

AK ChemKrist

Turnusmäßig fand die Neuwahl des Vorstands statt; Ulli Englert, Christian Lehmann, Norbert Nagel und Iris Oppel wurden wiedergewählt. Der Vorstand hat Christian Lehmann als Vorsitzenden bestimmt. Inhaltlich war die Vorstandsarbeit von der Vorbereitung und Durchführung des "ChemKrist-Workshop Aachen-Mülheim 2013 - Absolute Struktur und Verzwilligung" geprägt. Vom 25. bis 27. Sept. versammelten sich knapp 70 Teilnehmer im Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr, um dem hochkarätigen Programm, das Iris Oppel und Ulli Englert (beide RWTH Aachen) zusammengestellt hatten, zu folgen. Ton Spek (Utrecht), Simon Parsons (Edinburgh) und Howard Flack (Genf) behandelten sehr anschaulich die Grundlagen und Implementierung der Bestimmung der absoluten Struktur. Auch 50 Jahre nach dem wegweisenden Experiment von Bijvoet ist die Einkristallstrukturanalyse enantiomerenreiner Verbindungen die zu-

verlässigste Methode zur Bestimmung der absoluten Konfiguration von chiralen Molekülen. Aktuelle Herausforderungen betreffen Moleküle, die nur aus „Leichtatomen“, gemeint sind Atome mit $Z < 15$, bestehen. Weitere Vorträge aus Industrie und Forschung beschäftigten sich mit der praktischen Anwendung der Thematik im Laboralltag. Insbesondere in der pharmazeutischen Industrie ist die Fragestellung nach der absoluten Konfiguration auch im Hinblick auf GLP und GMP von großer Bedeutung. Vorträge aus dem Kreis der Gerätehersteller rundeten die Tagung ab.

Die Reihe der Industriekristallographentreffen fand nach 2011 in Mülheim, 2013 ebenfalls eine Fortsetzung. Michael Gruß von der Firma Grünenthal war vom 20. bis 21. Juni der Gastgeber in Aachen. Neben Fachvorträgen zur Kristallisation, zur Strukturbestimmung aus Pulverbeugungsdaten und zur Festkörper NMR gab es einen regen Gedankenaustausch und eine sehr interessante Führung durch die

Forschungslabore.

Die Planung und der Bau der ChemCryst-Beamline (P24) an der Synchrotronquelle Petra III.14 am Deutschen Elektronensynchrotron (DESY) sind weiter fortgeschritten. Unter dem Stichwort *petra3-extension* finden sich auf den DESY-Webseiten aktuelle Unterlagen zur Beamline. Pilotstudien an der Proteinbeamline haben bestätigt, dass hochwertige Datensätze von Kristallen mit wenigen 10 μm Kantenlänge in einigen Minuten erhalten werden. Ende 2015 sollte die ChemCryst-Beamline für interessierte Nutzer zur Verfügung stehen.

Der Ausblick 2014 muss auf das Internationale Jahr der Kristallographie (IYCr2014) gerichtet sein. Weltweit bereiten nationale und internationale Organisationen Aktivitäten vor, um alle Aspekte der Kristallographie in der Öffentlichkeit und in den Nachbardisziplinen publik zu machen. Neben den koordinierten Aktivitäten werden aber vor allem lokale Initiativen (öffentliche Vorträge, Schulprojekte) für umfassende Verbreitung sorgen. ChemKrist wird erneut den erfolgreichen Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ durchführen und zwar vom 15.09. - 19.09.2014 im Kloster Hardehausen..



Photo: Gombert

*Christian W. Lehmann,
Mülheim an der Ruhr*