

Citation:

Levensbericht C.H. MacGillavry, in:
Levensberichten en herdenkingen, 1993, Amsterdam, pp. 53-59

Levensbericht door Aafje Looijenga-Vos

Carolina Henriëtte Mac Gillavry

22 januari 1904 – 9 mei 1993



Carolina Henriëtte MacGillavry

Carolina Henriëtte MacGillavry¹: dochter van Amsterdam, moeder van de Nederlandse kristallografie

Gedurende haar hele leven heeft Carolina MacGillavry de stad Amsterdam als thuisbasis gehad. Daar werd zij op 22 januari 1904 geboren. Lien, zoals zij thuis genoemd werd, was de tweede in een gezin met zes kinderen. Bovendien werd het gezin vaak versterkt door wel vijf neven of nichten uit het voormalige Nederlands-Indië, die in Nederland naar de middelbare school gingen. Boeken, muziek en flitsende tafelgesprekken waren dagelijkse ingrediënten in huize MacGillavry. In de eetzaal stonden twee piano's, die bij het musiceren het vioolspel of de zang van Lien konden begeleiden. Dit leefklimaat wekte een blijvende liefde voor muziek (kwartet spelen op 't lab) en voor literatuur (citatens uit het hoofd). Hoogtepunten van het bruisende familieleven waren de zomervakanties in Nunspeet. Daar werd ook de trouwdag van de ouders gevierd met toneelspel opgezet door de oudste zus Lien.

In deze familie was het heel gewoon, dat jongens en meisjes een hogere opleiding kregen. Na voltooiing van de bèta-opleiding aan het Barlaeus gymnasium ging Lien in 1921 scheikunde studeren aan de Gemeente Universiteit. Boeiend was in die jaren de omwenteling in de natuurwetenschappen teweeggebracht door de ontdekking van de quantummechanica (1925). Als chemisch kandidate maakte Lien deze verandering zeer bewust mee. Zo refereerde zij in 1928 tijdens een colloquium theoretische natuurkunde voor een stomverbaasd gehoor het in 1927 verschenen artikel van Heitler en London over de quantummechanische berekeningen aan het waterstofmolecule. Dit laat zien hoe sterk haar interesse in de fundamentele van de wetenschap toen al was.

Van 1932 tot 1934 was zij assistent van de hoogleraar A. Smits. Daarna viel de keuze op de kristallografie. Gebruik van röntgenanalyse voor de structuurbevestiging van kristallen was toen al een gevestigde methode, ook aan de Gemeente Universiteit van Amsterdam. Dit was vooral te danken aan het in 1919 begonnen pionierswerk van J.M. Bijvoet (die later als hoogleraar in Utrecht een asymmetrisch organisch molecule van zijn spiegelbeeld wist te onderscheiden door toepassing van anomale verstrooiing). Ongetwijfeld heeft Bijvoets inspirerende werk de keuze van Lien beïnvloed. Maar er is meer. 'De orde en regelmaat van kristallen, soms op fraaie wijze onderbroken door "oneffenheden", hun symmetrie en hun vaak sierlijke uiterlijke vorm, zijn fascinerend', zegt zij later. En ook: 'Het voortdurende contact met andere wetenschappen geeft aan de kristallografie een eigen bekoring' (oratie, 1950). Deze brede blik op de

¹ In dit artikel is de ingeburgerde door haar gewenste spelling van de achternaam gebruikt.

kristallografie heeft zij haar leven lang behouden. MacGillavry's oeuvre vertoont dan ook een grote veelzijdigheid.

In 1937 promoveerde zij cum laude op een proefschrift getiteld 'Röntgendiffractie van veelling-kristallen'. Karakteristiek voor dit onderzoek is de kristalstructuur van $\text{Hg}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$. De kleine kubische cel bevat slechts een half molecuule; één Hg-atoom lijkt willekeurig verdeeld te zijn over zes roosterplaatsen. De beschikbare röntgen-poederdiagrammen gaven geen antwoord op de vraag of men te maken heeft met een 'averaged structure' of met een veelling-kristal. Op grond van poederopnamen verkregen bij verschillende temperaturen, werd het laatste het meest waarschijnlijk geacht. Na de promotie vormde een assistentschap bij A.E. van Arkel in Leiden een kort intermezzo.

Reeds in 1936 begon MacGillavry te zamen met haar jong overleden collega H.J. Verweel aan de voor Amsterdam eerste röntgenanalyse van een organische verbinding: barnsteenzuur. Daartoe gebruikten zij als eersten in Nederland de in 1934 door A.L. Patterson ontdekte $|F|^2$ -functie. De berekening van deze functie door sommatie van een groot aantal vlakke cosinusgolven, die rechtstreeks uit het diffractiepatroon van het kristal af te leiden zijn, gebeurde in die tijd moeizaam met behulp van een tabellenboek van goniometrische functies en een rekenliniaal. Er werd dan ook slechts één projectie beschouwd. Gewapend met de kennis dat het 'Patterson-diagram' de vectoriële afstanden tussen de atomen in de structuur representeert, met toenemend gewicht voor toenemende zwaarte van de betrokken atomen, kon met behulp van modelbouw na veel proberen de structuur gevonden worden. MacGillavry hield van dit puzzelwerk en zij raakte er ongelooflijk bedreven in. Rond 1952 konden er – dank zij het gebruik van IBM-telmachines en de verbeterde meetapparatuur – gelukkig driedimensionale Patterson- en Fourier-diagrammen berekend worden.

In 1939 werd een heel ander probleem aangepakt: de verklaring van de fijnstructuur in het diffractiepatroon, waargenomen bij de doorstraling met elektronen van een dun plaatje mica. Dit als vervolg op een colloquium over Bethe's dynamische theorie voor elektronendiffractie. In deze theorie werkt het kristalveld niet alleen in op de primaire bundel (de benadering van de 'kinematische' theorie), maar ook op de afgebogen bundels. In tegenstelling tot vroegere onderzoekers die de kinematische benadering hadden gehanteerd, lukte het MacGillavry voor de beschouwde reflecties de fijnstructuur van de afbuigingsrichtingen te verklaren en hieruit tevens de grootte van de celverstrooiing te berekenen. Deze scherpzinnige analyse wekte grote bewondering en ontlokte Bijvoet de opmerking, dat de leerling haar leermeester in luttele jaren boven 't hoofd was gegroeid.

Nadat Bijvoet in 1939 hoogleraar in Utrecht geworden was, aanvaardde MacGillavry de verantwoordelijkheid voor de kristallografie in Amsterdam, eerst in de functie van assistent, daarna als conservator (1941), lector Kristallografie

(1946), hoogleraar Chemische Kristallografie (1950) en vanaf 1961 tevens als directeur van het toen zelfstandig geworden 'Laboratorium voor Kristallografie'. Zij zet vroeger onderzoek voort en ontgint nieuwe research gebieden. Het onderzoek aan barnsteen zuur werd al spoedig uitgebreid met de structuur-bepalingen van nog enkele α, ω -alkaandicarbonzuren $\text{COOH}(-\text{CH}_2)_n-\text{COOH}$. Dit resulteerde in de verklaring van de alternering in fysische eigenschappen, zoals smeltpunt en oplosbaarheid, bij toenemende n : de torsie die de pakking van de carboxylgroepen aan de oneven ketens oplegt, geeft deze ketens een relatief grote energie-inhoud. Ook op het gebied van de anorganische chemie werden in de jaren veertig belangrijke successen geboekt. Bij voorbeeld bij de zuuranhydriden. Deze stoffen komen vaak voor in verschillende kristalvormen met uiteenlopende fysische en soms zelfs chemische eigenschappen. Soms is het verschil in eigenschappen uit de gevonden kristalstructuren af te lezen. Zo bestaat, bij voorbeeld, de hygroscopische modificatie van fosforpentoxide P_2O_5 uit moleculen P_4O_{10} in onderling losse samenhang. Een andere veel beter tegen water bestendige modificatie bevat daarentegen een ruimtelijk netwerk waarin P- en O-atomen door het gehele kristal heen met elkaar verbonden zijn. Na 1942 verschenen er tevens publikaties die niet direct een structuurbevestiging beogen, zoals: discontinuïteiten in de ondergrondzwaarting van Weissenberg-opnamen; bepaling van ordeparameters; bepaling van de statistiek der atoomafstanden voor een vezelstructuur.

Een bijzondere gebeurtenis was haar verblijf in de Verenigde Staten van juli 1948 tot juli 1949: in 1948 met een UNESCO-Am. Chem. Soc. stipendium bij o.a. B.E. Warren (MIT, Cambridge, MA); in 1949 als 'research associate' bij Ray Pepinsky (Alabama Polytechnic Institute, Auburn, AL), met als hoogtepunt de voltooiing van zijn snelle analogon Fourier-synthese machine X-RAC. Direct na aankomst bezocht zij het eerste congres van de pas opgerichte 'International Union of Crystallography' in Cambridge, MA. In een persoonlijk memo uit 1985 vertelt zij hoe geweldig het was om – als enige vertegenwoordiger van Nederland – dit congres bij te wonen en daar Patterson, de uitvinder van de $|F|^2$ -functie (!), en vele andere vooraanstaande kristallografen te ontmoeten. Zelf werd zij direct bij het werk ingeschakeld als lid van de Commissie voor de 'International Tables for X-Ray Crystallography' met als speciale taak te zamen met G.D. Rieck het deel 'Physical and Chemical Tables' te redigeren. Dit standaardwerk is in 1962 gereed gekomen. In samenwerking met het Mathematisch Centrum werd voor een groot aantal atomen het verstrooiend vermogen opnieuw berekend op grond van het Hartree atoommodel. In 1965 verscheen – opnieuw op verzoek van de 'International Union' – haar monografie 'Symmetry Aspects of M.C. Escher's Periodic Drawings', een prachtige synthese van kunst, wetenschap en didactiek.

Nog een ervaring uit die Amerikaanse periode is vermeldenswaard. Het voor de röntgenanalyse van kristallen fundamentele faseprobleem had al jarenlang haar interesse. Nu proefde zij de opwinding over de mogelijkheden die een wiskundige

aanpak van het probleem zou kunnen bieden. Juist voor haar komst had men de beschikking gekregen over de Harker-Kasper ongelijkheden: relaties tussen amplituden en fasen van structuurfactoren waaruit in gunstige gevallen de niet direct te meten fasen te bepalen zijn. In een elegante groepentheoretische afleiding liet MacGillavry zien hoe deze ongelijkheden voor een kristal van willekeurige symmetrie gemakkelijk op te stellen zijn. Daarbij merkte zij op wat de basis is van de ongelijkheden: de elektronendichtheid in het kristal is nergens negatief! Tijdens een congres in Ann Arbor, MI, in het voorjaar van 1949 bleek dat de latere Nobel-prijswinnaars Hauptman en Karle deze eigenschap ook hadden opgemerkt en tot een serie algemene ongelijkheden hadden getransformeerd. De verdere uitwerking van deze relaties die na de komst van snelle computers tot automatisering van veel structuurbepalingen heeft geleid, heeft MacGillavry voornamelijk aan haar medewerkers overgelaten.

Na 1950 werd het structuuronderzoek gedomineerd door de bestudering van vitamine A en verwante verbindingen, met het oog op hun grote fysiologische betekenis, o.a. voor het proces van het zien. Het doel was de karakteristieke kenmerken van de ruimtelijke structuur van de individuele moleculen op te sporen. Deze kenmerken worden niet door een veranderende kristalpakking beïnvloed. Zij werden gevonden door van een tiental aan vitamine A verwante verbindingen (het vitamine zelf was hiervoor helaas niet geschikt) de kristalstructuur op te helderen. Uiteraard vormt dit soort gegevens slechts een eerste stap op de lange weg naar het begrijpen van de werking van de beschouwde verbindingen.

Onder de inspirerende leiding van MacGillavry werden 28 dissertaties voltooid. De lijst van titels (met namen van promovendi) in een door Bijvoet bij haar emeritering geschreven artikel (Chem. Weekbl. (1972) 68, 12-14), laat de rijke schakering van de onderwerpen zien.

Haar school kenmerkte zich door het speelse element en de intuïtieve benadering bij de interpretatie van diffractiepatronen en Patterson-diagrammen. Vaak werkten er buitenlandse onderzoekers in het laboratorium. Anderzijds gingen verschillende Amsterdammers na hun promotie voor kortere of langere tijd naar de Verenigde Staten. Sommigen bleven daar voorgoed. Eén van de leerlingen beschrijft de groep als een gezellige werkfamilie, compleet met poes, waarin niet alleen wetenschappelijke problemen maar ook menselijke contacten een grote rol speelden. De heer A. Kreuger die gedurende 40 jaar, eerst bij Bijvoet en later bij MacGillavry, op zijn unieke wijze betrokken was bij de praktische uitvoering van de experimenten zegt in 1972: 'De nu in de mode zijnde democratie aan de universiteiten, was in onze groep al die jaren al heel gewoon. Onze boterham werd gezamenlijk met "de baas" aan één tafel gegeten en de gesprekken waren interessant en veelzijdig. Aan deze tafel vooral bleek mij de ongelooflijk scherpe geest en de veelzijdigheid van deze vrouw.' Deze

veelzijdigheid uitte zich ook in populariserende voordrachten en artikelen waarin aan niet-kristallografen de bekoring van het vak werd getoond.

MacGillavry heeft in verschillende wetenschappelijke organisaties een stimulerende rol gespeeld. Zij was o.m. lid van het 'Executive Committee' van de 'International Union of Crystallography' (1954-1960), algemeen secretaris (1961-1974) en penningmeester (1961-1970) van de Akademie, secretaris (1961-1974) en penningmeester (1961-1969) van de Afdeling Natuurkunde, voorzitter van de thans niet meer bestaande Vrije Sectie (1952-1966), mede-oprichter (1972) van de 'International Foundation for Science' waarin zij de Akademie jarenlang vertegenwoordigde, en tenslotte lange tijd lid van het bestuur van de in 1948 opgerichte stichting FOMRE (Fundamenteel Onderzoek der Materie met Röntgen- en Elektronenstralen). Op een enigszins ander vlak lag haar voorzitterschap omstreeks 1960 van het 'Committee for the Award of International Fellowships' van de 'International Federation of University Women', waar beursaanvragen uit alpha-, bèta- en gammavakgebieden worden beoordeeld. Verder was zij als voorzitter van een Medisch-opvoedkundig bureau jarenlang zodanig actief, dat zij in de jaren zestig werd benoemd tot erelid van de Amsterdamse Vereniging tot Oprichting en Instandhouding van Medisch-opvoedkundige Bureaux.

In 1972 sloot zij haar officiële loopbaan af met het afscheidscollege 'Verantwoording'. Daarin karakteriseert zij haar bijdrage tot de wetenschap heel bescheiden als 'hier en daar een kleine grenscorrectie', in vergelijking met de grensverlegging door de geboorte van de quantummechanica in 1925. In de kristallografie heeft zij een voortrekkersrol gespeeld. Niet alleen door haar onderzoek, maar ook door de inspirerende wijze waarop zij leerlingen en vakgenoten heeft laten profiteren van haar inventiviteit en grote kennis. De talrijke vriendschappen die daarbij ontstonden, hebben blijkens het afscheidscollege veel voor haar betekend.

In de jaren die volgden heeft Carolien MacGillavry veel genoten van haar privé-leven met dr. Han Nieuwenhuijsen, die van 1968 tot zijn dood in 1982 haar levensgezel is geweest. Behalve het hoogleraarschap gingen alle activiteiten gewoon door. Ook het schrijven van publikaties, de laatste verscheen in 1988. Groot was haar lezing 'Order and Beauty' bij de opening van het tiende internationale congres van de 'International Union of Crystallography' te Amsterdam (1975), later bewerkt tot 'Orde en schoonheid: een kristallograaf kijkt naar Nederland' (Chem. Weekbl. (1977) 73, m65-m67). De rol van symmetrie in de wereld om ons heen bleef haar boeien. Daarvan getuigen talrijke voordrachten, zoals 'Symmetry in the three Kingdoms: animal, vegetable, mineral' uit 1977 en de lezing 'Hidden Symmetry', die zij nog op 81-jarige leeftijd tijdens het 'M.C. Escher Congress' te Rome heeft gehouden.

De eerste erkenning kreeg MacGillavry van onze Akademie, die haar in 1950 als eerste vrouw tot lid benoemde. En zij was een actief lid! Behalve van haar

bestuurlijke activiteiten hebben wij 40 jaar lang mogen profiteren van haar waardevolle bijdragen aan de discussies in de Afdeling Natuurkunde. Verdere onderscheidingen volgden: Ridder in de Orde van de Nederlandse Leeuw (1966), lid van de Deutsche Akademie der Naturforscher 'Leopoldina' te Halle a.d. Saale (1969), erelid van de Koninklijke Nederlandse Chemische Vereniging (1973). De Nederlandse Vereniging voor Kristallografie was gelukkig net op tijd opgericht om haar in december 1989 tijdens het 'Carolina MacGillavry symposium' tot erelid van haar 'eigen wetenschappelijke familie' te benoemen.

Na deze feestelijke gebeurtenis nam het vermogen om mee te leven met de wereld om haar heen, langzamerhand af. Zij overleed op 9 mei 1993 in haar stad Amsterdam. Haar naam zal voortleven in het 'Carolina H. MacGillavry stipendium' van de stichting voor 'Crystallographic Studies' en in de stipendia die zullen voortvloeien uit het vermogen dat zij aan de Akademie heeft nagelaten.

Zij die haar gekend hebben, gedenken met dankbaarheid hoe zij met haar veelzijdige gaven velen heeft verrijkt en geholpen, en hoe zij bij bijzondere gebeurtenissen met je meeleeftde.

Dankbetuiging: dr. Beatrix Koch heeft onmisbare hulp geboden bij het verkrijgen van de (biografische) gegevens en de foto, prof. dr. H.J. MacGillavry en zijn vrouw vertelden familieverhalen, prof. dr. H. Schenk verstreekte literatuur en medewerkers van de Akademie raadpleegden oude jaarboeken.

