

Facettenreiche Forschung

Das Internationale Jahr der Kristallographie 2014 lädt ein, die große Bedeutung dieser modernen Wissenschaft zu entdecken.

Edgar Weckert

Seit jeher begeistern Kristalle auf vielfältige Weise die Menschen – sei es durch die Schönheit ihrer regelmäßigen Formen oder ihre besonderen physikalischen Eigenschaften. Mit Fug und Recht kann man behaupten, dass die moderne Kristallographie mit dem legendären Experiment von Max von Laue und seinen Mitstreitern Walter Friedrich und Paul Knipping 1912 ihren Anfang nahm. Ihnen gelang es nachzuweisen, dass es sich bei Röntgenstrahlung um elektromagnetische Wellen handelt und dass Kristalle dreidimensional periodisch aufgebaut sind. Die Verleihung des Physik-Nobelpreises 1914 an Max von Laue war einer der Anlässe dafür, 2014 zum Internationalen Jahr der Kristallographie zu erklären.^{#)} Viele Nobelpreise, die direkt oder indirekt für kristallographische Arbeiten vergeben wurden, folgten und – da bin ich mir sicher – weitere werden folgen.

Mit der Röntgenbeugung war es möglich, den atomaren Aufbau von Kristallen zu ergründen. Die Pioniere auf diesem Gebiet waren Vater und Sohn Bragg. Doch die Experimente lieferten nur die Intensitäten der „Bragg-Reflexe“ und nicht deren Phasen, sodass kein direkter Weg vom Beugungsdiagramm zurück zur atomaren Struktur führte. Dies wurde deutlich einfacher durch die Nutzung von Synchrotronstrahlungsquellen, die wesentlich höhere Intensitäten als Laborquellen zur Verfügung stellen und es dank durchstimmbarer Wellenlänge erlauben, zusätzliche Phaseninformation zu gewinnen – ein weiterer wichtiger Meilenstein, nicht zuletzt um die Struktur großer und komplexer Moleküle zu bestimmen.

Mittlerweile haben kristallographische Methoden einen hohen Grad an Reife, Automatisierung und Standardisierung erreicht. Die

Bestimmung auch großer und komplexer Kristallstrukturen ist in vielen Fällen eine Standardprozedur.

Auch wenn die Kristallographie im Studium oft stiefmütterlich behandelt wird, ist diese Wissenschaft aktueller denn je. Im Zusammenwirken mit modernen Instrumenten ermöglicht sie eine äußerst wertvolle Analytik, um atomare Strukturen aufzuklären und daraus physikalische, chemische und sogar biologische Eigenschaften abzuleiten. Ein großes Feld sind die modernen Materialwissenschaften, die Festkörperphysik und die Chemie, wo es darum geht, Kristalle oder kristalline Materialien selbst zu untersuchen mit dem Ziel, ihre Eigenschaften gezielt einzustellen und zu optimieren. Die atomare Kristallstruktur zu kennen, ist hierfür eine der wesentlichen Grundvoraussetzungen!

In der Strukturbiologie geht es hingegen primär um die atomare Struktur und Funktion von Biomolekülen. Diese sind nicht zuletzt von enormer Relevanz für Medizin und Pharmazie. Kristalle dieser Moleküle zu untersuchen, ist strenggenommen nur eine, wenn auch die zurzeit erfolgreichste Möglichkeit, an diese Information zu gelangen – vorausgesetzt natürlich, dass sich das Molekül von Interesse auch kristallisieren lässt. Mittlerweile sind sowohl die kristallographische Methodik als auch die Instrumentierung an modernen Synchrotronstrahlungsquellen so weit fortgeschritten, dass die Strahlenschädigung der Kristalle der limitierende Faktor ist. Hier deutet sich allerdings Licht am Ende des Tunnels an. Experimente in jüngerer Vergangenheit an Freie-Elektronen-Lasern (FELs) wie FLASH (DESY, Hamburg) und LCLS (SLAC, Stanford, USA) haben gezeigt, dass sich mit den ultrakurzen Röntgenlichtpulsen an



Meinung von Prof. Dr. Edgar Weckert, Direktor für den Bereich Forschung mit Photonen bei DESY Hamburg.

derartigen Quellen Materie wesentlich höheren Photonenintensitäten als bisher aussetzen lässt – die aktuelle Belichtung während eines Pulses ist nämlich so kurz, dass sich Strahlenschäden nicht messbar auswirken. Am LCLS wurden bereits erste dieser Experimente an biologischen Mikro- und Nano-Kristallen erfolgreich durchgeführt. Die hohe Photonenpulswiederholrate des in Hamburg im Bau befindlichen Europäischen Röntgenlasers wird es ab ca. 2016 erlauben, derartige Experimente um bis zu einen Faktor 200 zu beschleunigen.

Darüber hinaus erlauben es die extrem kurzen Pulse der Röntgenlaser nicht nur, die statische Struktur, sondern auch deren Dynamik auf der atomaren Skala zu untersuchen. Somit werden kristallographische Methoden an FELs dazu beitragen, einen Traum vieler Wissenschaftler zu verwirklichen: Filme auf molekularer und atomarer Ebene.

Mit vielfältigen Aktionen möchte das Internationale Jahr der Kristallographie einer breiten Öffentlichkeit die Bedeutung dieser Wissenschaft nahe bringen. Nicht zuletzt wird sie auch eine Schlüsselrolle dabei spielen, den großen Herausforderungen der kommenden Jahrzehnte zu begegnen. Bei den drängenden Fragen von Energieversorgung, Medizin oder nachhaltiger Wirtschaft kann die Kristallographie ihre vielen und sicher auch neuen Facetten ausspielen.

#) Mehr Infos finden sich auf der Seite zum Internationalen Jahr der Kristallographie, www.icyr2014.de