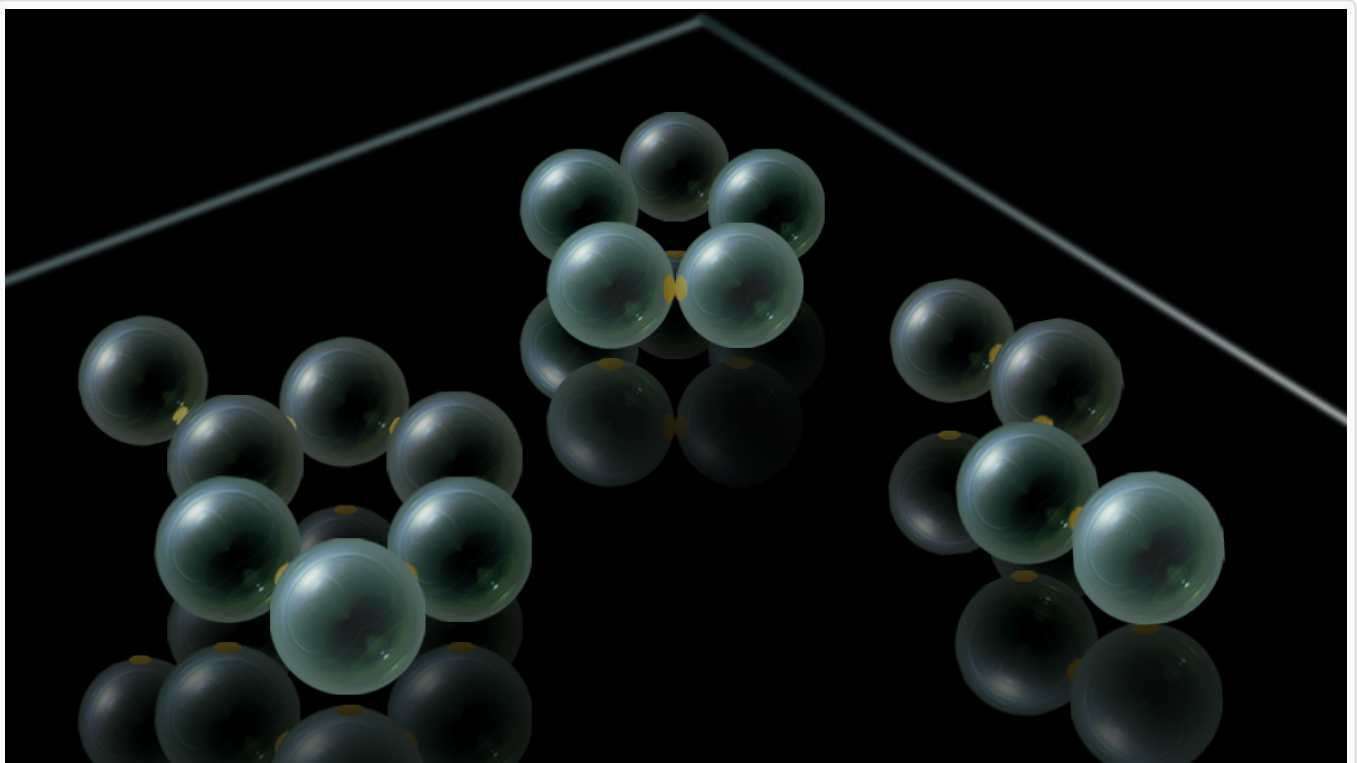


Een modelbouwset voor 'echte' moleculen

Moleculen zijn zo klein dat we ze zelfs met gewone microscopen niet kunnen zien. Dat maakt het bestuderen van moleculen en hun chemische reacties ingewikkeld: het beperkt onderzoekers tot het gebruik van ofwel indirecte observaties, ofwel computersimulaties. Een team van onderzoekers heeft nu een manier gevonden om met behulp van 'patchy particles' modelmoleculen te bouwen op de micrometerschaal. Dit maakt veel directer onderzoek van moleculaire processen mogelijk.



Afbeelding 1. Een modelbouwset voor moleculen. Een artist's impression van enkele moleculen die met behulp van de nieuwe modelbouwset gemaakt en bestudeerd kunnen worden. Afbeelding: Laura Quarto.

Bij het scheikunde-onderwijs op de middelbare school wordt vaak gebruik gemaakt van modelbouwsets, waarin de atomen worden weergegeven door houten of plastic balletjes die je kunt verbinden om moleculen te vormen. Zulke modelbouwsets helpen ons om de

ruimtelijke structuur van moleculen te visualiseren en om te begrijpen hoe ze reageren, maar tussen houten of plastic balletjes vinden natuurlijk geen echte chemische reacties plaats. Het blijkt nu dat die situatie drastisch verandert als we extreem kleine balletjes gebruiken.

Een nieuwe modelbouwset

Hoewel moleculaire modelbouwsets erg nuttig kunnen zijn, ontstaat het grootste deel van onze echte kennis over moleculen op veel indirectere wijze. Die kennis komt bijvoorbeeld van metingen aan het spectrum van de straling die de moleculen absorberen. Zo verschaft een infrarood-spectrum wetenschappers bijvoorbeeld een vingerafdruk van moleculaire trillingen, waaruit ze kunnen afleiden wat de samenstelling en structuur van een molecuul is. *Directe* beelden van moleculen, die rechtstreeks inzicht zouden geven in hun configuratie, zijn door de kleine afmetingen en snelle beweging van de deeltjes echter uitgesloten. Het feit dat alle waarnemingen van moleculen indirect van aard zijn, maakt het voorstellen van de driedimensionale structuur en de reacties tussen moleculen tot een flinke uitdaging.

Die kwestie bewoog natuur- en scheikundigen van de Universiteit van Amsterdam en New York University ertoe om op zoek te gaan naar een manier om de eenvoudige visualisatie van modelbouwsets te combineren met de natuurkunde die een rol speelt op de sub-nanometerschaal van echte moleculen. De wetenschappers slaagden erin om in de Amsterdamse laboratoria "moleculen" te bouwen van kleine plastic balletjes op de micrometerschaal, zogeheten *colloïdale deeltjes*, die geproduceerd werden in de labs in New York. De deeltjes werden zo gemaakt dat ze elkaar alleen in bepaalde richtingen konden aantrekken, waarmee heel precies de hoeken konden worden nagebootst van echte chemische bindingen tussen atomen – hoeken die bepalen hoe atomen zich rangschikken tot moleculen.

De micrometer-deeltjes verenigen inderdaad het beste uit beide werelden: ze zijn klein genoeg om de karakteristieke bewegingen en trillingen na te bootsen die moleculen als gevolg van temperatuur ondervinden, maar zijn ook groot genoeg om onder een gewone microscoop zichtbaar te zijn.

Van atomen naar moleculen

Om bepaalde soorten atomen te imiteren, gebruikten de onderzoekers in Amsterdam technieken die de afgelopen jaren werden ontwikkeld om het oppervlak van de colloïdale deeltjes te voorzien van kleine aantrekkende gebiedjes waar de modelatomen kunnen 'samenklikken'. Het aantal en de configuratie van die gebiedjes bepaalt het soort atoom dat wordt gemodelleerd. Zo maakten de wetenschappers om koolstofatomen na te bootsen bijvoorbeeld deeltjes met vier aantrekkende gebiedjes in een tetraëdervorm, en deeltjes met twee van zulke gebiedjes aan weerskanten, waarmee precies de bindingshoeken van twee bekende toestanden van gebonden koolstofatomen werden gereproduceerd. Bovendien – en op dat gebied stijgt de modelbouwset ver uit boven gewone moleculaire modellen – slaagden ze erin om de interacties tussen de aantrekkende gebiedjes zo in te stellen dat de atomen op precies dezelfde manier bindingen konden vormen en weer konden verbreken als echte atomen dat in scheikundige reacties doen.

De modelbouwset bleek uitstekend te werken. De onderzoekers zagen dat samengebrachte groepjes modelatomen inderdaad de welbekende moleculen uit de koolstofchemie reproduceerden. Onder de microscoop werden "moleculen" zoals butyn en butaan zichtbaar – moleculen waarin de belangrijkste atomen op een lijn liggen. Moleculen met ring-achtige configuraties, die een belangrijke rol spelen in de organische chemie, konden ook worden gemodelleerd: structuren zoals cyclopentaan (een molecuul met een ring van vijf koolstofatomen) en cyclohexaan (met een ring van zes van zulke atomen) werden waargenomen.

Rimpelen en katalyse

Door de relatieve grootte van de modelmoleculen konden de onderzoekers hun vormingsprocessen en interne bewegingen 'live' en in groot detail volgen. Daarmee konden ze verschijnselen zien waarvan alleen op basis van indirecte waarnemingen bekend was dat ze moesten voorkomen. Voor de vijf-atoms ringstructuur van cyclopentaan zagen ze bijvoorbeeld rechtstreeks de "rimpelende" beweging van de onderliggende atomen: de

cyclopentaanring ligt niet vast in één vlak, maar vervormt, waarbij de atomen die de ring vormen het vlak in- en uitbewegen. De reden voor dit gedrag is dat de natuurlijke hoeken tussen de atomen niet overeenkomen met hoeken die nodig zijn om een vlakke ring van vijf atomen te vormen, met als gevolg dat steeds één atoom het vlak uit beweegt. Tot nu toe was dit rimpelgedrag alleen waargenomen met indirecte spectroscopische metingen, maar nu konden de onderzoekers het voor hun ogen zien gebeuren en konden ze alle bewegingen rechtstreeks volgen. Ze zagen dat de flips een collectieve eigenschap zijn: het op- en neerbewegen van één deeltje beïnvloedt de beweging van alle andere deeltjes in de ring.

Bij hetzelfde molecuul konden de wetenschappers vervolgens waarnemen hoe chemische reacties plaatsvinden. Er was zichtbaar hoe de ring zich opende en vastmaakte aan andere moleculen – een effect dat bovendien versterkt kon worden door een aantrekkend oppervlak in de opstelling op te nemen. Dat wil zeggen: het oppervlak werkte als een katalysator, een gegeven dat – ook letterlijk – inzicht gaf in wat er gebeurt tijdens zulke katalytische reacties.

Klein genoeg én groot genoeg

De micrometerschaal van de modelatomen is natuurlijk nog altijd ruim 1000 keer groter dan de sub-nanometerschaal van echte atomen, maar het belangrijke punt is dat de modeldeeltjes klein genoeg zijn om willekeurige thermische bewegingen te ervaren, en dat is wat de chemische reacties veroorzaakt. Zoals Richard Feynman het in zijn beroemde lezingen formuleerde: *“Everything that living things do can be understood in terms of the jiggings and wiggings of atoms”*. Het is precies dit wriemelen en wiebelen, duidelijk zichtbaar als we de colloïdale atomen onder een microscoop bekijken, wat de modelbouwset op de micrometerschaal onderscheidt van de versie die we van de middelbare school kennen.

De modelbouwset is daarmee een heel nuttig instrument om “moleculen” direct in hun natuurlijke omgeving te observeren, en heeft daardoor ook allerlei nuttige toepassingen. Naast het geven van een aantrekkelijke visualisatie van moleculen, leveren de resultaten ook inzicht in de werking van geometrische katalysatoren op moleculaire reacties. Het

beschikbaar zijn van deze nieuwe microscopische bouwstenen opent bovendien een deur naar het ontwerpen van complexe nieuwe materialen, rechtstreeks onder de microscoop, met talloze toepassingen die variëren van kunstmatige weefsels voor bijvoorbeeld medische toepassingen, tot functionele nanostructuren met toepassingen in de technologie.

Publicatie

Revealing pseudorotation and ring-opening reactions in colloidal organic molecules, P. J. M. Swinkels, S. G. Stuij, Z. Gong, H. Jonas, N. Ruffino, B. van der Linden, P. G. Bolhuis, S. Sacanna, S. Woutersen en P. Schall. Nature Communications 2021.