

Arbeitskreis Chemische Kristallographie Jahresbericht 2023

Im Jahr 2023 fand die "26th Conference and General Assembly of the International Union of Crystallography" in Melbourne statt. Im Bereich der chemischen Kristallographie lagen die Schwerpunkte erneut auf den Gebieten der Elektronenbeugung und der Quantenkristallographie. Letztere war sogar mit einem Plenarvortrag von Prof. Dr. Mark Spackman, dem Hauptentwickler der Software „CrystalExplorer“, vertreten. Die wachsende Bedeutung der Elektronenbeugung zeigt sich darin, dass im vergangenen Jahr zwei regionale bzw. nationale Zentren für Elektronenbeugung eröffnet wurden, zum einen am "Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)" in Tarragona/ Katalonien, zum anderen die "National Electron Diffraction Facility (NEDF)" mit Standorten in Southampton und Warwick.

Der vom AK ChemKrist ausgestaltete 1. Munich Crystallography Workshop (MCW) fand erfolgreich vom 7. bis 10. August 2023 am TUM Catalysis Research Center in Garching statt. Die viertägige Veranstaltung bot ein intensives Programm aus Seminaren, praktischen Übungen und Poster-Sessions für 50 internationale Studierende und Forschende. Die Teilnehmenden hatten die Möglichkeit, ihre individuellen Herausforderungen zu präsentieren und mit Expert*innen zu interagieren, um Vorschläge für das weitere Vorgehen zu erhalten. Tatsächlich wurden viele Probleme direkt während des Workshops gelöst. Darüber hinaus konnte verschiedene Software für die Datenreduktion und Strukturverfeinerung getestet werden, insbesondere für schwierige Fälle, die eine Verzwilligung oder Unordnung beinhalten. Der AK ChemKrist möchte allen Teilnehmenden und Sponsoren für ihren Beitrag zum Erfolg des 1. MCW danken. Der nächste geplante Workshop soll im Jahr 2025 stattfinden.

Für das Jahr 2024 plant der AK ChemKrist die erstmalige Durchführung eines Doktorandenseminars, das voraussichtlich in der letzten Septemberwoche in Regensburg stattfinden wird.

