

AK ChemKrist

Nachdem 2014 im Internationalen Jahr der Kristallographie das Forschungsgebiet eine Vielzahl an Veranstaltungen und Aktivitäten verzeichnen konnte, stand dieses Jahr eher unter dem Aspekt des Rückblicks und der Konsolidierung. Der Kristallzucht Wettbewerb der benachbarten wissenschaftlichen Gesellschaften DGK und DGKK fand mit der Prämierung der schönsten Alaun-Kristalle seinen Abschluss und das IYCr wurde mit einer internationalen Tagung in Rabat, Marokko, die den Titel „Crystallography for the next generation: the legacy of IYCr“ trug, Ende April 2015 einerseits abgeschlossen und andererseits auf die zukünftigen Herausforderungen ausgerichtet. Die vermutlich besten Aussichten für die Kristallographie liegen in einer soliden Ausbildung des Nachwuchses und hier bieten vor allem die Schwellenländer das größte Potential. Initiativen in Nord- und Südafrika haben zu ersten Aktivitäten in Zentralafrika geführt. Mit Unterstützung der Gerätehersteller fanden OpenLabs in Ghana und im Senegal statt.

Für den AK ChemKrist war 2015 die wichtigste Veranstaltung der ChemKrist-Workshop „Pulverdiffraktometrie für organische Verbindungen“. Der Workshop vom 6. bis 8. Oktober wurde von Martin Schmidt und Norbert Nagel an der Goethe Universität Frankfurt organisiert. Von Dienstag- bis Donnerstagmittag fanden zahlreiche Vorträge zu den Möglichkeiten der

Strukturuntersuchung und –aufklärung organischer Verbindungen mittels Pulverdiffraktometrie statt. Nachdem der erste Nachmittag eine Einführung in die Methoden, einschließlich *ab-initio* Strukturlösung und Rietveldverfeinerung umfasste, widmeten sich die nächsten eineinhalb Tage konkreten Anwendungsbeispielen, Erfahrungsberichten aus der Industrie, der Bestimmung der Paarverteilungsfunktion zur Beschreibung der Nahordnung in kristallinen und amorphen Feststoffen, sowie der Kristallstrukturvorhersage. Mittwochabend gab es ein geselliges Beisammensein bei Ebbelwoi und typischen frankfurter Gerichten.

Eingerahmt wurde der ChemKrist-Workshop von zwei weiteren kristallographischen Veranstaltungen. Die Cambridge Structural Database veranstaltete am gleichen Ort von Sonntagnachmittag bis Montagmittag einen Workshop zu den verschiedenen Programmen zur Recherche in der Kristallstrukturdatenbank, zur statistischen Analyse und zur graphischen Darstellung von Strukturen. Das Treffen der Industriekristallographen fand dann am 8. und 9. Oktober auf Einladung von Sanofi-Aventis im Chemiepark Höchst statt.

Im nächsten Jahr wird der neunte „Intensivkurs zu den Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ vom 19. bis 23. September im ehemaligen Zisterzienserkloster Hardehausen stattfinden.

Abschließend kann noch etwas Erfreuliches zum Stand

der Dinge an der Chemical Crystallography Beamline P24 am Speicherring Petra III beim DESY in Hamburg berichtet werden. Das Erweiterungsgebäude Halle Ost ist weitgehend fertiggestellt und die Strahlführungskomponenten werden derzeit zusammengebaut. Der Zeitplan sieht vor, dass im Sommer 2016 die ersten Tests mit Strahl durchgeführt werden können. Ab Herbst soll dann der Nutzerbetrieb aufgenommen werden.

*Christian W. Lehmann,
Mülheim an der Ruhr*