

## AK ChemKrist

In diesem Jahr hat der Arbeitskreis Chemische Kristallographie sich mit einem Mikrosymposium an der analytica Conference beteiligt und erneut den erfolgreichen Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ durchgeführt. Zentrale Themen der weiteren Vorstandsarbeit waren die Neuwahl des Vorstands und die Vorbereitung der ChemKrist-Tagung 2013.

Anlässlich der analytica Conference, die vom 01. bis 03.04. in München stattfand hat der Arbeitskreis ein Mikrosymposium mit dem Titel „Pulverdiffraktometrie in der Pharmaindustrie“ organisiert. In der pharmazeutischen Industrie begleitet die Kristallographie an mehreren Stellen, von der Wirkstoffforschung bis zur Qualitätssicherung, den Lebenszyklus eines Medikaments. In vier sehr informativen Beiträgen wurde die Rolle der Kristallographie, insbesondere der Pulverdiffraktometrie in den verschiedenen Stadien hervorgehoben. Die Aufdeckung gefälschter Medikamente und life-style Produkte durch ein neuartiges Beugungsverfahren hat auch in den Medien Resonanz gefunden. Näheres findet sich im Mitteilungsblatt 3/2012 auf Seite 14.

Vom 10. bis 14. September versammelten sich zum nunmehr siebten Mal 36 Teilnehmer und sechs Dozenten im Kloster Hardehausen, um in die Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse eingeweiht

zu werden. Erneut wurde großer Wert auf die Bearbeitung von Übungsaufgaben in kleinen Gruppen gelegt, wobei in erster Linie Papier und Bleistift das Handwerkzeug waren. Ganz bewusst wird auf das computergestützte Bearbeiten von Problemstrukturen verzichtet, da die universitäre Ausbildung von Chemieabsolventen nur noch vereinzelt die Grundlagen von Symmetrie, Beugung und Strukturaufklärung beinhaltet, während gleichzeitig der wissenschaftliche Nachwuchs die Kristallstrukturanalyse vermehrt als black-box Verfahren anwenden muss.

Noch 2011 und zwar am 25. November fand der bereits letztes Jahr angekündigte Workshop zur ChemCryst-Beamline an der Synchrotronquelle Petra III.14 statt. Vordringliches Anliegen des Workshops war es die Bedürfnisse der chemisch präparativ ausgerichteten Forschungsgruppen mit der Arbeitsweise einer Großforschungseinrichtung wie dem Deutschen Elektronensynchrotron (DESY) in Einklang zu bringen. Nachdem am Vormittag die Mitglieder des bmbf-Verbunds jeweils über den Stand Ihrer Projekte berichtet hatten, war der Nachmittag dem Gedankenaustausch zwischen potentiellen Nutzern und Betreibern gewidmet. Edgar Weckert, Direktor Photonscience des DESY sprach zum Thema Hochleistungssynchrotronquellen im Nutzerbetrieb, anschließend verglich Peter Luger (FU Berlin) die Struktur- und Elektronendichteforschung an

verschiedenen Synchrotronbeamlines aus der Sicht eines Nutzers. Dave Allan von der Diamond Light Source in England beschrieb eindrucksvoll den Aufbau und Betrieb der dedizierten „Small Molecule Crystallography“-Beamline I19, bevor Rhett Kempe (Univ. Bayreuth) mit seinem Vortrag „Metall-Metall-Bindungen – Grenzen der Kristallstrukturbestimmung“ den Bedarf der präparativ arbeitenden Chemiker an einer dedizierten Beamline illustrierte. Vor der abschließenden Diskussionsrunde stellte der Autor ein Konzept für „Rapid-Access and Mail-In“ Servicekristallographie vor. Dieses neue Konzept soll kurzfristigen Zugang zu Messzeit ermöglichen und darüber hinaus auch einen reinen Datensammlungsservice zur Verfügung stellen.

Im nächsten Jahr wird der Arbeitskreis den "ChemKrist-Workshop Aachen-Mülheim 2013 - Absolute Struktur und Verzwilligung" vom 25. bis 27. Sept. veranstalten. Iris Oppel und Ulli Englert (beide RWTH Aachen) haben ein attraktives Programm zu einem aktuellen Themenkomplex der Einkristallstrukturanalyse zusammengestellt, unter anderem werden Ton Spek (Utrecht), Simon Parsons (Edinburgh) und Howard Flack (Genf) sprechen. Die Mitglieder des Arbeitskreises und alle interessierten laden wir bereits jetzt sehr herzlich ein.

*Christian W. Lehmann,  
Mülheim an der Ruhr*