opbouw van een molecuul uit individuele atomen zichtbaar te maken. Het college van de hoogleraar Pieter Terpstra wekte vervolgens haar belangstelling voor kristalmorfologie en al vrij gauw, in 1948, werd ze bij hem student-assistent voor de bewerking van de 'Barker Index of Crystals', een identificatiesysteem van kristallen, gebaseerd op de karakteristieke hoeken tussen de vlakken van kristallen. De berekening van die hoeken uit morfologische gegevens was langdurig en saai, maar het gebeurde in een stimulerende omgeving. Dit assistentschap duurde tot 1951.

In die tijd was hét wetenschappelijk forum voor de Nederlandse kristallografen, de stichting FOMRE (Fundamenteel Onderzoek der Materie met Röntgen- en Elektronenstralen), dat in 1946 was opgericht om geld voor apparatuur te verkrijgen. Op de FOMRE-dag in Delft, in 1951, maakte Aafje voor het eerst kennis met andere Nederlandse kristallografen, zoals Jo Bijvoet uit Utrecht, Carolina MacGillavry uit Amsterdam en Pieter de Wolff uit Delft. Andere internationale kristallografen trof ze later tijdens bijeenkomsten van de in 1948 opgerichte International Union of Crystallography (IUCr).

In 1952 rondde Aafje Vos haar studie af, met lof, en ze startte in hetzelfde jaar een promotieonderzoek als doctoraal assistent bij de hoogleraren J.J. Hermans en de al eerder genoemde Wiebenga. Veel voorwerk was al gedaan door Donald Smits uit Amsterdam, later de eerste directeur van het Rekencentrum in Groningen. Hij had Wiebenga geholpen met het inrichten van het laboratorium. Samen ontwierpen en bouwden Smits en Wiebenga een integrerende Weissenberg-goniometer met bijbehorende densitometer, waarmee

in die tijd snel en nauwkeurig de intensiteiten $I(hkl)$ van de door een kristal verstrooide röntgenbundels op röntgenfilms verzameld konden worden en vervolgens in getallen worden omgezet. Smits probeerde het rekenwerk zo veel mogelijk te bekorten. Al in 1949 was het dankzij zijn inspanningen mogelijk in Groningen Fourier- en Patterson-synthesen te berekenen met behulp van IBM-ponskaarten voorzien van goniometrische functies. De machinale sommaties gebeurden na sluitingstijd op de tabelleermachine in de tabaksfabriek van Theodorus Niemeijer NV. De andere promovendi maakten dankbaar gebruik van de geboden faciliteiten.

Voor haar promotieonderzoek viel Aafjes keuze op twee fosforsulfiden: P_4S_{10} en P_4S_7 . Deze verbindingen intrigeerden haar al tijdens haar practicum organische chemie. De eerste verbinding was reeds halverwege de negentiende eeuw gesynthetiseerd door Jöns Jacob Berzelius, de befaamde Zweedse chemicus (1779-1848), één van de grondleggers van de moderne chemie en onder andere ontdekker van de elementen silicium, selenium, thorium en cerium. De verbinding was bekend, maar de structuur van het molecuul niet. Na kristallisatie van de verbinding duurde het negen maanden om de intensiteiten van ongeveer 1000 reflecties op film te meten. Voor de structuurbepaling werd de Pattersonmethode gebruikt. Waar voorheen projecties van Pattersonfuncties werden berekend, om rekentijd te besparen, was het begin jaren vijftig al mogelijk om driedimensionale Pattersonfuncties te berekenen. De kristallografiegroep in Utrecht zag de structuurbepaling somber in, omdat de massa van de te lokaliseren vier P- en tien S-atomen vrijwel gelijk was, maar tot ieders grote opluchting lukte de interpretatie. Het kristal bleek te bestaan uit losse P_4S_{10} -moleculen, opgebouwd uit een P_4S_6 -skelet, analoog aan het N_4C_6 -skelet in hexamethyleen tetramine, met verder aan elk P-atoom nog een S-atoom. De structuur van P_4S_7 bleek verrassend: de in het kristal aanwezige P_4S_7 -moleculen bevatten een P-P-binding tussen driewaardige P-atomen. De twee structuren¹ vormden de basis van Aafjes proefschrift, dat ze in 1955 verdedigde en waarvoor ze met lof haar doctorstitel ontving.

Aafje Vos bleef aan de Rijksuniversiteit Groningen, eerst als wetenschappelijk medewerker, vervolgens als wetenschappelijk hoofdmedewerker en weer later als lector. De eerste twee jaar na haar promotie bezocht ze, met

1 Aafje Vos and E. H. Wiebenga, *Acta Cryst.* (1955) **8**, 217-223

een ZWO-stipendium, diverse kristallografische instituten in het Verenigd Koninkrijk: Glasgow, Leeds, Oxford en Cambridge. In Oxford, waar ze in 1956 enkele maanden verbleef, werkte ze nauw samen met Dorothy Crowfoot-Hodgkin, die de structuurbepaling van Vitamine B12 aan het afronden was² en waarvoor ze in 1964 de Nobelprijs voor Scheikunde toegekend zou krijgen. Terwijl ze samen sokken stopten in de tuin van Dorothy's huis, bespraken ze kristallografische problemen.

In 1962 werd Aafje hoogleraar algemene chemie en in 1967 hoogleraar structurele chemie aan de Rijksuniversiteit Groningen. In deze nieuwe functie werkte ze, van 1967-1968, in Amerikaanse instituten in Buffalo, Washington DC, Oak Ridge, Brookhaven en Pittsburgh.

In Buffalo bezocht ze haar landgenoot Phil Coppens, die aan de Universiteit van Amsterdam bij Carolina McGillavry was gepromoveerd. Samen werkten ze aan neutronendiffractiedata van cyanuurkristallen die waren gemeten in het Brookhaven National Lab.³ In Washington DC werkte ze in het Naval Research Lab samen met Isabella Karle aan directe methoden, een andere benaderingswijze van het faseprobleem dan de Pattersonmethode: fasebepaling aan de hand van waarschijnlijkheidsrelaties tussen amplituden en fasen van structuurfactoren. Daar liet ze in iets meer dan een dag zien hoe een organische verbinding er totaal anders uitzag dan wat de organische chemici verwachtten.⁴

Samen met de groep in Utrecht en het bedrijf Enraf-Nonius in Delft stond Aafje aan de wieg van de ontwikkeling van de CAD-4, de Computer Automated Diffractometer met vier cirkels. Dit instrument gebruikte een voor die tijd revolutionaire geometrie. Aafje vond het wel op een klauwtje lijken. Sindsdien wordt deze instrumentopbouw 'Kappa-geometrie' genoemd. Veel van de formules die nodig waren om de gecompliceerde bewegingen van dit instrument in algoritmes om te zetten en te programmeren, kwamen van haar hand. Eén van de eerste van deze instrumenten werd in 1969 in haar laboratorium geïnstalleerd. Hierdoor was het voor haar collega Jan de Boer

2 D. Crowfoot-Hodgkin et al., *Nature* **176**, 325-328 (1955)

3 P. Coppens & Aafje Vos. *Acta Cryst.* (1971) **B27**, 146-158

4 J. C. van de Grampel et al., *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* (1971) **90**, 587

mogelijk om op een geautomatiseerde manier nauwkeurige intensiteiten te meten.⁵ Nieuwe meetmethoden, met name op het gebied van incommensurabele kristallen, werden in het lab in Groningen ontwikkeld. De komst van de CAD-4 leidde overigens ook tot de oprichting van het centrum voor participatieonderzoek⁶ in Utrecht in het begin van de jaren zeventig van de vorige eeuw, waar Ton Spek metingen deed aan kristallen en röntgenstructuren voor derden oploste.

De kristalchemiegroep van Aafje bestudeerde een breed scala aan onderwerpen: cyclofosfazen;⁷ studies naar de distributie van elektronendichtheid,⁸ met behulp van hoge resolutiegegevens bij lage temperatuur; relaties tussen structuur en elektrische en magnetische eigenschappen van morfolinium-TCNQ-verbindingen;⁹ het combineren van *force-field*-berekeningen met röntgenmetingen op verbindingen die 'sterisch gehinderd' zijn; incommensurabele structuren en biologisch actieve peptiden,¹⁰ deze laatste in samenwerking met het bedrijf Organon.

Naast haar onderzoeksactiviteiten was Aafje Vos ook bestuurlijk en organisatorisch actief. Van 1968-1972 was ze secretaris van de Groningse Faculteit Wiskunde en Natuurwetenschappen. In de drie jaar voorafgaand aan het Tiende Internationale Congres van de 'International Union of Crystallography' in Amsterdam in 1975 was ze voorzitter van het programmacomité van de conferentie. In de periode van 1970-1976 was ze lid (soms voorzitter) van verschillende commissies ten behoeve van de lerarenopleiding scheikunde van de Rijksuniversiteit Groningen. Van 1977-1982 was ze secretaris van de commissie 'International Tables for Crystallography'¹¹ van de IUCr. Daar speelde ze met haar intelligentie, haar charme en haar organisatorische vaardigheden een grote rol in het samenbrengen van de opvattingen van vele kristallografen uit Europa en de rest van de wereld. Met hen kwam de editie uit 1983 van Deel A van de *International Tables for Crystallography* tot stand.

5 J.L. de Boer & Aafje Vos, *Acta Cryst* (1979) **B35**, 1809

6 The National Single Crystal X-ray Facility, Utrecht University, www.cryst.chem.uu.nl

7 A.J. Wagner & Aafje Vos, *Acta Cryst.*(1968) **B24**, 1423

8 D. Nijveldt & Aafje Vos, *Acta Cryst.* (1988) **B44**, 281-289

9 R.J.J. Visser, J.L. de Boer & Aafje Vos, *Acta Cryst.* (1990) **C46**, 869

10 G. Admiraal & Aafje Vos, *Chem. Biol. & Drug design* (1984) **23**, 151-157

11 <https://it.iucr.org/Ac/>

In 1982 kondigde ze plotseling aan dat ze, op 54-jarige leeftijd, ging trouwen met Hans Looijenga,¹² werkzaam bij TNO, lid van dezelfde kerk als Aafje en weduwnaar met acht kinderen. Dit hield dus in dat ze naar Delft zou verhuizen. Na dertig jaar te hebben gekozen voor de wetenschap in Groningen, koos ze nu voor haar geluk in Delft. Een behoorlijke carrièrevanandering en aanvankelijk een schok voor haar collega's en promovendi. Maar ze zorgde er vanzelfsprekend voor dat haar promovendi tot de promotie goed werden begeleid en dat al haar medewerkers een goede, nieuwe plek kregen.

Aafje voegde zich soepel in haar nieuwe familie, als echtgenote en stiefmoeder en vanaf 1985 als oma, maar haar nieuwe rol weerhield haar er niet van om actief te blijven in de wetenschap. Ze bleef de jaarlijkse Nederlandse kristallografische bijeenkomsten in Lunteren bezoeken en was van 1987-1990 secretaris van de Vrije Sectie van de KNAW, de Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen, waarvan zij sinds 1980 lid was. Begin maart 2015 is, in het kader van een project van de viering van het 400-jarig bestaan van de Rijksuniversiteit Groningen, een hooglerarenportret van haar onthuld in de senaatszaal.

Aafjes memoires 'Herinneringen aan de kristalchemie'¹³ zijn gepubliceerd in een compilatie van herinneringen van 24 Nederlandse onderzoekers in de chemie (Delft University Press, 1993) en zijn als pdf-bestand te raadplegen op de website van de Chemie Historische Groep van de KNCV. Zij concludeert hierin dat, met de toenemende snelheid van datacollectie en computers, veel nieuwe gebieden zullen worden ontwikkeld door kristallografie. 'Maar toch,' voegt ze hierin toe, 'wat had het oude handwerk een grote bekoring!'

Aafje Looijenga-Vos werd oma van 21 kleinkinderen en vier achterkleinkinderen.

12 Hans Looijenga overleed in 2000.

13 'Herinneringen aan de kristalchemie' in: *Werken aan scheikunde, 24 memoires van hen die de Nederlandse Chemie deze eeuw groot hebben gemaakt*, Delft, 1993, p. 443-464.