



## **Jahresbericht 2011**

### **AK ChemKrist**

Der Arbeitskreis Chemische Kristallographie hat sich 2011 auf den Wissensaustausch zwischen Kristallographie und Chemie konzentriert. Die Aktivitäten waren einerseits in das WiFo Bremen integriert, andererseits ist ein Workshop zur ChemCryst-Beamline der Synchrotronquelle Petra III.14 in Vorbereitung.

Am Wissenschaftsforum Chemie hat sich der Arbeitskreis mit einem eigenen, ganztägigen Mikrosymposium beteiligt. Im Congress Centrum Bremen trafen sich am letzten Tag Chemiker und Kristallographen, um über die Fortschritte der experimentellen Elektronendichtebestimmung zu berichten und zu diskutieren. Nach der Begrüßung durch den Vorsitzenden des Arbeitskreises, berichtete Prof. Dietmar Stalke (Göttingen) über die Arbeit des von ihm koordinierten DFG-Schwerpunktprogramms. Prof. Bo Iversen von der Universität Aarhus konnte anschließend in einem keynote-Vortrag über die Elektronendichtebestimmung von thermoelektrischen Materialien sowie Multipolverfeinerungen von Pulverdaten berichten. Die weiteren Vorträge des Tages behandelten dann die Thematik der experimentellen Elektronendichte auf so unterschiedlichen Gebieten wie Life Sciences, Übergangsmetallkomplexe und Metallorganische Chemie. Des Weiteren wurden zeitaufgelöste Untersuchungen von Elektronendichtefluktuationen in elektrischen Wechselfelder und methodische Entwicklungen der Datenanalyse und -auswertung vorgestellt. Die insgesamt 13 Vorträge und 16 Poster vermittelten einen sehr guten Überblick über den Stand der Forschung in diesem, zwischen Chemie, Physik, Biologie und Materialwissenschaften angesiedelten Gebiet.

Von besonderem Interesse für die chemische Kristallographie dürfte die in der Planungsendphase befindliche ChemCryst-Beamline in Hamburg sein. Im Rahmen der Erweiterung der Synchrotronquelle Petra III.14 wird ab 2014 eine dedizierte Beamline für chemische Kristallographie zur Verfügung stehen. Ein hochintensiver Röntgenstrahl wird die routinemäßige Strukturbestimmung von Molekülverbindungen erlauben, deren Kristalle auch nach intensiven Bemühungen nicht für Laborquellen, inklusive Drehanoden und Spiegeloptiken, geeignet sind. Der experimentelle Aufbau und die dazugehörige Infrastruktur sollen vor allem auch auf luft- und thermisch empfindliche Proben ausgerichtet sein und dem gelegentlichen Nutzer gleichermaßen wie dem Experten zur Verfügung stehen. Ein Anliegen des Workshops ist es die Bedürfnisse der chemisch präparativ ausgerichteten Forschungsgruppen mit der Arbeitsweise einer Großforschungseinrichtung wie dem Deutschen Elektronensynchrotron (DESY) in Einklang zu bringen. Die exzellenten Eigenschaften des Synchrotronstrahls, neben der hohen Intensität vor allem die variable Wellenlänge, geringe Divergenz und gepulste Zeitstruktur, werden es aber auch erlauben an dieser neuen Beamline Elektronendichtebestimmungen und zeitaufgelöste Photokristallographie durchzuführen, sowie topochemische Reaktionen zu untersuchen.

Im nächsten Jahr veranstaltet der Arbeitskreis den nunmehr 7. Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ im Kloster Hardehausen vom 10. bis 14. September. Näheres findet sich auf der ChemKrist-Homepage, die ersten Anmeldungen sind bereits eingetroffen.

*Christian W. Lehmann,  
Mülheim an der Ruhr*