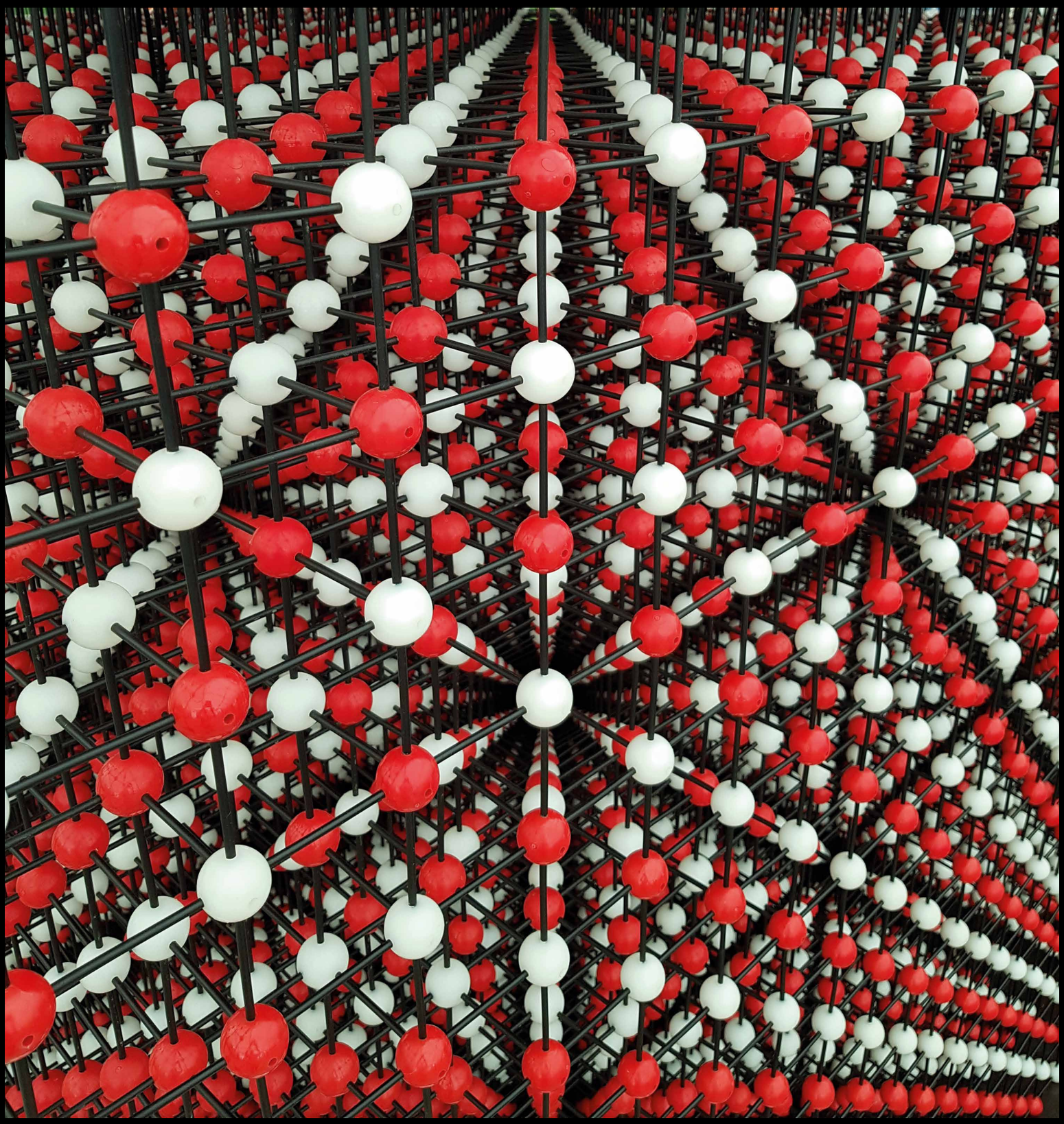


Weltgrößtes NaCl Kristallmodell von Robert Krickl, ausgestellt 2019 während der ECM32 in Wien. Foto: Jürgen Schreuer.

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

Rigaku has been at the forefront of X-ray instrumentation since the 1950s, and is a world leaders in the fields of general X-ray diffraction (XRD), thin film analysis (XRF, XRD and XRR), X-ray fluorescence spectrometry (TXRF, EDXRF and WDXRF), small angle X-ray scattering (SAXS), protein and small molecule X-ray crystallography, Raman spectroscopy, X-ray optics, semiconductor metrology (TXRF, XRF, XRD and XRR), X-ray sources, computed tomography, nondestructive testing and thermal analysis.

Rigaku

©2019 Rigaku Corporation. All Rights Reserved.

Rigaku Europe SE | Hugenottenallee 167 | 63263 Neu Isenburg | Germany | www.rigaku.com | info@rigaku.com

Das Helmholtz-Zentrum Berlin betreibt die Synchrotronquelle BESSY II, die hochbrillante Röntgenstrahlung für die Forschung an unterschiedlichsten Materialien erzeugt. Die Fragestellungen reichen von der Festkörperphysik über die Werkstoffwissenschaften bis zu den Lebenswissenschaften. An den MX-Beamlines von BESSY II konnten bereits über 3000 Proteinstrukturen entschlüsselt werden. Zusätzlich bietet das CoreLab für Röntgendiffraktometrie ein breites methodisches Spektrum für kristallographische Untersuchungen an Pulvern und dünnen Schichten. Dieses Angebot steht Messgästen aus aller Welt zur Verfügung.

www.helmholtz-berlin.de

LIEBE LESERINNEN UND LESER,

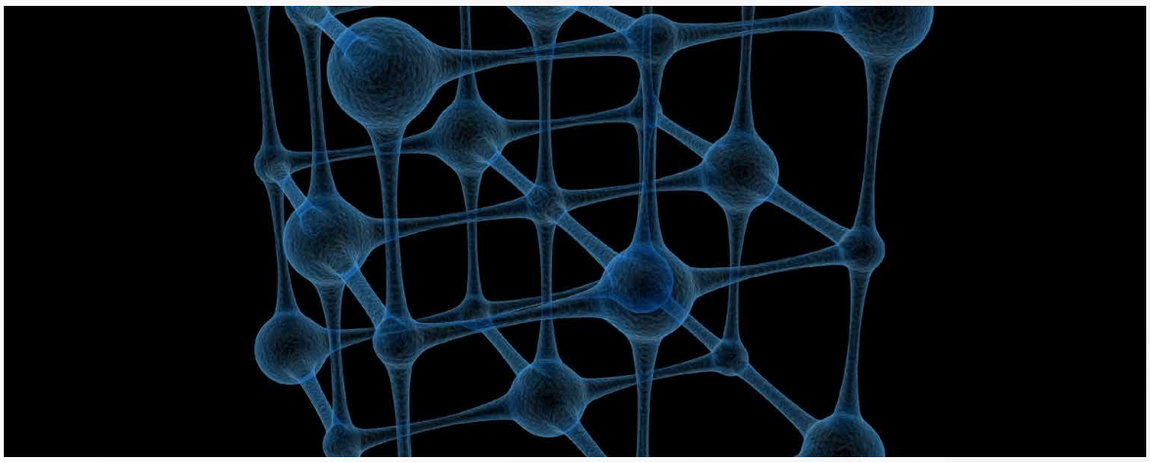
mit dieser Broschüre möchte die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sich Ihnen vorstellen. Anhand aktueller Beispiele wollen wir Ihnen gerne verdeutlichen, wie die Kristallographie zur Bewältigung gesellschaftlicher Herausforderungen in den Bereichen Energieversorgung, Nachhaltigkeit und Gesundheit beitragen kann.

Menschen sind seit Anbeginn der Zeit fasziniert von funkelnden Steinen und glänzenden Kristallen, die sie in der Natur fanden, auch wenn sie noch lange nicht verstanden, was sie da in den Händen hielten. Der Begriff Kristall leitet sich vom griechischen *„krýstallos"* ab, was so viel wie Eis oder Frost bedeutet. Man vermutet, dass in der Antike Menschen Quarzkristalle in den griechischen Bergen fanden und sie für warmes Eis hielten. Seither versucht man die Kristalle und deren innere Struktur zu verstehen. Denn, auch wenn Kristalle über keine Wunderheilungskräfte verfügen, so haben sie dennoch faszinierende Eigenschaften, die unsere moderne Welt erst möglich machen. Nahezu alle modernen Wissenschaften, wie die Materialwissenschaft oder die Nanotechnologie basieren auf den Erkenntnissen der Kristallographie mit ihrer über 2000 Jahren währenden Historie. Der oft verwendete Begriff Struktur – Eigenschaftsbeziehungen fasst kurz zusammen, was die Aufgabe der modernen Kristallographie ist, denn schon lange wollen Menschen nicht nur verstehen, was sie in der Natur finden, sie wollen gezielt Dinge herstellen, vom Bronzeschwert bis zum Mikrochip. Gemeinhin sollen Materialien dabei gewünschte Eigenschaften haben: den Strom besonders effizient leiten, Licht ohne zu viel Abwärme erzeugen oder, wie in einer Batterie, geladene Teilchen einbauen aber auch schnell wieder abgeben, um nur einige Beispiele zu nennen. Die Basis für all diese Eigenschaften ist die jeweilige Struktur der eingesetzten Materialien, angefangen von der Anordnung der Atome zueinander, über die Größe und Form der Kristalle bis zu deren Verteilung im Material. Denn der Begriff Material umfasst oft einen Verbund von mehreren kristallinen oder gläsernen Werkstoffen. All dies untersucht die Kristallographie und liefert somit das Basiswissen für viele Bereiche der Physik, Chemie und Ingenieurwissenschaften. Auch im Umkehrschluss liefern die genannten Naturwissenschaften wertvolle Erkenntnisse für die modernen Kristallograph:innen. Dieses Miteinander ermöglicht einen maximalen Erkenntnisgewinn um schließlich zu erkennen was die Welt im Innersten zusammenhält und Lösungen für die Herausforderungen unserer Zeit zu finden. All die verschiedenen Ansätze aus der Welt der Kristallographie sind in dieser Broschüre beispielhaft zusammengetragen um eine kleinen Einblick in die Arbeit moderner Kristallograph:innen zu geben.

Weitere Informationen und Veröffentlichungen finden Sie auch auf unserer Homepage: www.dgk-home.de

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

DIE DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE



Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) wurde 1991 in München durch Fusion der westdeutschen „Arbeitsgemeinschaft Kristallographie" und der ostdeutschen „Vereinigung für Kristallographie" gegründet. Die DGK hat heute circa 1000 Mitglieder.

Die DGK fördert die Kristallographie in Lehre, Forschung und Industrie sowie in der Öffentlichkeit, insbesondere durch Erfahrungs- und Gedankenaustausch sowie Weiterbildung im nationalen und internationalen Rahmen. Hierzu veranstaltet die DGK jährlich eine wissenschaftliche Konferenz, die Jahrestagung. Die Arbeitskreise der DGK führen kontinuierlich Workshops, Methodenkurse und Symposien durch, die jeweils bestimmte Gebiete der Kristallographie im Fokus haben.

Die DGK vergibt in der Regel jedes Jahr mehrere Preise, mit denen besondere wissenschaftliche Leistungen ausgezeichnet werden: die Carl-Hermann-Medaille wird für das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten verliehen, und der Max-von-Laue-Preis für hervorragende Nachwuchswissenschaftler*innen. Weiterhin werden mit der Will-Kleber-Gedenkmünze hervorragende wissenschaftliche Arbeiten ausgezeichnet.

Der Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie wird von der DGK stellvertretend für die Waltrude-und-Friedrich-Liebau- Stiftung vergeben. Außerdem wird seit dem Jahr 2022 der Lieselotte-Templeton-Preis für sehr gute Bachelor-, Master- oder ähnliche Abschlussarbeiten vergeben.

Die DGK ist Mitglied in den internationalen Dachverbänden, der European Crystallographic Association (ECA) und der International Union of Crystallography (IUCr), die jeweils internationale Konferenzen und Workshops veranstalten.

The Whole is Truly Greater Than the Sum of the Parts – Our Best Solutions for Your Best Research.

www.bruker.com/scd

Innovation with Integrity

Crystallography

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

DGK JAHRESTAGUNG

Die DGK veranstaltet jährlich eine wissenschaftliche Konferenz an wechselnden Orten. Diese Jahrestagungen werden von Mitgliedern vor Ort organisiert.

Während der Jahrestagung werden neueste wissenschaftliche Ergebnisse im Rahmen von Plenarvorträgen oder Vorträgen in thematisch fokussierten Mikrosymposien vorgestellt.

Während der Poster-Sessions werden aktuelle Forschungsergebnisse präsentiert und mit den Teilnehmerinnen und Teilnehmern diskutiert.

Die Jahrestagung bietet Raum für Erfahrungsaustausch und wissenschaftliche Diskussion.

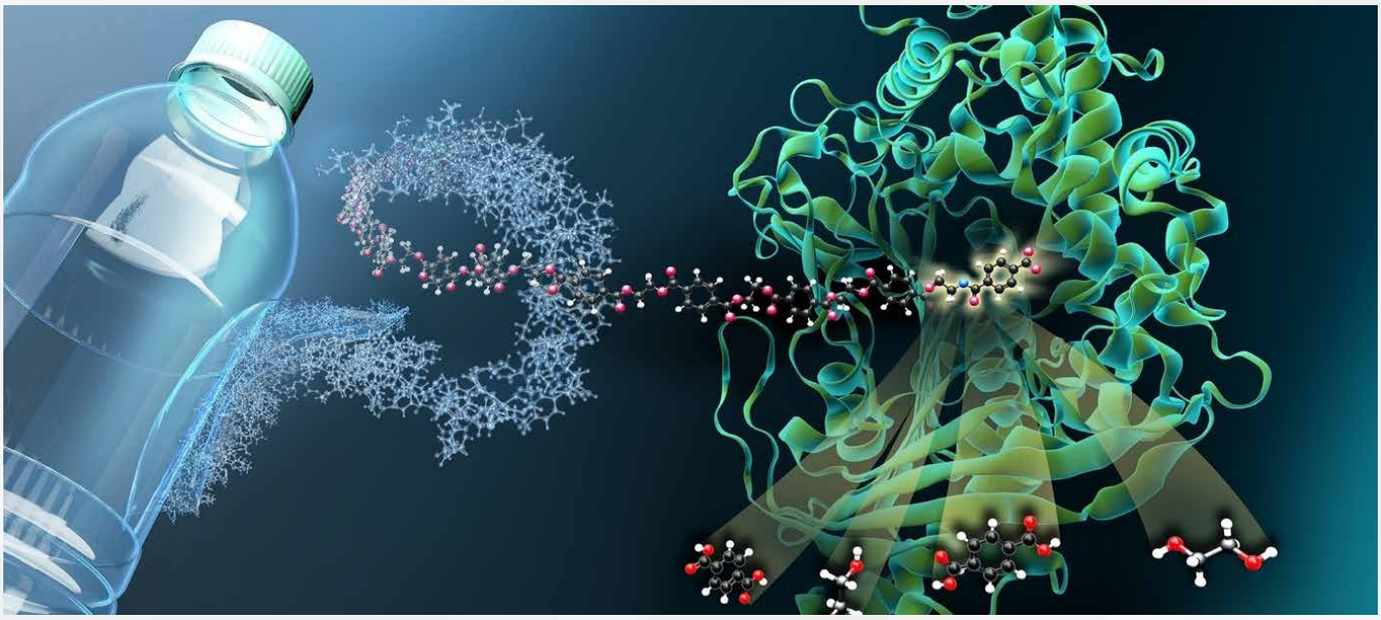
Während der Jahrestagung informieren verschiedene Firmen über ihre neuesten Produkte und Entwicklungen auf dem Gebiet der Kristallographie.

Gert Weber
Makromolekulare Kristallographie, Helmholtz-Zentrum Berlin

KRISTALLOGRAPHIE UND UMWELT

Seit etwa 70 Jahren produziert die Menschheit synthetische Polymere (Kunststoffe). Nach dem Gebrauchsende landet ein großer Teil dieses Materials als Abfall in der Umwelt. Diesen Plastikabfall, oftmals zerfallen in Mikro- und Nanoplastikteilchen, findet man mittlerweile überall auf der Erde. Die Auswirkungen auf die Gesundheit des Menschen und auch der Flora und Fauna sind weitgehend unerforscht. Möglicherweise hält die Natur aber einen Lösungsansatz bereit. Ein neues Bakterium mit Namen *Ideonella sakaiensis* , entdeckt von japanischen Forschern, ist in der Lage, den Kunststoff Polyethylenterephthalat, kurz PET, abzubauen. Es schafft dies mittels zweier Enzyme, der PETase und der MHETase, die das Polymer in seine Grundbausteine Ethylenglycol und Terephthalsäure zerlegen.

Beide Stoffe können dann wieder für eine Neusynthese von PET verwendet werden. So könnten Enzyme in naher Zukunft die bisherigen energieaufwändigen und rohöl-abhängigen Recyclingverfahren von PET und anderen Kunststoffen ersetzen. Für großtechnische Anwendungen arbeiten die Enzyme allerdings noch nicht effizient genug. Zur biotechnologischen Verbesserung der Enzyme ist es von großem Vorteil, die dreidimensionale Strukturen zu erhalten. Forschern ist es nun gelungen, die Strukturen dieser Enzyme mittels Kristallographie im Detail zu analysieren. Nun geht es darum, sie soweit zu verbessern, dass sie großtechnisch eingesetzt werden können. Auch dabei wird die Kristallographie eine entscheidende Rolle spielen.



Die jährliche weltweite Produktion von synthetischen Polymeren oder Kunststoffen hat bereits 10 Milliarden Tonnen überschritten. Die derzeit verfügbaren Recyclingtechnologien sind in der Regel nicht nachhaltig, verursachen hohe Energiekosten und führen zu einem allmählichen Qualitätsverlust des Recyclats. Der enzymatische Kunststoffabbau hat sich in letzter Zeit als zukunftsfähige Alternative erwiesen.

DER AUTOR

Gert Weber
gert.weber@helmholtz-berlin.de

Sebastian Bette & Robert Dinnebier
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung

KRISTALLSTRUKTUR – ANALYSE HILFT, KULTURGÜTER IM MUSEUM ZU BEWAHREN

Historische Objekte sind während der Lagerung in Museen und Sammlungen Luftfeuchtigkeit und atmosphärischen Gasen wie CO_2 und O_2 über Jahrhunderte ausgesetzt. Zusätzlich emittieren Holzmöbel und –vitrinen, besonders aus Eichenholz, Ameisen- und Essigsäure oder deren Vorstufen: Form- und Acetaldehyd. Infolgedessen kommt es zu verschiedenen Korrosionsprozessen, die mitunter beträchtliche Beschädigungen des betroffenen Objekts nach sich ziehen. Das Auftreten von weißen, nadelförmigen Ausblühungskristallen auf kalkhaltigen Objekten (Abb. 1, a-c), auch bekannt als „Bynes Krankheit", stellt ein bereits Ende des 19. Jahrhunderts bekanntes Problem für Museen und Sammlungen dar. Hierbei handelt es sich um calciumcarboxylathaltige Salze, die entweder die gesamte Oberfläche des Objektes überwachsen oder in Poren und Rissen kristallisieren und somit Kulturgüter enorm schädigen können.

Bekannte Vertreter dieser Ausblühungsphasen sind:

> $Ca(CH_3COO)_2 \cdot H_2O$
> $Ca(CH_3COO)_2 \cdot ½H_2O$
> Calclacit ($Ca(CH_3COO)Cl \cdot 5H_2O$)
> Thecotrichite ($Ca_3(CH_3COO)_3Cl(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$)
> Tennents Salz ($Ca(CH_3COO)(HCOO) \cdot H_2O$)
> $Ca_2(CH_3COO)(HCOO)(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$

Die Kristallstrukturen aller bekannten Ausblühungsphasen zeigen große Gemeinsamkeiten: Calcium ist in diesen Verbindungen immer von acht Liganden umgeben. Hierbei sind jeweils vier von acht Koordinationsstellen durch Carboxylat-Ionen besetzt, wodurch sich 1-dimensionale Calciumcarboxylatketten bilden (Abb. 1, d, e). Auf den übrigen Koordinationsstellen befinden sich Hydratwassermoleküle, Acetat- oder Nitrat-Ionen, wobei die letzten beiden zur Vernetzung der Carboxylatketten untereinander führen können. Weiterhin können im Zwischenraum der Ketten, wie im Fall von Calclacit oder Thecotrichit, Hydratwassermoleküle oder Chlorid-Ionen eingelagert werden. Die Calciumcarboxylatketten verlaufen jedoch nicht bei allen Phasen linear. So bilden die Carboxylatketten in der Struktur von $Ca(CH_3COO)_2 \cdot ½H_2O$ eine den Kollagenproteinen analoge Tripel-Helix (Abb. 1, f).

Neben dem rein wissenschaftlichen Interesse kann die Kristallstrukturaufklärung der Ausblühungsphasen auch Beiträge zum Erhalt der kalkhaltigen Kulturgüter liefern. Die Strukturdatensätze stellen die Grundlage der qualitativen und quantitativen Phasenanalyse mittels Röntgenpulverdiffraktometrie dar. Weiterhin zeigt das Carboxylatkettenmotiv, was allen Strukturen gemeinsam ist (Abb 1 e), deutlich auf, dass nur die Carboxylat-Anionen zum Aufbau der Ketten nötig sind und nicht die anorganischen Anionen. Somit wird klar, dass Ausblühungen auch auftreten, nachdem die Objekte aufwendig entsalzt wurden. Die zwischen den Carboxylatketten eingelagerten Wassermoleküle sind nur schwach gebunden und können daher leicht abgespalten werden.

Da die wasserhaltigen Ausblühungsphasen ein reversibles Dehydrationsverhalten aufweisen, können Schwankungen in der Lufttemperatur und –feuchte durch den Hydratationsdruck der Calciumacaboxylate zu einer weiteren Schädigung der Objekte führen.

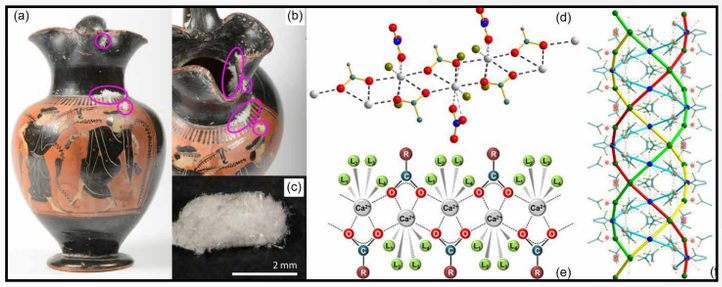


Abbildung 1:
(a, b) Weinkrug, ca. 500 v.Chr., aus der Prinz von Canino Sammlung im Nationalmuseum Leiden,
(c) mikroskopische Aufnahme der Ausblühungskristalle,
(d) Calciumcarboxylat Kette in der Kristallstruktur der Ausblühungsphase $Ca_2(CH_3COO)(HCOO)(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$,
(e) Calciumcarboxylatkette als charakteristisches Hauptmotiv von Ausblühungsphasen auf kalkhaltigen Kulturgütern,
(f) Calciumcarboxylat-Tripel-Helix in der Kristallstruktur von $Ca(CH_3COO)_2 \cdot ½H_2O$.

DIE AUTOREN

Sebastian Bette & Robert E. Dinnebier
r.dinnebier@fkf.mpg.de & s.bette@fkf.mpg.de

Tina Sorgenfrei
Kristallographie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

SCHWERELOSIGKEIT ALS WICHTIGES WERKZEUG IN DER KRISTALLZÜCHTUNG

Technische Kristalle oder kristalline Materialien sind aufgrund ihrer besonderen physikalischen Eigenschaften in vielen Bereichen wichtig und unverzichtbar. Sie finden neben weiteren Bereichen in aktuellen Themen wie der Mikroelektronik als Mikrochips, Strahlungsdetektoren oder Leuchtdioden und in Materialien für erneuerbare Energien als Solarzellen oder Thermoelektrika Anwendung. Die Herstellung dieser Kristalle geschieht meist durch Kristallzüchtung aus der Schmelze. Dabei beeinflussen die (Konvektions)-Bewegungen der Schmelze den Massentransport und damit die Qualität der Kristalle. Ein großer Anteil dieser Konvektion nimmt ihren Ursprung in der dichtegetriebenen Auftriebskonvektion. Andere Konvektionsbewegungen haben ihren Ursprung z. B. an Grenzflächen, wie der freien Schmelzoberfläche. Um die Phänomene einzeln und in ihrer gegenseitigen Wechselwirkung zu verstehen, müssen alle separat untersucht, qualifiziert und quantifiziert werden.

Anschließend können Modelle dieser Konvektionsbewegungen erstellt werden, mit denen industrielle Züchtungsprozesse, z.B. von großen Siliziumkristallen optimiert werden können.

Da auf der Erde die Schwerkraft permanent mit 1g (9,81 m/s^2) wirkt, können hier keine Experimente ohne dichtegetriebene Auftriebskonvektion durchgeführt werden. Da aber andere Konvektionsbewegungen separat untersucht werden müssen, um die Vorgänge vollständig zu verstehen, werden z. B. hierzu Kristallzüchtungsexperimente unter Schwerelosigkeit durchgeführt.

Auf verschiedenen Plattformen (Fallturm, Parabelflüge, Raketen, Satelliten, Internationale Raumstation) können für unterschiedliche Dauern Restbeschleunigungswerte von bis zu 10^{-6} g erreicht werden (sog. Mikrogravitation, µg), die Versuche ohne konvektiven Beitrag unter sog. diffusiven Bedingungen erlauben. Diese liefern dann die elementaren Informationen, die es ermöglichen die theoretischen Modelle besser beschreiben zu können und die Simulationen an die Realität angleichen.

DIE AUTORIN

Tina Sorgenfrei
tina.sorgenfrei@fmf.uni-freiburg.de

STOE is a customer-centered, fully independent company. Our sole focus is to achieve the best data quality for your XRD needs.

We accept no compromises when ensuring the best quality for your STOE powder and single crystal diffractometer systems.

We guarantee this with our new and unprecedented:

10 YEAR | STOE Parts & Labor Guarantee for all new STOE Diffractometer Systems

Contact us for your best XRD solution and terms & conditions at **info@stoe.com**

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

WWW.STOE.COM

Wolfgang W. Schmahl
Anorganische und Biogene Geomaterialien, Ludwig-Maximilians-Universität München

KRISTALLE IM KÖRPER ...

WIESO? WESHALB? WARUM?

Lebewesen machen sich die Eigenschaften von Kristallen zu Nutze, vor allem, um ihre harten Gewebe wie Zähne, Knochen oder Schalen zu bilden. Diese Hartgewebe sind Verbundwerkstoffe aus Kristallen aus Mineralsubstanz und organischen Fasern aus Proteinen (ähnlich denen, aus denen Seide besteht) oder Polysaccharide, ähnlich Chitin oder Zellulose. Die mineralischen Kristalle steuern dabei die Härte und Widerstandsfähigkeit gegen Druck-Kräfte bei, die organischen Fasern liefern die Zugfestigkeit und Elastizität. Der Verbund aus beiden Komponenten kompensiert die jeweiligen mechanischen Nachteile der einzelnen Komponenten durch eine „hierarchische Architektur", das heißt, es gibt viele Ebenen der Strukturbildung, von der molekularen chemischen Bindung (Maßstab 0,1 nm), über die Nano-Skala (1 nm bis 1 µm), zu Faserverbund- oder Laminat-Strukturen der Mikroskala (1 µm und aufwärts), bis zur makroskopischen Skala (mm bis m). So besteht z. B. ein menschlicher Zahn makroskopisch aus einer harten, eher dünnen Außenschicht, dem Zahnschmelz, und dem inneren, weicheren Zahnbein. Beide Schichten bestehen aus Kriställchen einer Mineralsubstanz, die wir analog zum makroskopischen Mineral mit ähnlicher Zusammensetzung als Apatit bezeichnen. Auf der molekularen Skala ist Apatit ist eine Verbindung mit definierter Struktur aus Calcium und Phosphat, die zusätzlich Ionen wie Carbonat und Hydroxyl enthält. Die biologischen Kriställchen erreichen Größenordnungen von wenigen Zehner Nanometern, und sie sind eingebettet in eine polymere Matrix aus faserförmigen Proteinmolekülen. Aus diesem Verbund bilden sich Fädchen mit ca. 100nm Durchmesser, die dann, wie die Fasern in einem Garnfaden oder einem Seil, zu größeren Einheiten verbunden oder auch verdrillt sind. Über die organische Matrix geben die Organismen dabei die finale Form des Zahns oder des Knochens vor und erzeugen damit Kristallformen, die ganz anders als in der anorganischen Welt sind. Im Zahnschmelz wird diese Matrix während der Mineralisation des Zahns sukzessive abgebaut, so dass am Ende fast nur die Apatit-Nanokriställchen raumfüllend vorliegen. Damit ist das Material ähnlich einer Keramik. Zahnbein und Knochen dagegen müssen zu einem gewissen Grad flexibel und elastisch sein. Bei Ihnen besteht nur etwas weniger als die Hälfte des Materials aus Apatit-Nanokriställchen und der Rest aus weichem Gewebe und auch Blutgefäßen.

Außer diesen biologisch gebildeten Materialien mit mechanischer Funktion gibt es auch biologisch gebildete Kristalle mit sensorischer Funktion. Im Gleichgewichtsorgan in unserem Innenohr, z. B., befinden sich winzige Kriställchen aus Calciumcarbonat an den Enden von faserförmigen Fortsätzen von Sensorzellen. Die Kriställchen funktionieren als winzige „Gewichte", deren Massenträgheit zu einer Biegung der Fäserchen führt, über die die Zellen die Beschleunigungen registrieren, wenn wir uns bewegen. Augenlinsen aus Calciumcarbonat-Mineral (Calcit) treten bei Seesternen, Asseln und Trilobiten auf.

Manche Bakterien haben ein Organ zur Bestimmung der Orientierung der Feldlinien des Erdmagnetfeldes. Die Mikroben können damit bestimmen, wo „oben" und „unten" in einem See ist. Das Sensor-Organ besteht aus einer Kette von Nanokriställchen des Minerals Magnetit (Eisenoxid mit der Formel Fe_3O_4), die in einer schlauchförmigen organischen Membran zusammengehalten werden.

Umgekehrt gibt es auch schädliche, pathologische Kristallisation im Körper. Nieren- und Harnsteine oder Arteriosklerose sind weit verbreitete Beispiele.

Die aktuellen Forschungsfragen an biologisch gebildeten Kristallen bzw. „Biomineralen" sind vielfältig. Zahnerhalt, Zahnersatz, und Ersatz von Knochensubstanz nach Unfällen oder Eingriffen sind ein wichtiges Thema, da der hierarchische, hybride Aufbau der Biominerale Eigenschaften ergibt, die sich bislang mit synthetischen Stoffen nicht befriedigend nachahmen lassen. Als „Biomimetik" wird die Wissenschaft und Kunst bezeichnet, das, was wir aus der Beobachtung bzw. Erforschung der Natur lernen können, in verbesserte synthetische Materialien oder „Devices" umzusetzen. Die fossilen Skelette (Knochen, Schalen) von Lebewesen geben uns nicht nur Aufschluss über die Evolution des Lebens und seiner „Werkstoffe" auf der Erde, sie sind auch die materiell erhaltenen Informationsträger über die Umweltbedingungen, in denen dieses Leben existierte, denn die chemische und mineralogische Zusammensetzung des Materials zeigt z.B. Umgebungstemperaturen und Ernährungsgrundlagen an.

DER AUTOR

Wolfgang W. Schmahl
Wolfgang.W.Schmahl@lrz.uni-muenchen.de

Marie Münchhalfen & Jürgen Schreuer
Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum

KOMMUNIKATION DURCH KRISTALLE

Nach der Entdeckung im Jahr 1880 an Turmalinkristallen durch die Brüder Jacques und Pierre Curie war der piezoelektrische Effekt zunächst eher ein Kuriosum. Die Ausschöpfung seines technologischen Potentials begann erst Jahrzehnte später insbesondere im Zuge der Entwicklung der Elektronik. Der direkte piezoelektrische Effekt, also die Erzeugung von elektrischen Ladungen durch mechanische Einwirkung auf Kristalle, ist die Grundlage von Druck-, Kraft- und Beschleunigungssensoren, die z.B. Bestandteil der Sicherheitstechnik von Automobilen sind und dabei auch zentrale Bedeutung für die Entwicklung des autonomen Fahrens haben. Fruchtbarer noch hat sich die Umkehrung des piezoelektrischen Effektes erwiesen. Durch elektrische Wechselfelder lassen sich piezoelektrische Materialien zu mechanischen Schwingungen anregen. Elastische Eigenschwingungen von Kristallen sind äußerst frequenzstabil und unterliegen praktisch keinen Alterungseffekten.

Dementsprechend bilden Quarzoszillatoren (Abbildung) das schlagende Herz nahezu aller Mikrochips. In der Kommunikationstechnologie verbreitet sind zudem Frequenzfilter, welche die Ausbreitung elastischer Oberflächenwellen zwischen kammartigen Elektroden auf der Kristalloberfläche ausnutzen.

Da die elastischen Eigenschaften von äußeren Bedingungen wie z.B. Druck und Temperatur abhängen, können Änderungen der Eigenschwingungen von Kristallen zur Überwachung entsprechender Prozessparameter genutzt werden. Von besonderem Reiz ist dabei die Verwendung piezoelektrischer Kristalle, denn zufällige mechanische Vibrationen regen bei geeigneter Orientierung, Form und Abmessung Eigenschwingungen an, die über den piezoelektrischen Effekt ein Radiosignal entstehen lassen, welches analog zur RFID-Technologie kontaktlos ausgelesen werden kann. Vielversprechend erscheint der Einsatz in Motoren und Turbinen, um durch Optimierung des Verbrennungsvorgangs den Kraftstoffverbrauch zu senken und die Lebensdauer zu erhöhen. Eine große Herausforderung stellen mit Temperaturen über 1000 °C, hohen Fliehkräften und korrosiver Atmosphäre jedoch die harschen Bedingungen dar, denen die Kristalle dabei ausgesetzt sind. Bei der Suche nach bzw. gezielten Entwicklung von geeigneten piezoelektrischen Materialien spielt die Kristallographie eine entscheidende Rolle. Elastizität und Piezoelektrizität eines Kristalls hängen unmittelbar von der Anordnung seiner atomaren Bausteine in der Kristallstruktur und deren Wechselwirkungen untereinander ab. Die relevanten Struktur-Eigenschaftskorrelationen lassen sich z. B. mit Hilfe kristallographischer Beugungsmethoden und Ultraschallresonanzspektroskopie untersuchen.

Abbildung:

Links: Orientierte Quarzplättchen als hochpräzise Schwinger in kommerziellen Oszillatoren.

Rechts: Verkapselter Quarzoszillator (roter Pfeil) als Taktgeber in einem Uhrwerk.

Foto: Museum Wiesbaden/Bernd Fickert.

DIE AUTOREN

Marie Münchhalfen & Jürgen Schreuer
Marie.Muenchhalfen@ruhr-uni-bochum.de & schreuer@rub.de

Jan Wollenhaupt
Makromolekulare Kristallographie, Helmholtz-Zentrum Berlin

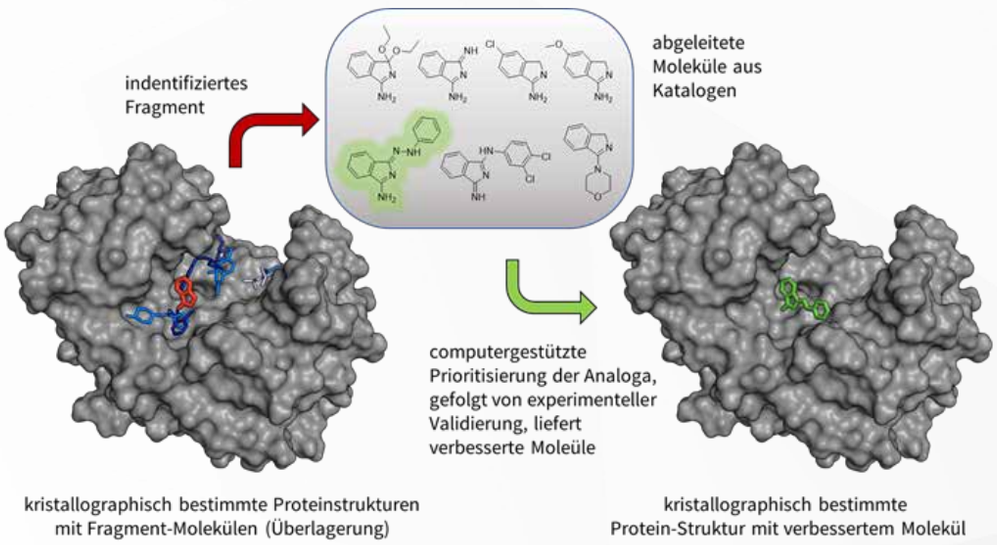
NEUE MEDIKAMENTE DURCH STRUKTUR-BASIERTES WIRKSTOFFDESIGN

An modernen Synchrotroneinrichtungen dauert es nur wenige Minuten, Diffraktionsdaten von Kristallen von Makromolekülen zu messen und die Molekularstruktur zu bestimmen. Daher wird nun makromolekulare Kristallographie fast routinemäßig als Screening-Technik zur Ermittlung von Ausgangspunkten für die Entwicklung von Wirkstoffen für neuartige Medikamente eingesetzt. Zunächst werden dafür Bibliotheken von Verbindungen mit niedrigem Molekulargewicht, so genannte Fragmente (ca. 100-300 Dalton), in einem Screening ermittelt. Die aus den kristallographischen Daten von in der Regel 100-500 Proben identifizierten Fragmente geben Aufschluss über molekulare Details der Interaktion mit der Proteinoberfläche und dienen als „Fuß in der Tür" für weitere Verbesserungen. Um ein Molekül mit arzneimittelähnlichen Eigenschaften und biologischer Wirksamkeit zu erhalten, sind zahlreiche Optimierungsrunden erforderlich. Während spätere Stadien solcher Projekte immer eine spezielle, maßgeschneiderte medizinische Chemie erfordern, können die ersten Schritte von einem Fragment zu einem besser bindenden Molekül mit Hilfe von Katalogen bereits verfügbarer Substanzen erreicht werden (siehe Abb.).

Solche Optimierungen können bereits zu einer Verbesserung der Bindungsaffinität des Moleküls um eine bis drei Größenordnungen führen.

Während das strukturbasierte Design nahezu optimaler /präklinischer Moleküle gut etabliert ist, ist das kristallografische Fragment-Screening eine relativ neue Entwicklung des letzten Jahrzehnts, die derzeit die pharmazeutische Industrie verändert, da solche Arbeitsabläufe die Geschwindigkeit von Projekten zur Arzneimittelentdeckung im Frühstadium erhöhen.

Künftige Synchrotron-Kapazitäten für die makromolekulare Kristallographie mit noch höherem Durchsatz und vollständiger Automatisierung werden das Fragment-Screening unter 1000 Bedingungen zu einem alltäglichen Experiment machen und auch akademische Gruppen in die Lage versetzen, die Arzneimittelentdeckung für vernachlässigte biologische Zielmoleküle voranzutreiben, z. B. für die Entwicklung dringend benötigter neuer Antibiotika.



Beispielhafte Darstellung wie mit Hilfe von makromolekularer Kristallographie identifizierte Fragment-Moleküle als Startpunkte für schnelles strukturbasiertes Design verwendet werden können.

DER AUTOR

Jan Wollenhaupt
jan.wollenhaupt@helmholtz-berlin.de

Anna-Lena Hansen
Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Angewandte Materialien – Energiespeichersysteme (IAM-ESS)

BATTERIEN – MEHR ALS NUR BEWEGTE ELEKTRONEN

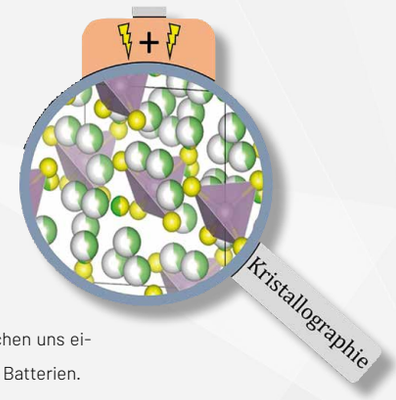
Wiederaufladbare Batterien sind aus unserem Alltag nicht mehr wegzudenken und werden in Zukunft einen noch größeren Stellenwert einnehmen. Denn sie können einen entscheidenden Beitrag zur Energiewende beitragen, sei es im Bereich der Elektromobilität oder als Speicher für nachhaltig erzeugten Strom aus Wind und Sonnenenergie.

Nicht erst seit John B. Goodenough, M. Stanley Whittingham und Akira Yoshino 2019 der Chemie-Nobelpreis verliehen wurde, sind Batterien, genauer gesagt Akkumulatoren, aus unserem Leben nicht mehr wegzudenken. So einfach Batterien in der Handhabung und so wenig sie aus unserem täglichen Leben wegzudenken sind, so komplex können die Prozesse sein, die innerhalb einer Batterie ablaufen. Dies gilt insbesondere dann, wenn wir einen Blick in die nachhaltige Batterie der Zukunft werfen. Denn die Anforderungen an eine solche Batterie sind schier endlos. Sie sollen effizient, extrem schnell ladbar, leicht, sicher, aber auch ressourcenschonend und natürlich günstig sein. Um sich diesen Zielen anzunähern, hilft uns die Kristallographie.

Denn Batterien enthalten einen ganzen Zoo kristalliner und nicht kristalliner Materialien, die ein im wahrsten Sinne spannendes Wechselspiel miteinander eingehen. Es gilt beispielsweise die Stabilität neuartiger Anoden- und Kathodenmaterialien während des Zyklierens der Batterie zu verstehen – Welche Phasen bilden sich? Macht es einen Unterschied, ob die Batterie vollständig entladen wird oder in welchem Spannungsbereich sie zum Einsatz kommt?

Wie kann die Ionenleitfähigkeit fester Elektrolyte optimiert werden und wie kann man sicherstellen, dass es zu keinen unerwünschten Nebenreaktionen kommt?

Eine immer größere Aufmerksamkeit bekommt auch die sogenannte Realstruktur der Materialien. Hierbei sollen alle, auch nichtperiodische Besonderheiten der Struktur, erfasst werden, damit man den Einfluss von beispielsweise lokalen Gitterverzerrungen oder chemischen Entmischungen auf die physikalischen Eigenschaften verstehen kann. All dies gilt es mithilfe der Kristallographie aufzuklären, bevor man eine funktionierende Batterie in den Händen halten kann.



Die Methoden der Kristallographie ermöglichen uns einen Einblick in die strukturellen Vorgänge in Batterien.

DIE AUTORIN

Anna-Lena Hansen
anna-lena.hansen@kit.edu

Susan Schorr
Abteilung Struktur und Dynamik von Energiematerialien,
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie

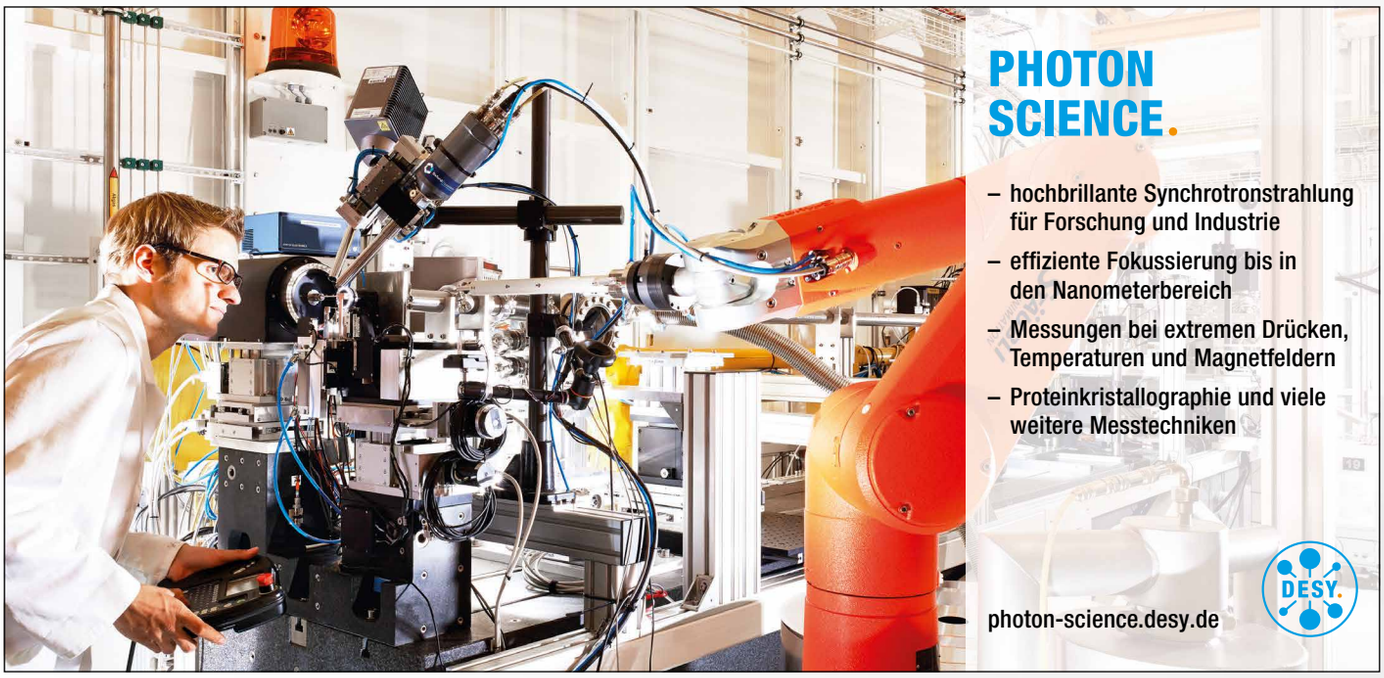
DEFEKTE IN HALBLEITERN – FLUCH ODER SEGEN FÜR SOLARZELLEN?

Umwelt- und energiepolitische Probleme gehören heute zu den größten gesellschaftlichen Herausforderungen. Innerhalb der erneuerbaren Energien spielt die Photovoltaik (PV), die direkte Umwandlung von Sonnenlicht in elektrische Energie in einer Solarzelle, eine Schlüsselrolle. Die bekannteste Solarzellenkonfiguration ist ein p-n-Übergang, der durch einen p-leitenden und einen n-leitenden Halbleiter realisiert wird. Der PV-Markt wird von Solarmodulen auf Siliziumbasis dominiert, die mit Bor oder Phosphor dotiert werden müssen, um p- oder n-leitend zu werden. Ternäre und quaternäre Verbindungshalbleiter, die als Absorbermaterialien in Dünnschichtsolarzellen, der vielversprechendsten und kostengünstigsten PV-Technologie, verwendet werden, enthalten intrinsische (oder native) Defekte, welche die Art der Leitung (p- bzw. n-leitend) verursachen. Es gibt „gute" und „schlechte" Punktdefekte im Material, die ersten sind nützlich für den Betrieb der Solarzelle, die zweiten können die Solarzelle unbrauchbar machen. Somit sind Defekte und das defektengineering ein Schlüsselbestandteil der Solarzellen-Technologie. Die Chalkopyrite $Cu(In,Ga)(Se,S)_2$ (CIGSe) sind die effizientesten Absorbermaterialien in Dünnschicht-Solarzellen mit Rekord-Laboreffizienzen von >22 %.

Da die Verfügbarkeit von Indium bei der großtechnischen Produktion von Solarmodulen Anlass zur Sorge gibt, ist sein Ersatz durch Zn und Sn in diesem Sinne vorteilhaft. Solarzellen mit $Cu_2ZnSn(S,Se)_4$ (CZTS, CZTSe) als Absorber-Halbleiter, die in der Kesterit-Struktur kristallisieren, werden als die einzige PV-Technologie ohne die Verwendung kritischer Materialien angesehen. In hocheffizienten Dünnschichtsolarzellen zeigen die Kesterit-Absorberschichten eine nicht-stöchiometrische Zusammensetzung, was aufgrund einer bemerkenswerten Flexibilität der Kristallstruktur möglich ist. Diese Fähigkeit, Abweichungen von der Stöchiometrie zu akzeptieren, korreliert mit der Bildung intrinsischer Punktdefekte, wie Leerstellen, Anti-Sites bzw. Interstitials. Kupfer-Leerstellen begründen eine p-Leitfähigkeit des Halbleiters, sind also „gute" Defekte, Anit-Sites mit Zinn hingegen verursachen eine Ladungsträgerrekombination und sind „schlechte" Defekte. Mit dem Einsatz von Röntgen- und Neutronendiffraktion ist es gelungen, den Defekttyp und die Konzentration von Punktdefekten in Chalcogenid-Verbindungshalbleitern vom Chalkopyrit-Typ und Kesterit-Typ zu bestimmen und mit den Synthesebedingungen des Materials zu korrelieren. Damit wurde die Grundlage für ein erfolgreiches Defekt-Engineering für eine weitere Erhöhung der Solarzelleneffizienz gelegt.

DIE AUTORIN

Susan Schorr
susan.schorr@helmholtz-berlin.de



www.bruker.com/xrd

Innovation with Integrity

XRD

Herausgeber:
Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e.V.
Carl-Pulfrich-Straße 1 / 07745 Jena

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

IUCr 2029 Berlin

DIE DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE BEWIRBT SICH UM DIE AUSRICHTUNG DER 28. VOLLVERSAMMLUNG UND DES KONGRESSES DER INTERNATIONALEN UNION FÜR KRISTALLOGRAPHIE (IUCr) IN 2029 IN BERLIN.

EINE VORLÄUFIGE BEWERBUNG WURDE IM RAHMEN DES 25. IUCr KONGRESS IN PRAG ABGEGEBEN.

JS/DEUTSCHLAND • Concept: JS/MEDIA TOOLS A/S • 109980 • www.jsdeutschland.de