

AK ChemKrist

Dieses Jahr fand Ende März die 27. Jahrestagung der deutschen kristallographischen Gesellschaft an der Universität Leipzig statt. Unter all diesen Wissenschaftlern verschiedener Fachrichtungen befanden sich auch mehr als 30 junge Kristallographen, die sich in den Anfangsjahren ihrer Karriere befinden. In kurzen Vorträgen hatten sie die Möglichkeit, ihre Arbeiten vorzustellen, bevor sie in einer Postersession diskutiert wurden.

2019 ist das Jahr, indem die Anzahl der organischen und metallorganischen Kristallstrukturen in der Cambridge Structural Database (CSD) die „1.000.000“ Schwelle überschritten hat. Die Größe der Datenbank erlaubt es, komplexe Analysen der hinterlegten Daten durchzuführen. Doch nahezu alle Daten in der CSD basieren auf Röntgenbeugungsuntersuchungen von geeigneten ausreichend großen einkristallinen Substanzen. Hier setzt eine bemerkenswerte innovative Entwicklung an. Durch Kombination von geeigneten Detektoren und Transmissionselektronenmikroskop ist es inzwischen möglich, mittels Elektronenbeugung atomare Strukturen von nanoskaligen Festkörpern zu bestimmen.

Vom 18.09.2019 bis zum 20.09.2019 fand in Aachen der Workshop „Tipps und Tricks für SHELX“ statt, der vom AK6 Molekülverbindungen der DGK gemeinsam mit dem AK ChemKrist der GDCh veranstaltet wurde. Am Institut für Anorganische Chemie der RWTH begrüßten Iris Oppelt im Namen des AK ChemKrist und Ulli Englert für die DGK 41 Teilnehmende aus dem In- und Ausland und aus den verschiedensten wissenschaftlichen Karrierestadien – von Studierenden, Promovierenden bis hin zu langjährigen SHELX-Nutzern.



Bei Kaffee und Kuchen wurde zuallererst die Software auf den neuesten Stand gebracht, um anschließend unmittelbar in die Materie einzutauchen. Michael Bolte aus Frankfurt gab einen Abriss über die

Verwendung von Constraints und Restraints. Daniel Kratzert (Freiburg) erklärte, wie man mit dem DSR-Programm knifflige und extensive Fehlernungen sehr elegant und effizient modellieren kann. Zu guter Letzt zeigte Regine Herbst-Irmer (Göttingen), wie man am besten am Zwillingproblematiken herangehen sollte, ohne verzweifeln zu müssen. Zu jeden der vorgestellten Themenblöcke gab es eine Vielzahl von Beispielen, die individuell gelöst werden konnten. Dabei standen die Fachleute stets engagiert mit Rat und Tat zur Seite. Außerdem gab es genügend Zeit, um selbst mitgebrachte Problemstrukturen gemeinsam mit den Spezialisten zu diskutieren. Zudem konnten sich die Teilnehmenden über neueste Diffraktometertechnik der Firma Stoe (Jens Meyer), aktuelle Softwareimplementierungen zu asphärischen Verfeinerungsmodellen bei Bruker AXS (Holger Ott) sowie zu derzeitigen und zukünftigen Entwicklungen bei Merck (Carolina v. Eßen) zur effizienten Anwendung der Crystal Sponge Methode informieren.

Dank der DGK, der GDCh sowie der Stadtparkasse Aachen für die finanzielle Unterstützung konnte der Workshop erfolgreich gestaltet werden. Ebenso gilt unser Dank den Firmen Stoe, Bruker AXS und Merck, die zusätzlich für das leibliche Wohl in entspannter Atmosphäre sorgte.

*Alexander Pöthig München AK6, DFG & Klaus Merz
Bochum AK ChemKrist*