

---

## Was Sie aus diesem *essential* mitnehmen können

Mit dem vorliegenden Kapitel haben wir eine Einführung in die Kristallstrukturanalyse erhalten. Nach Vorstellung der wichtigsten Methoden zur Röntgenanalytik wurde die Einkristall-Strukturanalytik näher beleuchtet.

Hinweisen über Einsatzbereiche der Kristallstrukturanalyse folgten theoretische Hintergründe über die verwendete Strahlung, deren Beugung am Kristallgitter sowie zur reziproken Betrachtungsweise bei Auswertung der Röntgenreflexe. Von gemessenen Reflexen werden die Strukturfaktoren berechnet, die mithilfe einer Strukturlösung normalerweise zu einem ersten, noch ungenauen Strukturmodell führen. In einer sich anschließenden Strukturverfeinerung werden Atompositionen und Auslenkungsparameter per Differenzfouriermethode bis zum endgültigen Molekül optimiert. Alle daraus gewonnenen Daten wie Koordinaten, thermische Parameter, kristallografische und geometrische Daten wurden detailliert erläutert. Auch verschiedene Gütekriterien, die es erlauben, die Qualität einer Kristallstrukturanalyse einzuschätzen, wurden gezeigt.

Aufgrund seiner entscheidenden Bedeutung für das Verständnis zum Aufbau des Kristalls wurde dem Thema Symmetrie mit den Unterkapiteln Kristallgitter, Raumgruppen und Symmetrieelemente ein wichtiger Abschnitt eingeräumt.

Dieses so kurz wie möglich gehaltene Buch versteht sich als eine Einführung in die Kristallstrukturanalyse. Hiermit ist es möglich, die von Spezialisten durchgeführte und die zumeist auch von diesen ausgearbeiteten Strukturanalysen zu verstehen, nachzuvollziehen und interpretieren zu können. Wenngleich hier schon eine nicht unerhebliche Menge Lehrstoff vermittelt wurde, der eine solide Grundlage darstellt, bietet sich für den interessierten Chemiker weiterführende Literatur

an, um einige Punkte zu vertiefen und speziell zu Strukturfaktoren, Strukturlösung und Verfeinerung, Kristallfehlern oder Zwillingsbildung weitere Kenntnisse zu erlangen. Hierfür sei sowohl gute deutschsprachige (Massa 2015) als auch englischsprachige Literatur (Glusker und Trueblood 2010; Blake et al. 2009; Ooi 2010) empfohlen.

---

# Literatur

- Allen FH et al (1995) International tables for crystallography. Mathematical, physical and chemical tables, Bd C. The International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers, S 685–791
- Anthony JE (2006) Functionalized acenes and heteroacenes for organic electronics. *Chem. Rev.* 106:5028–5048
- APEX3 (2015) Programm Xprep ist Teil des Programmpakets APEX3: Bruker AXS Inc. (2005–2015), 5465 East Cheryl Parkway, Madison, Wisconsin, USA, S 53711–5373
- Blake AJ, Clegg W, Cole JM, Evans JSO, Main P, Parsons S, Watkin DJ (2009) *Crystal structure analysis – principles and practice*. 2. Aufl. Oxford University Press
- Bragg WL (1912) The diffraction of short electromagnetic waves by a crystal. *Proc. Camb. Phil. Soc* 17:43–57
- CCDC: Cambridge Crystallographic Data Centre, 12 Union Road, Cambridge, CB2 1EZ, United Kingdom, <http://www.ccdc.cam.ac.uk>
- Corey RB, Pauling L (1951) The pleated sheet, a new layer configuration of polypeptide chain. *Proc Natl Acad Sci USA* 37:251–256
- Crowfoot Hodgkin D (1935) X-Ray Single Crystal Photographs of Insulin. *Nature* 135(3415):591–592
- Crowfoot D, Bunn CW, Rogers-Low BW, Turner-Jones A (1949) The X-Ray Crystallographic Investigation of the Structure of Penicillin. Princeton University Press, Princeton, S 310–366
- Deisenhofer J, Epp O, Miki K, Huber R, Michel H (1985) Structure of the protein subunits in the photosynthetic reaction centre of *Rhodospseudomonas viridis* at 3Å resolution. *Nature* 318:618–624
- Eanes ED, Donnay G (1959) Dimerization of trans-cinnamic to  $\alpha$ -truxillic acid. *Z. Kristallographie* 111(1–6):368–371
- Glusker JP, Trueblood KN (2010) *Crystal Structure Analysis – A Primer*. Oxford University Press, New York
- Hodgkin DC, Pickworth J, Robertson JH, Prosen RJ, Sparks RA, Trueblood KN, Vos A (1959) The structure of vitamin B<sub>12</sub>. II. The crystal structure of a hexacarbocyclic acid obtained by the degradation of vitamin B<sub>12</sub>. *Proc. Royal Soc. London A* 251(1266):306–352

- ICSD: Inorganic Crystal Structure Database, FIZ Karlsruhe, Hermann-von-Helmholz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany. <http://www2.fiz-karlsruhe.de>
- Incoatec I $\mu$ S-Microfocus Strahlenquelle: Firma Incoatec GmbH, Max-Planck-Str. 2, 21502 Geesthacht, Germany. [www.incoatec.de](http://www.incoatec.de)
- Int. Tab 1996: International Tables for Crystallography, Volume A., *Space-Group Symmetry*, The International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers, Springer Fachmedien, Wiesbaden (1996)
- Inrgartinger H, Weber A, Oeser T (1999a) Bestimmung der Elektronendichteverteilung in den Bindungen eines Fullerenderivats durch hochauflösende Röntgenstrukturanalyse. *Angew. Chem.* 111:1356–1358
- Inrgartinger H, Weber A, Oeser T (1999b) Determination of the Electron Density Distribution in the Bonds of a Fullerene Derivative by High-Resolution X-Ray Structure Analysis. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 38:1279–1281
- Johnson LN, Phillips DC (1965) Structure of some crystalline lysozyme-inhibitor complexes determined by X-ray analysis at 6 Angstrom resolution. *Nature* 206(4986):761–763
- Kendrew JC, Bodo G, Dintzis HM, Parrish RG, Wyckoff H, Phillips DC (1958) A Three-Dimensional Model of the Myoglobin Molecule obtained by X-Ray Analysis. *Nature* 181:662–666
- Massa W (2015) *Kristallstrukturbestimmung* 8. Aufl. Springer Spektrum, Wiesbaden, ISBN-10: 3658094117
- Mercury (2014): Grafiken erstellt mit Programm „Mercury CSD 3.3“. Cambridge Crystallographic Data Centre, 12 Union Road, Cambridge CB2 1EZ, United Kingdom
- Ooi LL (2010) *Principles of X-Ray Crystallography*. Oxford University Press, Oxford New York
- ORTEP-3 for Windows 2014.1: Farrugia LJ (2012). *J. Appl. Cryst.* 45:849–854. (Based on ORTEP-III (v 1.0.3) by Johnson CK and Burnett MN.)
- RCSB PDB: Rutgers, The State University of New Jersey, Center for Integrative Proteomics Research, 174 Freilinghuysen Rd, Piscataway, NJ 08854-8076. <http://www.rcsb.org>
- Robertson JM (1936) An X-ray Study of the Phthalocyanines. Part II. Quantitative Structure Determination of the Metal-free Compound. *J. Chem. Soc.* 0:1195–1209
- Röntgen WC (1898) On a new kind of rays. *Annalen der Physik.* 64:1, 12, 18
- Spek AL (2009) *A Multipurpose Crystallographic Tool*, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands. *Acta Cryst.* D65:148–155
- Wilkins MHF, Stokes AR, Wilson HR (1953) Molecular Structure of Deoxypentose Nucleic Acids. *Nature* 171(4356): 738–740. (Watson, Crick, Wilkins, Nobel Preis 1962)



**Jetzt im Springer-Shop bestellen:**  
[springer.com/978-3-662-58634-1](http://springer.com/978-3-662-58634-1)

