



## Kristallographie: Schutz für eine gefährdete Gattung

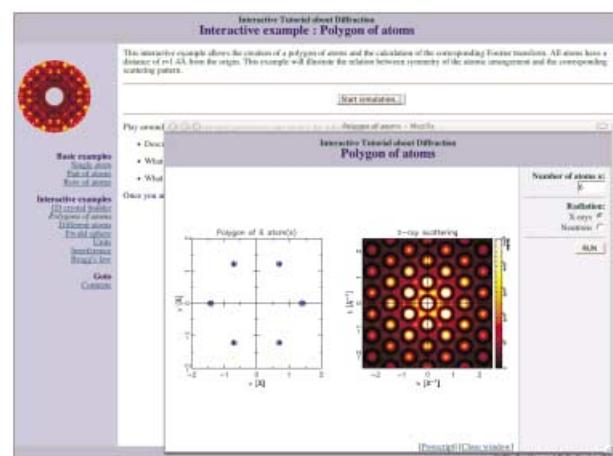
Die Kristallographie steuert zurzeit auf einem Kurs zwischen Skylla und Charybdis: zwischen ihrem langsamen, aber stetigen Verschwinden als eigenständiges Lehr- und Forschungsgebiet und ihrer anscheinend unaufhaltsamen Umwandlung in einen Servicebetrieb für Mineralogie, Materialwissenschaft, Chemie und Molekularbiologie. Der schleichende Verfall der Kristallographie als unabhängige Wissenschaft erscheint auf den ersten Blick konsequent, da ihre zentralen Probleme scheinbar gelöst sind. Qualitativ hochwertige Lehre der Kristallographie könnte ein Weg sein, diesen Trend zu brechen. Das „Interactive Tutorial about Diffraction“ von R. B. Neder und T. Proffen hilft Lehrenden und Studierenden der Kristallographie vertiefte Kenntnisse zu erwerben, welche über das Benutzen von kristallographischen Computerprogrammen hinausgehen.

Die Website wendet sich an (Nachwuchs-)Wissenschaftler, die sich um ein Verständnis der Beziehung zwischen Kristallstrukturen und den zugrunde liegenden Röntgen- und Neutronenbeugungsbildern bemühen. Sie enthält exzellente, in der Regel ein- und zweidimensionale Darstellungen und Übungen (Abbildung 1), welche als Ergänzung zu einführenden Lehrveranstaltungen zu verstehen sind, nicht jedoch als Ersatz für einen Kurs oder ein gutes Lehrbuch. Die ersten sechs Einheiten des Tutorials behandeln grundlegende Themen: Eigenschaften der Fourier-Transformation wie ihre Rolle in der Beziehung zwischen Realraum und reziproker Raum werden ebenso behandelt wie diverse Aspekte der Strukturlösung einschließlich des Phasenproblems.

Der potentielle Nutzer sollte sich aber von Schlagworten wie „Fourier-Transformation“ und „Faltungstheorem“ nicht abschrecken lassen: Die Autoren konnten nämlich dem Trend nicht widerstehen, den mathematischen Hintergrund weitgehend auszuklammern. Dieses Defizit wird aber durch die interaktive Graphik, welche ein Lehrbuch kaum bieten kann, mehr als aufgewogen.

Die letzten vier Einheiten sind für Wissenschaftler gedacht, welche mit Problemen konfrontiert sind, die nicht mittels Standardtechniken lösbar sind. Viele Themen dieser Abschnitte sind Gegenstand aktueller kristallographischer Forschung und erfahrenen Strukturanalytikern wohlbekannt: diffuse Streuung und Fehlordnung, Satellitenstreuung und Modulationen von Kristallstrukturen, Unterscheidung von zentrosymmetrischen und nicht zentrosymmetrischen Raumgruppen sowie bevorzugte Orientierungen in Pulverproben.

Die Übungen tragen nicht nur zum Verständnis der Prinzipien der verschiedenen Themenbereiche bei, sie sind auch gut geeignet, die Neugier eines Wissenschaftlers zu wecken, der sich über das übliche Niveau hinaus für Probleme der Strukturbestimmung interessiert. Die Erklärungen sind präzise und die interaktiven Beispiele führen die Studierenden direkt zum Wesentlichen. Die Ergebnisse der Übungen können entweder mit den allgemeinen Erklärungen in einem separaten Fenster verglichen oder als Postscript-Datei gespeichert werden. Die Navigation ist problemlos und kleinere Abbildungen können vergrößert werden. Die Reaktionszeiten einiger interaktiver Simulationen sind recht lang, was eine intensive Beschäftigung mit einigen Themen erschwert. Symmetrie wird nicht behandelt, obwohl dieses Thema von vielen mit Kristallographie assoziiert wird. Eine Auswahl von Links zu diesem und anderen für die Vermittlung von



**Abbildung 1.** Interaktive Übungen – wie hier zur Beziehung zwischen Struktur, Symmetrie und resultierendem Beugungsmuster – erleichtern das Verständnis kristallographischer Zusammenhänge.

Kristallographie nützlichen Themen ist aber anderswo abrufbar.<sup>[1]</sup>

 Für mehr Informationen besuchen Sie  
<http://www.uni-wuerzburg.de/mineralogie/crystal/teaching/teaching.html>  
oder nehmen Sie Kontakt auf mit  
reinhard.neder@mail.uni-wuerzburg.de

Alles in allem bietet die Website Studierenden die Möglichkeit, spielerisch die Funktionsweise der Beugung und somit die Grundlagen, Stärken und Schwächen einer wichtigen analytischen Methode kennen zu lernen. Mit etwas Aufwand kann die scheinbar magische Fähigkeit von Kristallographen erworben werden, „im reziproken Raum zu denken“. Die Site präsentiert die Kristallographie als eine (noch) lebendige Wissenschaft und regt darüber hinaus den interessierten Wissenschaftler dazu an, ungelöste Strukturprobleme, welche bereits zur Seite gelegt wurden, neu zu überdenken.

Hans-Beat Bürgi  
Universität Bern (Schweiz)  
Thomas Weber  
ETH Zürich (Schweiz)

[1] <http://marie.epfl.ch/ic/SoftPro/crysplets.html>