

SYNCHRONE DRAAIING LAAT DIMEER PIEKEN

Geheimzinnige spectra na 20 jaar theoretisch verklaard.

De twee ringen van een benzeendimeer maken synchroon draai-bewegingen om snel van het ene naar het andere energieminimum te komen. En dat is wat via een kwantummechanisch 'tunnelproces' leidt tot de typische pieken in het microgolfspectrum van zo'n dimeer, schrijven de Nijmeegse chemici Gerard Meijer en Ad van der Avoird in *Angewandte Chemie*. De redactie gaf de status van *very important paper* mee aan deze theoretische verklaring waar al 20 jaar vergeefs naar werd gezocht.

Zulke benzeendimeren worden bij elkaar gehouden door vanderwaalskrachten. Daarbij is er een competitie tussen twee conformaties die vrijwel even stabiel zijn: plat op elkaar, of haaks op elkaar in een T-vorm. Als los rondzwevende duomoleculeen zul je ze volgens Van der Avoird niet snel tegenkomen, tenzij je een kunstgreep toepast. "Je vult een celletje met benzeendamp. De ruimte erbuiten pomp je vacuüm. Het gas stroomt door een gaatje van ongeveer 1 mm naar buiten

met supersone snelheid en koelt door de expansie enorm af. Dán krijg je condensatie tot dimeren en trimeren. De bundel kun je goed richten en met

laserspectrometrie kun je er heel mooie beelden van maken."

Dat is de moeite waard, want zo'n dimeer is een prima model voor de interactie van aromaatringen in veel grotere moleculen. "Wanneer een eiwit zich vouwt, heb je ook competitie tussen die twee mogelijke structuren, die biochemici *edge to face* en *stacked* noemen. Om te bepalen welke conformatie het stabielst is, wordt aan het krachtveld gerekend. Maar niemand wist tot nu toe zeker of die berekeningen conform de werkelijkheid waren."

In Nijmegen is nu voor het eerst een theoretisch model ontwikkeld dat de nieuwste, door Duitse collega's opgenomen, spectra exact voorspelt. "Het model dat we 3 jaar geleden bedacht hadden was niet fout, maar erg ingewikkeld", zegt Van der Avoird achteraf. "Dat maakte de computerberekeningen te onnauwkeurig. Ik moest schrappen tot de essentie overbleef. Toen rolden de patronen uit het gemeten spectrum zo uit de berekeningen." (ADIJ) |



Coverillustratie voor *Angewandte Chemie*, met *edge to face*-dimeer.