

# Kristallographie und Chemie – eine fruchtbare Liaison

Gautam R. Desiraju\*



Gautam R. Desiraju  
Professor für Chemie, Solid  
State and Structural Chemistry  
Unit, Indian Institute of Science  
Präsident der International  
Union of Crystallography

Die Kristallographie ist so alt wie die Chemie selbst. Als intellektuelles Bestreben ist sie nahezu ohnegleichen, so dass Johann Wolfgang von Goethe, der sich auch mit Mineralogie befasste, fast bedauernd, womöglich leicht abschätzigt feststellte: „Die Kristallographie, als



Wissenschaft betrachtet, gibt zu ganz eignen Ansichten Anlass. Sie ist nicht produktiv, sie ist nur sie selbst und hat keine Folgen, besonders nunmehr, da man so manche isomorphe Körper angetroffen hat, die sich ihrem Gehalte nach ganz verschieden erweisen. Da sie eigentlich nirgends anwendbar ist, so hat sie sich in dem hohen Grade in sich selbst ausgebildet. Sie gibt dem Geist eine gewisse beschränkte Befriedigung und ist in ihren Einzelheiten so manigfaltig, dass man sie unerschöpflich nennen kann, deswegen sie auch vorzügliche Menschen so entschieden und lange an sich festhält.“ Man ist versucht zu fragen, ob unerschöpfliches Detail wirklich auf vorzügliche Menschen eine endlose Faszination ausüben kann. Goethe unterstreicht dann den introvertierten Geist dieses Gebiets mit folgenden Worten: „Etwas Mönchisch-Hagestolzenartiges hat die Kristallographie und ist daher sich selbst genug. Von praktischer Lebenseinwirkung ist

sie nicht: Denn die köstlichsten Erzeugnisse ihres Gebiets, die kristallinen Edelsteine, müssen erst zugeschliffen werden, ehe wir unsere Frauen damit schmücken können.“ Zur Chemie dagegen meinte er großzügiger: „Ganz das Entgegengesetzte ist von der Chemie zu sagen, welche von der ausgebreiteten Anwendung und von dem grenzenlosesten Einfluss aufs Leben sich erweist.“<sup>[\*\*]</sup> Der Gegensatz zwischen den statischen Kristallen und der chemischen Dynamik dominiert immer noch das Bewusstsein von Chemikern, obwohl Kristallographie und Chemie in vielen Bereichen verschmolzen und kaum noch zu unterscheiden sind.

In den 200 Jahren seit Goethe – vor allem seit der Entdeckung von Max von Laue im letzten Jahrhundert, dass Strahlung von Kristallen abgelenkt wird, und der Entwicklung von Methoden, um die innere Struktur von Materie zu bestimmen, – sind wir ein ganzes Stück vorangekommen. Die Fähigkeit, den Aufbau von Materie auf atomarem und molekularem Niveau abzubilden, wirkte tiefgreifend auf Chemie und Biologie. In diesem Essay sei die Beziehung zwischen der Kristallographie und der Chemie diskutiert. Lawrence Bragg wurde zu Beginn seiner Karriere dafür kritisiert, dass er versuchte, die Chemie auf Geometrie zu reduzieren. Linus Pauling zeigte immer wieder, dass chemische Überlegungen die Kristallstrukturbestimmung vereinfachen können. Das war zu seiner Zeit besonders wichtig, weil damals die Strukturanalyse selbst bei „kleinen Molekülen“ alles andere als trivial war. Im Allgemeinen

wurde jedoch die Kristallographie als ein „Hilfsmittel“ ohne Forschungsbedeutung verspottet, und Organiker pflegten vor allem zwischen 1960 und 1990 oft rhetorisch zu fragen, welche Bedeutung denn die Struktur eines Moleküls im Kristall im Hinblick auf seine Chemie in Lösung habe. Vieles davon fand glücklicherweise mit dem Aufkommen der Organometallchemie und dem Auftreten einer Vielzahl an Verbindungen ein Ende, deren komplexe innere Molekülstruktur in Lösung nicht bestimmt werden konnte. Die NMR-Spektroskopie war für die Strukturbestimmung besonders in dieser Verbindungskategorie keine große Hilfe; man hatte oft nur die Kristallstruktur. Doch die Kristallographen ließen sich von den Chemikern nicht einschütern – Jack Dunitz beschrieb einmal die Art der Strukturbestimmung durch Chemiker und Kristallographen mit folgendem Bild: Um Möbel in einem verdunkelten Raum zu lokalisieren, würde ein Chemiker das Mobiliar dadurch finden, dass er in der Dunkelheit herumstolpere und an jedes einzelne Stück stoße, während ein Kristallograph einfach das Licht anmache und die Anordnung mit einem Blick sehe!

Doch es gab auch ernsthaftere Diskussionen zwischen Kristallographen und Chemikern: 1) Was ist die „wirkliche“ Struktur eines Moleküls, wirklich zumindest im chemischen Zusammenhang: Ist es die „nicht so genaue“ Struktur, die man durch Röntgenbeugung erhält und die eigentlich nur die Elektronendichte zeigt, oder die „genauere“ Struktur, die die Neutronenbeugung liefert? 2) Welches ist die „sinnvollere“ Molekülstruktur – die mit

[\*] Prof. G. R. Desiraju  
Solid State and Structural Chemistry Unit  
Indian Institute of Science  
Bangalore 560 012 (Indien)  
E-Mail: desiraju@sscu.iisc.ernet.in

[\*\*] Die Zitate stammen aus *Maximen und Reflexionen*, einer Spruchsammlung, die posthum 1833 veröffentlicht wurde.

dem aufwendigsten Röntgenbeugungs-experiment erhaltene oder die aus der anspruchsvollsten State-of-the-Art-Rechnung, wenn sich diese Strukturen unterscheiden? 3) Kann man direkte Relationen zwischen Molekül- und Kristallstrukturen herstellen und so Kristallstrukturen ausgehend von Molekülstrukturen vorhersagen? 4) Wie viele Kristallstrukturen kann ein Molekül haben? Gibt es vielleicht keine Obergrenze für die Polymorphie, wenn man die Kristallisationsbedingungen ausreichend variiert und dabei auch mithilfe des Computers die Kristallisation simuliert? Und so kann man fortfahren: Die ortsauflösende Kristallographie wird nun durch die zeitauf lösende ergänzt, sodass Kristallographen jetzt in das Reich der Dynamik vordringen können – ein Gebiet, von dem sie traditionell ausgeschlossen waren. Die Chemie ist heute ein Wechselspiel aus Synthese, Struktur und Dynamik. Die Kristallographie beherrscht die Strukturchemie, ist aber auch merklich in den Bereich der Synthese, beispielsweise beim Kristall-Engineering, und der Dynamik eingedrungen. Man kann sich die moderne Chemie nicht ohne die Kristallographie vorstellen.

Die 1948 gegründete International Union of Crystallography (IUCr) ist heute in 51 Ländern vertreten (über 3 Regionalverbände, den amerikanischen, den asiatischen und den europäischen, und 41 Nationalverbände). Die IUCr veröffentlicht qualitativ hochkarätige kristallographische Forschung in acht Zeitschriften, und eine neunte, einfach *IUCrJ* genannt, startet 2014 anlässlich des internationalen Jahres der Kristallographie (IYCr2014). Die IUCr fungiert als Kurator von Kristallographie-standards als Herausgeber und Verlag für die International Tables of Crystallography, was die Standardisierung von Methoden, Einheiten, Nomenklatur und Symbolen ermöglicht. Darüber hinaus fördert die IUCr die internationale Zusammenarbeit von Kristallographen und koordiniert die Beziehungen der Kristallographie zu den anderen Naturwissenschaften.

Das IYCr2014 wurde von den Vereinten Nationen anlässlich hundert Jahre Röntgenbeugung an Kristallen erklärt.

Die IUCr hat es zusammen mit der UNESCO auf den Weg gebracht. Seine erklärten Ziele sind es, Studenten und Wissenschaftlern die Rolle der Kristallographie bei der Entwicklung von Chemie, Mineralogie, Physik, Biologie, Medizin, Material- und Geowissenschaften nahezubringen und die Rolle der Ergebnisse kristallographischer Forschung im täglichen Leben zu betonen. Um diese hochfliegenden Ziele praktisch umzusetzen, sind auf der ganzen Welt Aktivitäten geplant, darunter auch dieses Themenheft der *Angewandte Chemie*.

Eröffnet wird das IYCr2014 am 20. und 21. Januar 2014 am Sitz der UNESCO in Paris. Etwa 2000 Teilnehmer werden erwartet, darunter Botschafter und Regierungsmitglieder aus Mitgliedsländern der UNESCO sowie Kristallographen aus der ganzen Welt und Delegationen anderer internationaler wissenschaftlicher und Bildungsorganisationen. Bei diesem Treffen soll die Wissenschaft genutzt werden, um Nationen zusammenzubringen und neue Zusammenarbeiten zu initiieren.

Die IUCr und die UNESCO haben einen anspruchsvollen Plan für offene Laboratorien und Gipfeltreffen in Asien, Afrika und Südamerika im Rahmen des IYCr2014 entwickelt. Diese offenen Laboratorien sollen gemeinsam mit großen Geräteherstellern durchgeführt werden. Neue Zentren für Kristallographie – als Forschungsschwerpunkte, für die Ausbildung von Studenten und für Forscher aus Nachbarländern – werden in der Elfenbeinküste und in Uruguay aufgebaut werden. Andere offenen Laboratorien werden Stellen mit bereits in Betrieb befindlichen Röntgenbeugungsgeräten sein. Parallel zu dieser Initiative wird es Workshops und Tutorien bei den Diffraktometerherstellern geben, was Berufsmöglichkeiten für Teilnehmer aus den Entwicklungsländern eröffnen soll.

Auf drei Gipfeltreffen soll jeweils ein gemeinsames Thema in der Kristallographie Wissenschaftler, staatliche Stellen und Politiker zusammenbringen. Das erste in Campinas, Brasilien, über die Kristallographie von (vorwiegend biologischen) Makromolekülen, wird

sich auf Süd- und Mittelamerika konzentrieren. Beim zweiten in Karatschi, Pakistan, soll eine ähnliche Gruppe aus China, Indien und Pakistan unter dem Schirm Kristallographie und Pharmazie zusammenkommen. Das dritte Treffen ist in Bloemfontein, Südafrika, als Ergänzung zu einem Workshop über Pulverröntgenbeugung gedacht, und wir hoffen, dass es Regierungsvertreter vieler schwarzafrikanischer und nordafrikanischer Länder zusammenführt. Für Wissenschaftler ist es unbedingt notwendig, über politische und andere Grenzen hinauszublicken. Darum sollen diese Treffen, an denen Forscher aus Hochschule und Industrie sowie Mitarbeiter von Wissenschaftsbehörden teilnehmen, Länder zusammenführen, die bisher aus geographischen, ethnischen, religiösen oder politischen Gründen getrennt waren. Im Zentrum der Treffen wird hochkarätige Forschung stehen, doch es sollen auch die Schwierigkeiten und Probleme thematisiert werden, auf die konkurrenzfähige Forschung in den einzelnen Entwicklungsländern stößt.

Die IUCr hat viel Erfahrung mit Programmen in den Entwicklungsländern. Die IUCr-Initiative in Afrika besteht seit 1999 und bietet für Lehrkörper wie Studenten Training in Ausbildungs- und Forschungsmethoden in der Kristallographie. Die Zusammenarbeit mit der UNESCO und der World Academy of Science for the Advancement of Science in Developing Countries (TWAS) ermöglicht es der IUCr nun, die Initiative in Afrika auf das Projekt „offene Laboratorien“ zu erweitern und Südamerika mit einzubeziehen. Ziel ist, die Wissenschaft auf eine breitere Grundlage zu stellen und jungen Leuten in bislang weniger entwickelten Ländern der Welt einen Ansporn zu geben.

In Zeiten großer Veränderungen müssen sich Wissenschaftler über ihre Laboratorien, Studenten und Forschungsprojekte hinaus zudem für die größere Aufgabe interessieren, die Naturwissenschaften für die Gesellschaft insgesamt wichtiger und bedeutungsvoller zu machen. Ich freue mich darüber, dass die *Angewandte Chemie* dieses Themenheft gestaltet und damit den andauernden Dialog zwischen Kristallographie und Chemie fördert.