







Die Mitteilungen werden von der Redaktion der DGK (verantwortlicher Redakteur Prof. Dr. Dirk C. Meyer, Dresden) herausgegeben. Sie erscheinen in unregelmäßigen Abständen zweimal pro Jahr. Der Vorstand der DGK und die Redaktion der DGK-Mitteilungen weisen darauf hin, dass die Beiträge die Meinung des jeweiligen Autors wiedergeben.

Dieses Heft enthält je eine bezahlte Anzeige der Firmen AXO Dresden, Bruker AXS, Huber Diffraktionstechnik, Incoatec, Rigaku, Röntgenlabor Dr. Ermrich und STOE & Cie.

**Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:**

Prof. Dr. Dirk C. Meyer  
Institut für Experimentelle Physik  
Technische Universität Bergakademie Freiberg  
Leipziger Straße 23, 09599 Freiberg  
Tel.: +49-3731-39-2860, Fax: +49-3731-39-4314  
E-Mail: [dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de](mailto:dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de)

**Redaktionsbereiche:**

Anzeigen und Werbung: Tilmann Leisegang, [leisegang@physik.tu-dresden.de](mailto:leisegang@physik.tu-dresden.de)  
Veranstaltungshinweise: Christin Klein, [christin.klein@mailbox.tu-dresden.de](mailto:christin.klein@mailbox.tu-dresden.de)  
Herstellung: Hartmut Stöcker, [stoecker@physik.tu-dresden.de](mailto:stoecker@physik.tu-dresden.de)  
Versand: Dirk Spitzner, [dirk.spitzner@physik.tu-dresden.de](mailto:dirk.spitzner@physik.tu-dresden.de)

**Druck und Bindung:**

UNIdruckerei.de  
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: +49-351-3299696

## **Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.**

**Vorsitzender:** Prof. Dr. Udo Heinemann  
Max-Delbrück-Centrum für molekulare Medizin  
Robert-Rössle-Straße 10, D-13125 Berlin  
Tel.: +49-30-94063420, Fax: +49-30-94062548  
E-Mail: heinemann@mdc-berlin.de

**Stellvertretender Vorsitzender:** Prof. Dr. Wolfgang Neumann  
Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik, AG Kristallographie  
Newtonstraße 15, D-12489 Berlin  
Tel.: +49-30-20937861, Fax: +49-30-20937760  
E-Mail: wolfgang.neumann@physik.hu-berlin.de

**Schriftführer:** Prof. Dr. Norbert Sträter  
Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Institut für Bioanalytische Chemie  
Deutscher Platz 5, D-04103 Leipzig  
Tel.: +49-341-9731311, Fax: +49-341-9731319  
E-Mail: strater@bbz.uni-leipzig.de

**Schatzmeister:** Dr. Bernd Müller  
Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Physikalische Chemie  
Lessingstraße 10, D-07743 Jena  
Tel.: +49-3641-948317, Fax: +49-3641-948302  
E-Mail: bernd.mueller@uni-jena.de

**Vorsitzender des Nationalkomitees:** Prof. Dr. Ullrich Pietsch  
Universität Siegen, Fachbereich Physik  
Walter-Flex-Straße 3, D-57068 Siegen  
Tel.: +49-271-7403755, Fax: +49-271-7403763  
E-Mail: pietsch@physik.uni-siegen.de

**Vertreter in der DMG:** Prof. Dr. Ulrich Bismayer  
Universität Hamburg, Mineral.-Petrogr. Institut  
Grindelallee 48, D-20146 Hamburg  
Tel.: +49-40-41232050, Fax: +49-40-41232422  
E-Mail: ubis@mineralogie.uni-hamburg.de

**Vertreter in der DPG:** PD Dr. Leonore Wiehl  
Universität Frankfurt, Inst. f. Geowissenschaften, Facheinheit Mineralogie/Kristallographie  
Altenhöferallee 1, D-60438 Frankfurt am Main  
Tel.: +49-069-79840110, Fax: +49-069-79840109  
E-Mail: L.Wiehl@kristall.uni-frankfurt.de

**Homepage:** [www.dgkristall2.de](http://www.dgkristall2.de)

**Bankverbindung der DGK:** Sparda-Bank Hamburg  
BLZ: 206 905 00  
Konto-Nr.: 608 599  
SWIFT(BIC): GENODEF1S11  
IBAN: DE83 2069 0500 0000 6085 99

Liebe Mitglieder der DGK,

mit großer Freude darf ich Sie hier erstmalig als Vorsitzender der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie begrüßen. Im Namen des gesamten neu gewählten Vorstands darf ich für Ihr Vertrauen danken und meine Hoffnung ausdrücken, dass wir – gemeinsam mit Ihnen – der Kristallographie in Deutschland weiterhin ein lebendiges Forum mit vielen Möglichkeiten zu fruchtbarem wissenschaftlichen Austausch bieten können.

Von der 17. Jahrestagung der DGK in Hannover bin ich sehr optimistisch gestimmt nach Berlin zurückgekommen. Viele haben meinen eigenen Eindruck bestätigt, dass die Tagung sehr gut besucht war, herausragende Plenarvorträge und viele lebhaft Diskussionen in den Mikrosymposien geboten hat. Unser ganz herzlicher Dank gilt den Herren Professoren J.-C. Buhl und C. H. Rüschler und ihren vielen Mitarbeitern von der Leibniz-Universität Hannover für ihre Gastfreundschaft und perfekte Tagungsorganisation.

Wie jede Wissenschaft sieht sich die Kristallographie ständig neuen Herausforderungen gegenüber, die als Chancen oder auch als bedrohlich gesehen werden können. Herr Dr. D. Meyer (Dresden) hat im vergangenen Jahr die Initiative ergriffen, ein Diskussionsforum zur Zukunft der Kristallographie einzuberufen. Die 2008 in Dresden begonnenen Diskussionen wurden in Hannover fortgesetzt (Protokoll weiter hinten in diesem Heft). Die Gespräche zur Zukunft unserer Wissenschaft haben viele wichtige Punkte berührt und Fragen aufgeworfen. Es liegt jedoch in der Natur der Sache, dass abschließende Antworten noch nicht gegeben wurden. Ich wünsche mir sehr, dass sich viele an dieser Diskussion beteiligen, und bin gerne bereit, dabei als Moderator zu dienen.

In den beiden kommenden Jahren werden wir aus dem bekannten Rhythmus unserer Gesellschaft herausgeworfen, der durch die Jahrestagungen im März geprägt ist. Wie Sie wissen, wird es 2010 keine Jahrestagung geben. Stattdessen möchte die DGK nach Kräften das von Herrn Prof. H. Fuess organisierte European Crystallographic Meeting (ECM 26) in Darmstadt ([www.ecm26.org](http://www.ecm26.org)) unterstützen. Ich darf Sie schon jetzt auffordern, sich an der ECM 26 möglichst zahlreich mit wissenschaftlichen Beiträgen zu beteiligen. Dies ist eine besondere Gelegenheit, die Forschung der DGK-Mitglieder einem breiten europäischen Publikum vorzustellen.

Auch 2011 wird die Jahrestagung aus dem gewohnten Raster fallen. In diesem Jahr ist eine gemeinsame Tagung mit der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft in Salzburg geplant, die ebenfalls nicht im Frühjahr stattfinden wird. Erst 2012 kehren wir mit der Jahrestagung in München zu unserem bekannten Märztermin zurück.

Für die Kristallographie ist 2012 ein ganz besonderes Jahr, denn das 1912 publizierte Laue-Experiment markiert die Geburtsstunde der Kristallstrukturanalyse. Die Jahrestagung in München wird von diesem bedeutenden Jubiläum geprägt sein. Ich würde mir aber wünschen, dass es zusätzlich viele lokale Initiativen gibt, um dieses besondere Datum zu feiern. Die DGK wird gerne versuchen, Aktivitäten zum Laue-Jahr zu unterstützen und zu koordinieren.

Allen Mitgliedern wünsche ich für das nächste Jahr viel wissenschaftlichen Erfolg und persönliches Glück und bin mit besten Grüßen

Ihr  
Udo Heinemann



# INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	7
Protokoll der Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	9
Bericht von der 17. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie	25
2. Diskussionsforum zur Zukunft der Kristallographie	29
Zollamtliches Absurdistan: Mit Kristallen nach Amerika	33
Bericht von der Sitzung des ECA-Council's in Istanbul	36
Impressionen vom 25 <sup>th</sup> European Crystallographic Meeting	38
Kurzberichte von der ECM 25 in Istanbul	42
Fachverband Kristallographie auf der DPG-Frühjahrstagung 2010	50
<b>Die Arbeitskreise der DGK berichten:</b>	
Bericht zum DGK-AK1-Workshop „X-ray Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“	55
Die XXIX. Tagung des AK 4 Nichtkristalline und Partiiellkristalline Strukturen	57
Die XXX. Tagung des AK 4 Nichtkristalline und Partiiellkristalline Strukturen	59
Jahresbericht des AK 6 Molekülverbindungen	61
Workshop des AK 7 Neutronenstreuung: „Neutronen für Kristallographen“	63
Bericht des AK 9 Theoretische Kristallographie	65
Bericht des AK 15 Mineralogische und Technische Kristallographie	67
6. Intensivkurs zur Strukturanalyse Inkommensurabler Kristalle	69
4. Topas User's Meeting „Development and Application of MACROS using the Algebraic Language of TOPAS“	73

**Personalia:**

Wolfram Saenger – 70 Jahre	77
Laudatio anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Medaille der DGK an Prof. Dr. Rudolf Allmann durch Prof. Dr. Werner Fischer	79
Dankesrede für die Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze auf der DGK-Tagung	83
Laudatio zur Verleihung der Carl-Hermann-Medaille an Prof. Dr. Armin Kirfel	85
Feierliche Übergabe der Carl-Hermann-Medaille an Prof. Dr. Armin Kirfel	90
Laudatio auf den Max-von-Laue-Preisträger 2009 Dr. Johan Hattne	93
Auszeichnung für Prof. Dr. Sergey Vladimirovich Krivovichev	97

**Ankündigungen:**

EPDIC 12 und ECM 26 in Darmstadt	101
9. Hallesche Diskussions- und Arbeitstagung	104
Arbeitskreistagung des AK 11 Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung	105
Tagungen und Termine	107
Homepages von DGK, DMG und DGKK	116
Aufnahmeformular	117
Arbeitskreise der DGK	118
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	119

PROTOKOLL DER

**MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER  
DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR  
KRISTALLOGRAPHIE E. V. (DGK)**

AM 10.03.2009

IN DER LEIBNIZ-UNIVERSITÄT HANNOVER,  
WELFENSCHLOSS, AUDIMAX, WELFENGARTEN 1, 30167 HANNOVER

**1 Begrüßung**

Der Vorsitzende, W. Neumann (Berlin), eröffnet die Sitzung um 18:35 Uhr und begrüßt alle Anwesenden.

In Gedenken an verstorbene Mitglieder erhebt sich die Versammlung zu einer Schweigeminute:

Prof. Dr. Kurt Weber (Berlin)  
09.05.1926 – 23.12.2007

Prof. Dr. Helmut Witte (Darmstadt)  
18.07.1909 – 26.06.2008

**2 Feststellung der Beschlussfähigkeit**

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Es sind 126 DGK-Mitglieder anwesend. Laut §8, Abs. 5 der Satzung müssen mindestens 10 % der aktiven Mitglieder anwesend sein. Die aktuelle Zahl persönlicher Mitglieder beträgt 1043. Damit ist die Versammlung beschlussfähig.

**3 Annahme der Tagesordnung**

Der Vorstand schlägt vor, die im Heft 36 der DGK-Mitteilungen veröffentlichte Tagesordnung um den neu unter 6 einzuordnenden Punkt Arbeitskreise zu erweitern. Die Tagesordnung wird in ihrer so geänderten Form angenommen:

- 1 Begrüßung
- 2 Feststellung der Beschlussfähigkeit
- 3 Annahme der Tagesordnung
- 4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 04.03.2008 in Erlangen (veröffentlicht in den „Mitteilungen der DGK“, Heft 36)
- 5 Berichte:
  - 5.1 Bericht des Vorsitzenden
  - 5.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees
  - 5.3 Bericht des Schriftführers
  - 5.4 Bericht des Schatzmeisters
  - 5.5 Bericht der Kassenprüfer

- 5.6 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen
- 5.7 Bericht des Redakteurs der Homepage
- 5.8 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand
- 5.9 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand
- 5.10 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG
- 6 Tätigkeit der Arbeitskreise:
  - 6.1 Berichte
  - 6.2 Umbenennung des AK12 in „Spektroskopie“
- 7 Entlastung des Vorstandes
- 8 Wahlen:
  - 8.1 Wahl des Vorstandes
  - 8.2 Wahlen zum Nationalkomitee
  - 8.3 Wahlen zum Komitee für den Max-von-Laue-Preis
  - 8.4 Wahl des Komitees für den Preis Interdisziplinäre Kristallographie
  - 8.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr
- 9 Beschluss der Beitragsordnung
- 10 Jahrestagungen 2010 und 2011
- 11 Sonstiges

#### **4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung am 04.03.2008 in Erlangen**

Das Protokoll wird ohne Änderung angenommen.

#### **5 Berichte:**

##### **5.1 Bericht des Vorsitzenden**

#### BERICHT DES VORSITZENDEN AN DIE MITGLIEDERVERSAMMLUNG FÜR DEN ZEITRAUM MÄRZ 2008 BIS FEBRUAR 2009

##### ***1. Allgemeines***

Die 16. Jahrestagung der DGK wurde vom 03.03. bis 06.03.2008 im Kollegienhaus der Friedrich-Alexander-Universität in Erlangen veranstaltet. Den Erlanger Organisatoren unter der Leitung ihres Tagungspräsidenten, Prof. Andreas Magerl, und seinen Mitstreitern am Lehrstuhl für Kristallographie und Strukturphysik möchte ich nochmals recht herzlich für ihre Arbeit danken. In Erlangen wurde kein Max-von-Laue-Preis verliehen. Die Carl Hermann-Medaille für das wissenschaftliche Lebenswerk erhielt Prof. Burzlaff (Erlangen), der als erster Inhaber des Lehrstuhls für Kristallographie an der Universität Erlangen-Nürnberg mit seinen wegweisenden Arbeiten die Erlanger Kristallographie zu einem Zentrum der kristallographischen Grundlagenforschung und Messtechnik aufgebaut hat. In Erlangen wurde erstmalig die Will-Kleber-Gedenkmünze verliehen. Der erste Preisträger, Prof. Joachim Bohm (Berlin), erhielt die Auszeichnung für seine besonderen Verdienste um die Förderung der kristallographischen Lehre. Da Herr Prof. Bohm aus gesundheitlichen Gründen nicht persönlich an der Preisverleihung teilnehmen konnte, nahm stellvertretend für ihn sein Sohn, Dr. Martin Bohm, den Preis entgegen. Die feierliche Übergabe der Gedenkmünze an Herrn Bohm wurde im September 2008 am Lehrstuhl für Kristallographie der Humboldt-Universität zu Berlin vorgenommen. Ein kurzer Bericht zur Übergabe findet sich im Mitteilungsheft 37.

In diesem Jahr gibt es zwei Laue-Preisträger, Herrn Dr. Johan Hattne (Hamburg) und Herrn Dr. Lars Raue (Göttingen). Herr Dr. Johan Hattne erhält den Preis für seinen außerordentlichen Beitrag zur Entwicklung einer neuen Methode, um DNS und RNS automatisch in Elektronendichtekarten zu modellieren. Die Methode hat das Potential, die Kristallstrukturbestimmung von Polynukleinsäuren und Protein-Nukleinsäure-Komplexen zu revolutionieren. Herr Dr. Lars Raue wurde für seine richtungsweisenden Arbeiten zur Untersuchung von Texturen und Eigenschaften biologischer Materialien ausgezeichnet. Mit der Carl-Hermann-Medaille wird Prof. Armin Kirfel (Bonn) ausgezeichnet. Leider kann Herr Kirfel aus gesundheitlichen Gründen die Auszeichnung nicht persönlich entgegennehmen. Seine uns in Schriftform vorliegenden Dankesworte werden verlesen.

Die Will-Kleber-Gedenkmünze als Preis für hervorragende wissenschaftliche Leistungen auf ausgewählten Gebieten wird in diesem Jahr an Prof. Rudolf Allmann (Marburg) verliehen. Er erhält diese Auszeichnung für seine Arbeiten auf dem Gebiet der strukturorientierten Kristallographie und insbesondere in Würdigung seiner Verdienste um die *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD), wo er sich um die Pflege der Datensätze der anorganischen Strukturdatenbank verdient gemacht hat.

Die Arbeitskreise der DGK haben auch im Jahre 2008 mit zahlreichen Aktivitäten wesentlich zum wissenschaftlichen Leben der Gesellschaft beigetragen. Gesonderte Berichte zu den Veranstaltungen finden sich in den Mitteilungen.

Vom 23.08. bis 31.08.2008 fand in Osaka der XXI. IUCr-Kongress statt, an welchem 2617 Teilnehmer aus 66 Ländern teilnahmen. In der Länderstatistik nimmt Deutschland mit 157 Teilnehmern hinter dem Gastgeber Japan (969), den USA (312) und Großbritannien (189) den vierten Platz ein. In Osaka wurde ein neues Präsidium (Executive Committee) der IUCr gewählt. Damit endete auch die Mitgliedszeit von Prof. Heger (Aachen) als Mitglied des Executive Committee, dem ich an dieser Stelle ganz herzlich für seine geleistete Arbeit als Interessenvertreter der Kristallographie in Deutschland danken möchte. Für einen ausführlichen Bericht über die Tagung sei auf das Mitteilungsheft 37 verwiesen. Hier sind ebenso die Kurzberichte der 8 jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler enthalten, die von der DGK eine finanzielle Reisekostenunterstützung zur Teilnahme am IUCr-Kongress erhalten haben. Frau Alexandra K. Wolf von der Universität Frankfurt, eine der geförderten Nachwuchswissenschaftlerinnen wurde für Ihren Beitrag „Prediction and Experimental Determination of the Crystal Structure of SiBr<sub>4</sub>“ mit dem Posterpreis der Crystallographic Society of Japan (CrSJ) ausgezeichnet.

In diesem Jahr findet die europäische Kristallographietagung ECM 25 vom 16. bis 21. August in Istanbul statt. Für die Teilnahme an dieser Tagung können Nachwuchswissenschaftler bei der DGK eine finanzielle Unterstützung beantragen. Die Voraussetzungen für die Gewährung einer Unterstützung sind:

- Mitgliedschaft in der DGK
- Formloser Antrag an den Vorsitzenden der DGK
- Abstract des eigenen Beitrages für die Tagung
- Befürwortungsschreiben des betreuenden Hochschullehrers
- Nach der Tagung Kurzbericht über den eigenen Beitrag im Mitteilungsheft der DGK

## **2. Zuschuss zur Entrichtung des Mitgliedbeitrages 2009 für die IUCr**

Bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) wurde von der DGK der Antrag auf Übernahme des Mitgliedsbeitrages für die IUCr in Höhe von CHF 10.000 für das Jahr 2009 gestellt. Die Entscheidung darüber steht noch aus.

### **3. Stellung und Zukunft der Kristallographie in Lehre und Forschung in Deutschland**

Auf der Jahrestagung in Erlangen im März 2008 wurde darüber berichtet, dass im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung an der Universität Potsdam eine Arbeitsstelle „Kleine Fächer“ eingerichtet worden war, welche die Kartierung der so genannten kleinen Fächer vorgenommen hat. In diesem Zusammenhang wurde auch das Fach „Kristallographie“ kartographiert. Die Kartierung der kleinen Fächer ist jetzt im Buchhandel erhältlich bzw. kann auch direkt über die Homepage <http://www.hrk.de/berichteundpublikationen> der Hochschulrektorenkonferenz bestellt werden. Bibliographische Daten für die Bestellung im Buchhandel: „Die kleinen Fächer an den deutschen Universitäten. Bestandsaufnahme und Kartierung“, Redaktion: Norbert Franz, Cornelia Soldat, Oliver Stein, Bonn 2008 (Beiträge zur Hochschulpolitik 4/2008), Hrsg. Hochschulrektorenkonferenz. ISBN 978-938738-50-4. Das Projekt der Kartierung wird ab 1. März 2009 in einer zweiten Projektphase fortgesetzt und wird wieder von Frau Dr. Cornelia Soldat koordiniert. Die Adresse lautet:

Dr. Cornelia Soldat  
Universität Potsdam, Arbeitsstelle Kleine Fächer  
Am Neuen Palais 10, Haus 11, Raum 0.11, 14469 Potsdam  
Tel.: 0331-977-1451, Fax: 0331-977-70-1451  
Web: <http://www.uni-potsdam.de/u/slavistik/kleinefaecher>

Die DGK sollte mit dieser Kartographieeinrichtung die Zusammenarbeit fortsetzen und sich um eine Aktualisierung der Daten bemühen.

Vom 24. bis 26. September fand in Dresden das Diskussionsforum zum Thema „Zukunft der Kristallographie in Forschung und Lehre an deutschen Hochschulen“ statt. Die ausgezeichnete Vorbereitung und Organisation dieses Treffens wurde von Jun.-Prof. Dirk C. Meyer und den Mitarbeitern seiner Arbeitsgruppe bewerkstelligt, wofür wir ihnen herzlich danken. An dem Treffen haben sich ca. 25 DGK-Mitglieder beteiligt. Eine ausführliche Bestandsaufnahme über die Ergebnisse dieses Treffens findet sich im Heft 37 der Mitteilungen der DGK. Die Fortsetzung dieses Treffens mit zwei Sitzungsterminen ist im Anschluss an die DGK-Tagung am 12.03. und 13.03. in Hannover vorgesehen.

### **4. Deutscher Verband Technisch-Wissenschaftlicher Vereine (DVT)**

Auf der Vorstandssitzung des DVT am 7. Mai 2008 in Berlin wurde die DGK als Mitglied im DVT aufgenommen. Ein ausführlicher Bericht über den DVT und seine Arbeitsschwerpunkte wurde im Mitteilungsheft 36 publiziert. Die verschiedenen Aktivitäten und Dienstleistungen des DVT eröffnen der DGK neue Möglichkeiten, um die Stellung der Kristallographie, insbesondere für die Nachwuchssicherung, nachhaltig zu verbessern. Der Vorstand der DGK sollte über konkrete Schritte beraten, inwiefern wir die Angebote des DVT zur besseren Außendarstellung der Kristallographie nutzen können. Der Mitgliedsbeitrag für die DGK für das Jahr 2009 beträgt 574 €.

### **5. Bundesvereinigung für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (BV MatWerk)**

Die DGK gehört mit zu den Gründungsmitgliedern der Bundesvereinigung für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (BV MatWerk) und hat sich aktiv an der vom 1. bis 4. September 2008 in Nürnberg stattfindenden internationalen Tagung „Materials Science and Engineering“ (MSE08) beteiligt. So wurden die Mikrosymposien A19 „Functional Microporous Materials“ (W. Depmeier) und D17 „Future Developments in X-ray and Neutron based Characterisation Methods“ (E. Weckert, G. Heger) organisiert. Die Nachfolgekonferenz (MSE10) findet im Jahre 2010 in Nürnberg statt. Hier sollte sich die DGK auch wieder aktiv an der Ausrichtung des wissenschaftlichen Programms beteiligen.

Die BV MatWerk hat durch zahlreiche Aktivitäten auf dem Gebiet der Materialwissenschaften und der Werkstofftechnik im letzten Jahr auf sich aufmerksam gemacht. So wurde gemeinsam mit der DFG eine „Junge Akademie der Materialforschung und Werkstofftechnik“ ins Leben gerufen. Für die Aufnahme in diese Akademie (insgesamt 20 Plätze) konnten sich Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler, deren Promotion nicht länger als ein Jahr zurückliegt, mit einem Projektentwurf bewerben. Die besten 20 Antragsteller werden zu einem einwöchigen Seminar eingeladen, wo sie ihren Projektentwurf vortragen und im Kreis internationaler Experten diskutieren können. Im Anschluss an diese Veranstaltung ist dann ein wissenschaftlicher Projektantrag bei der DFG einzureichen, der nach positiver Begutachtung eine dreijährige Förderung der eigenen Arbeit gewährleistet.

Zum andern wurden von der DFG und der BV MatWerk das Programm „Research Grants for Young European Materials Scientists and Engineers for a Stay at a German Institution“ aufgelegt. Die ursprüngliche Bewerbungsfrist wurde verlängert. Gegenwärtig können noch Anträge eingereicht werden. Vielfältiges Informationsmaterial findet sich auf der BV MatWerk-Homepage.

Auf den letzten beiden Treffen der Geschäftsführer der Mitgliedsverbände, wo der Vorsitzende der DGK dankenswerterweise durch Frau Prof. S. Schorr vertreten wurde, wurden u. a. die Rahmenbedingungen für eine internationale Tagung der BV MatWerk abgesteckt. Diese Tagung wird frühestens im Jahre 2011 zum ersten Mal stattfinden. Die Struktur der Tagung soll neben einigen wenigen ausgewählten Plenarvorträgen vorwiegend aus Symposien bestehen, für welche die einzelnen Mitgliedsverbände verantwortlich zeichnen. Der jährliche Mitgliedsbeitrag für die DGK in der BV MatWerk beträgt 50 €.

## **6. *Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie***

Wie auf der Mitgliederversammlung in Erlangen beschlossen wurde, hat die DGK als Treuhänderin eine unselbständige Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie eingerichtet. Das Stiftungsvermögen in Höhe von 30.000 € wurde von einem Ehepaar, das zu Lebzeiten anonym bleiben möchte, gespendet. Zweck der Stiftung ist, die interdisziplinäre Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen. Er wird insbesondere verwirklicht durch die Vergabe eines Preises – in der Regel in einem Abstand von drei Jahren – an Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler für wissenschaftliche Arbeiten, in denen entweder Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie auf Probleme einer anderen Wissenschaft (Partnerwissenschaft) oder Methoden und Betrachtungsweisen einer Partnerwissenschaft auf Probleme der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden.

Partnerwissenschaften in diesem Sinne können nicht nur die klassischen Wissenschaften Physik, Chemie, Geowissenschaften, Biowissenschaften und Medizin sein, sondern jede Naturwissenschaft, Geisteswissenschaft und andere Wissenschaft. Kristallphysikalische, kristallchemische, festkörperphysikalische und festkörperchemische Arbeiten im engeren Sinne sollen bei der Auswahl nicht berücksichtigt werden, wenn sie jeweils der Kristallographie, der Physik, oder der Chemie allein zugeordnet werden können. Der Vorsitzende der DGK und der Schatzmeister der DGK haben mit dem Stifterehepaar sowohl die Satzung der Stiftung als auch die Ordnung zur Vergabe des Preises abgestimmt. Im Frühjahr 2008 fand dann die Unterzeichnung der Dokumente durch das Stifterehepaar und den Vorsitzenden der DGK statt. An dieser Stelle möchte ich nochmals dem Stifterehepaar für die großzügige Spende danken.

Die Satzung der Stiftung und die Ordnung für den Preis wurden im Mitteilungsheft 36 veröffentlicht. Der Preis kann erstmalig 2010 vergeben werden. Auf der diesjährigen Mitgliederversammlung sind die drei Mitglieder des Preiskomitees zu wählen.

---

## **5.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees (U. Pietsch)**

Der Kongress der „International Union of Crystallography“ fand im Jahr 2008 in Osaka statt. Es gab mehr als 2600 Teilnehmer aus 66 Staaten. Das wissenschaftliche Programm erwies sich als hochrangig. Insgesamt wurden wissenschaftlich Beiträge in insgesamt 98 Mikrosymposien, Haupt- und weiteren eingeladenen Vorträgen sowie mehreren 100 Postern präsentiert, die einen Überblick über alle Aktivitäten der Kristallographie repräsentierten. Besonderen Stellenwert genoss vor allem die Synchrotronstrahlung. Hervorhebenswert war auch die erstmalige Präsentation von Ergebnissen von Experimenten an freien Elektronenlasern und die Einrichtung eines speziellen Mikrosymposiums zu Detektorentwicklungen.

Wichtigste Ergebnisse der IUCr Versammlung sind:

1. Einrichtung einer neuen „Commission on Crystallography and Cultural Heritage“
2. Umbenennung der „Commission on Electron Diffraction“ in „Commission on Electron Crystallography“
3. Nächste Tagung: IUCr 22 am 22.–29.08.2011 in Madrid
4. Wahl des Austragungsortes der IUCr 23 am 05.–12.08.2014 in Montreal (Kanada)
5. Deutsche Mitglieder als Co-Editoren in Acta Cryst.: zur Zeit 1–3 Co-Editoren pro Heft aus Deutschland
6. Neue Präsidentin des Exekutivkomitees ist Prof. Sine Larsen (Dänemark) (zur Zeit ESRF-Direktorin)
7. Als neue Mitglieder des Exekutivkomitees wurden gewählt: E. Boldyreva (Russland), L. Delbaere (Kanada), J. M. Perez-Mato (Spanien), C. Lecomte (Frankreich). G. Heger schied nach sechsjähriger, erfolgreicher Zugehörigkeit aus dem Exekutivkomitee aus. Damit gibt es derzeit keinen deutschen Vertreter im Exekutivkomitee der IUCr.

Während der IUCr-Tagung fanden auch Sitzungen der European Crystallographic Association statt. Diese Sitzungen beschäftigten sich insbesondere mit der Vorbereitung des nächsten Europäischen Kongresses, ECM 25, der vom 16. bis 21. August 2009 in Istanbul stattfinden wird. Wichtige Deadline ist hier der 15. März 2009 für die Einreichung von Abstracts.

Die ECM 26 wird vom 29.08. bis 02.09.2010 in Darmstadt stattfinden. Die ECM 27 wird vom 06. bis 11.08.2012 in Bergen (Norwegen) durchgeführt.

## **5.3 Bericht des Schriftführers (H. Kirmse)**

Die aktuelle Anzahl der persönlichen Mitglieder beträgt 1043. Im März 2008 waren es noch insgesamt 1085 Mitglieder, womit ein leichter Rückgang der Mitgliederzahl zu verzeichnen ist. Dieser kann einerseits der Altersstruktur zugeschrieben werden, wonach viele Mitglieder in Pension gehen und teilweise aus der DGK austreten. Andererseits erklären auch wachgerüttelte und in der Vergangenheit eher passive Mitglieder nach Erinnerung an säumige Zahlungen ihren Austritt.

Im November 2008 wurde unter hohem zeitlichen Aufwand aus der Datenbank ein aktuelles Mitgliederverzeichnis erstellt, über Herrn Dirk Meyer in Druck gegeben und im Januar 2009 mit den Mitteilungen der DGK versendet. Auf diese Weise erhofft sich der Vorstand eine weitere Aktualisierung der in der Datenbank gespeicherten Koordinaten der Mitglieder. In selbigem Heft ist darüber hinaus die aktuelle Fassung der Satzung der DGK abgedruckt. Weiterhin findet man alle Unterlagen der neu geschaffenen Stiftungen für den Max-von-Laue-Preis und für die Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie.

#### 5.4 Bericht des Schatzmeisters (B. Müller)

B. Müller kommentiert den beigegeführten Finanzbericht.

<b>Jahresbilanz 2008 der DGK</b>			
<b>Einnahmen 2008</b>			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2008	20.913,75€	28.957,20 €
	Barzahler 2008	3.445,45€	
	Barzahler Nachzahlung	3.758,00€	
	Dauermitglieder	840,00€	
Spenden			0,00 €
Zinsen	Girokonto	5,70€	1.252,18 €
	Rücklagekonto 071	581,65€	
	Rücklagekonto 111	405,00€	
	Cashkonto 081	259,83€	
Berichte/Broschüren			15,00 €
Jahrestagung 2007			1.500,00 €
Anzeigen für Mitteilungen			6.785,00 €
<b>Summe Einnahmen</b>			<b>38.509,38 €</b>

Der Schatzmeister betont, dass entsprechend den Ausführungen in der Beitragsordnung die Bezahlung des Mitgliedsbeitrages im Regelfall per Bankeinzug erfolgen sollte. Durch die Versendung von Erinnerungsschreiben an Mitglieder, deren Beitragszahlung ausstand, konnten 120 Mitglieder reaktiviert werden. Leider gibt es noch etwa 200 Mitglieder, die sich mit der Beitragszahlung im Rückstand befinden.

<b>Ausgaben 2008</b>			
Mitteilungen			-9.419,22€
Arbeitskreise	Förderung	-8.837,15€	
	Rückführung	512,13€	-8.325,02€
Administration	Barzahler, Postgebühren	-153,09€	
	Stornogegebühren	-43,75€	
	Büromaterial,	-67,30€	-264,14€
Reisekosten & Spesen			-313,25€
Tagung Zukunft Kristallographie			-2.695,70€
Suppl. Krist 2008			-3.823,58€
Reisestipendium IUCr Osaka			-8.000,00€
Beiträge DGK ECA, DVT			-2.074,00€
Stiftung Interdisz. Kristallographie			-5,00€
Will-Kleber-Medaille			-3.582,41€
Spende Laue-Stiftung	Laue-Stiftung-Sparbuch	-419,14€	
	Laue-Stiftungskapital	-25.781,35€	-26.200,49€
<b>Summe Ausgaben</b>			<b>-64.702,81 €</b>
<b>Bilanz Ein- und Ausgaben 2008 der DGK</b>			<b>-26.193,43 €</b>
<b>Kontoführung 2008</b>			
Konto	01.01.2008	31.12.2008	Änderung
Giro	4.371,26 €	770,19€	-3.601,07€
DGK Rücklage 071	22.196,46 €	0,00€	-22.196,46€
DKG - Cash 081	10.963,09 €	10.567,19€	-395,90€
<b>Kapital der DGK</b>	<b>37.530,81 €</b>	<b>11.337,38 €</b>	<b>-26.193,43€</b>

<b>Jahresbilanz 2008 Max-von- Laue-Preis-Stiftung</b>			
<b>Einnahmen 2008</b>			
Zinsen	Laue-Sparbuch 051	24,61 €	
	Laue-Kapital 091	889,49 €	1.720,93 €
	Laue-Preis-Stiftung	806,83 €	
Spende DGK			26.200,49 €
<b>Summe Einnahmen</b>			<b>27.921,42 €</b>
<b>Ausgaben 2008</b>			
Laue-Preis 2008			0,00 €
<b>Summe Ausgaben</b>			<b>0,00 €</b>
<b>Bilanz Ein- und Ausgaben 2008</b>			<b>27.921,42 €</b>
<b>Kontoführung 2008</b>			
Konto	01.01.2008	31.12.2008	Änderung
Laue-Sparbuch 051	1.011,42 €	2.096,76 €	1.085,34 €
Laue-Kapital 091	33.970,76 €	0,00 €	-33.970,76 €
Laue-Preis-Stiftung	0,00 €	60.806,83 €	60.806,83 €
<b>Kapital der Stiftung</b>	<b>34.982,18 €</b>	<b>62.903,59 €</b>	<b>27.921,41 €</b>

Im Guthaben der Max-von-Laue-Preis-Stiftung in Höhe von insgesamt 60.000 € ist eine Spendensumme von 30.000 € enthalten, zu der jedes Mitglied mit einem Anteil von 30 € beigetragen hat.

<b>Jahresbilanz 2008 Interdisz.Krist.-Stiftung</b>			
<b>Einnahmen 2008</b>			
Zinsen	Sparbuch121	0,03 €	571,86€
	Laue-Preis-Stiftung	571,83 €	
DGK			5,00€
Stifter			30.000,00€
<b>Summe Einnahmen</b>			<b>30.576,86 €</b>
<b>Ausgaben 2008</b>			
Stiftungs-Preis 2008			0,00 €
<b>Summe Ausgaben</b>			<b>0,00 €</b>
Bilanz Ein- und Ausgaben 2008			<b>30.576,86 €</b>
<b>Kontoführung 2008</b>			
Konto	01.01.2008	31.12.2008	Änderung
Stiftungs-Sparbuch 121	0,00 €	5,03 €	5,03 €
Stiftungskapital	0,00 €	30.571,83 €	30.571,83 €
<b>Kapital der Stiftung</b>	<b>0,00 €</b>	<b>30.576,86 €</b>	<b>30.576,86 €</b>

#### 5.5 Bericht der Kassenprüfer (H. Zimmermann)

Die Kassenprüfung durch Frau Wiehl und Herrn Zimmermann ergab, dass die Kasse fehlerfrei geführt wurde.

#### 5.6 Bericht des Redakteurs der Mitteilungen der DGK (D. Meyer)

Herr Meyer dankt allen, die mit Beiträgen das Mitteilungsheft mit Leben erfüllen. Auch für das kommende Heft Nr. 38 bittet er wieder um Zuarbeiten. Letzter Termin für die Einsendung von Beiträgen ist der 01.09.2009.

#### 5.7 Bericht des Redakteurs der DGK-Homepage (G. Schuck)

Herr Schuck hat sich entschuldigt. H. Kirmse berichtet stellvertretend. Für die Homepage wird ein neues Design vorbereitet. Dieses basiert auf einem Content-Management-System, was es ermöglicht, auf allen Seiten das gleiche Design zu verwenden. Dies ist insbesondere für das einheitliche Erscheinungsbild der Seiten der Arbeitskreise wichtig. Herr Schuck ist per E-Mail ab sofort über die Adresse [goetz.schuck@dgkristall2.de](mailto:goetz.schuck@dgkristall2.de) erreichbar.

#### 5.8 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand (U. Bismayer)

Herr Bismayer ist entschuldigt. Stellvertretend berichtet C. Paulmann (Hamburg).

Die vorangegangene DMG-Vorstandssitzung erfolgte am 13.09.08 in der FU Berlin anlässlich der Jahrestagung der Gesellschaft und zum 100-jährigen Bestehen der DMG. In Berlin werden von der DMG folgende Medaillen und Preise verliehen: Thorsten Kleine erhält den Victor-Moritz-Goldschmidt-Preis. Mit der Abraham-Gottlob-Werner-Medaille in Silber werden Martin Okrusch und David Rubie geehrt. Den Ramdohr-Preis erhält Frau Katja Schmidt.

Mit Beginn dieses Jahres hat Falko Langenhorst (Bayreuth) den Vorsitz der DMG für die Zeit 2009–2011 übernommen. U. Bismayer nimmt ab 2009 den stellvertretenden Vorsitz ein.

Im Jahr 2009 werden von der DMG folgende Doktorandenkurse angekündigt:

- High-pressure experimental techniques and applications to the Earth's interior (Bayerisches Geoinstitut Bayreuth, 16.–20. Februar 2009, Kontakt: stefan.keyssner@uni-bayreuth.de)
- From atomistic calculations to thermodynamic modelling (Universität Frankfurt am Main, 23.–27. Februar 2009, Kontakt: b.winkler@kristall.uni-frankfurt.de)
- Non-destructive analysis of gemstones and other geomaterials (Universität Wien, 2.–6. März 2009, Kontakt: lutz.nasdala@univie.ac.at)
- Edelgase in Geochemie und Geochronologie (Geoforschungszentrum Potsdam, Frühjahr 2009, Dauer 3 Tage, Kontakt: nied@gfz-potsdam.de)
- Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung (Ruhr-Universität Bochum, 2.–5. Juni 2009, Kontakt: Michael.Fechtelkord@ruhr-uni-bochum.de)
- Introduction to secondary ion mass spectrometry in the Earth sciences (Geoforschungszentrum Potsdam, Sommer 2009, Dauer 4½ Tage, Kontakt: michawi@gfz-potsdam.de)
- Archäometallurgie (Universität Frankfurt am Main, 5.–9. September 2009, Kontakt: sabine.klein@kristall.uni-frankfurt.de)
- Mikroanalytik mit Laser-Ablations-Massenspektrometrie (Universität Frankfurt am Main, 5.–9. Oktober 2009, Kontakt: stefan.weyer@em.uni-frankfurt.de)

Die diesjährige DMG-Jahrestagung erfolgt in Halle vom 13. bis 17.09.2009, die weiteren Jahrestagungen in Münster 2010 und 2011 in Salzburg zusammen mit der DGK und den Österreichischen und Schweizer Gesellschaften. Vom 30.08. bis 04.09.2009 richtet die „Mineralogical Society of Great Britain and Ireland“ mit Beiträgen der DMG ihre Jahrestagung in Edingburgh aus (<http://www.minersoc.org/pages/meetings/MAPT/MAPT.html>). In der Zeit vom 10. bis 13.10.2010 findet in Darmstadt die Gemeinschaftstagung der Gesellschaften der festen Erde (GeoDarmstadt2010) statt.

## 5.9 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand (L. Wiehl)

Frau Wiehl berichtet über den kürzlich abgehaltenen Konvent, zu dem der Vorstand der DPG und die Leiter der 30 Fachverbände (FV) eingeladen waren. In dieser Runde wurden die Struktur und die thematische Ausrichtung der FV diskutiert. Einerseits wurde deren Vitalität eingeschätzt, wozu die Anzahl dem FV zuzuordnender Teilnehmer an der DPG-Frühjahrstagung, die Entwicklung (weniger die absolute Zahl) der Mitglieder des FVs, der regelmäßige Wechsel des Vorsitzes, eine regelmäßige Teilnahme eines Vertreters an den Sitzungen der Gremien und die Außendarstellung im

Internet herangezogen wurden. Andererseits wurden Statistiken basierend auf Zuarbeiten der Leiter der FV angefertigt. Diese sind für DPG-Mitglieder auf den Seiten der DPG zugänglich.

Prinzipiell sollen kleine FV erhalten bleiben, insbesondere dann, wenn sie zu wichtigen Themen beitragen, die einen hohen Stellenwert in der aktuellen Forschung einnehmen. Dies trifft auf den FV Kristallographie zu. Seitens des DPG-Vorstandes existiert Zustimmung zum FV Kristallographie. Man ist daran interessiert, das kristallographische Know-how in den Reihen der DPG zu erhalten.

## **5.10 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG (M. Braden)**

Herr Braden bestätigt den Bericht von Frau Wiehl über das Wohlwollen des Vorstandes der DPG gegenüber der DGK. Er ermutigt alle DGK-Mitglieder, die auch Mitglied der DPG sind, dem FV Kristallographie beizutreten und somit dem FV neue Impulse zu verleihen.

Seit 2005 gibt es die Initiative „junge DPG“ (jDPG). Über das Anliegen und die Veranstaltungen der jDPG kann man sich auf den Web-Seiten der DPG informieren. Seit 1997 ist die Zahl der Physikprofessuren um 12 % gesunken; viele der Stellen scheinen zur Schaffung von Professuren in der Informatik genutzt worden zu sein. Zum neuen Präsidenten der DPG wurde Prof. Dr. Wolfgang Sandner, Direktor des Max-Born-Instituts für Nichtlineare Optik und Kurzzeit-Spektroskopie im Forschungsverbund Berlin e. V., gewählt.

## **6 Tätigkeit der Arbeitskreise:**

### **6.1 Berichte**

Die Sprecher der Arbeitskreise berichten über zurückliegende und geplante Aktivitäten. Die Berichte der Arbeitskreise werden in Heft 38 der DGK-Mitteilungen veröffentlicht.

Neue Sprecher wurden gewählt:

AK 1 (Biologische Strukturen): Ralf Ficner (Göttingen)

AK 3 (Elektronenmikroskopie): Hans-Joachim Kleebe (Darmstadt)

AK 9 (Theoretische Kristallographie): Sybille Gemming (FZ Dresden-Rossendorf)

### **6.2 Umbenennung des AK12 in „Spektroskopie“**

Herr Fechtelkord erläutert die Gründe für die geplante Umbenennung des AK 12 „NMR-Spektroskopie“ in „Spektroskopie“. Nach kurzer Diskussion stimmt die Mitgliederversammlung der Umbenennung mit zwei Enthaltungen und ohne Gegenstimme zu.

## **7 Entlastung des Vorstandes**

Frau Wiehl (Frankfurt) beantragt die Entlastung des Vorstandes durch die Mitgliederversammlung. Dem Antrag wird bei 4 Enthaltungen zugestimmt.

## 8 Wahlen:

Die Mitgliederversammlung stimmt zu, die Moderation des Wahlaktes an den scheidenden Schriftführer (H. Kirmse, Berlin), der nicht mehr kandidiert, zu übergeben. Weiterhin gehört der Wahlkommission der scheidende stellvertretende Vorsitzende (W. Depmeier, Kiel) an.

### 8.1 Wahl des Vorstandes

Die Kandidaten werden für drei Jahre gewählt.

Vorsitzender: Udo Heinemann (Berlin)

Stimmen: ja: 114      nein: 1      Enthaltungen: 3      ungültig: 2

Stellvertretender Vorsitzender: Wolfgang Neumann (Berlin)

Stimmen: ja: 118      nein: 0      Enthaltungen: 2      ungültig: 0

Schatzmeister: Bernd Müller (Jena)

Stimmen: ja: 112      nein: 3      Enthaltungen: 1      ungültig: 4

Schriftführer: Norbert Sträter (Leipzig)

Stimmen: ja: 113      nein: 3      Enthaltungen: 1      ungültig: 3

Somit ist der neue Vorstand gewählt. Alle Kandidaten nehmen die Wahl an.

### 8.2 Wahlen zum Nationalkomitee

Dem Nationalkomitee gehören derzeit Ullrich Pietsch (Siegen), Wolfgang Schmahl (München), Manfred S. Weiss (Hamburg), Leonore Wiehl (Frankfurt), Thomas Schleid (Stuttgart) und Edgar Weckert (Hamburg) an. Die letzten beiden Kollegen amtieren bereits seit sechs Jahren und scheiden damit aus dem Komitee aus. Die Mitgliederversammlung dankt Ihnen für ihre Arbeit. Für die vakanten zwei Plätze kandidieren drei Kollegen.

Reinhard X. Fischer (Bremen)

Stimmen: ja: 55      nein: 1      Enthaltungen: 3      ungültig: 41

Christian Lehmann (Mühlheim)

Stimmen: ja: 43      nein: 0      Enthaltungen: 2      ungültig: 41

Dirk Meyer (Dresden)

Stimmen: ja: 58      nein: 0      Enthaltungen: 0      ungültig: 41

Anmerkung des Schriftführers: Als ungültig wurden solche Stimmzettel zugeordnet, auf denen im Gegensatz zu den möglichen zwei Stimmen alle drei Kandidaten angekreuzt waren.

Somit setzt sich das Nationalkomitee wie folgt zusammen:

- Ullrich Pietsch (Siegen)
- Wolfgang Schmahl (München)
- Manfred S. Weiss (Hamburg)
- Leonore Wiehl (Frankfurt)
- Reinhard X. Fischer (Bremen)
- Dirk C. Meyer (Dresden)

### **8.3 Wahlen zum Komitee für den Max-von-Laue-Preis**

Dem Komitee gehören bisher an: Caroline Röhr (Freiburg), Ralph Ficner (Göttingen), Ullrich Bismayer (Hamburg), Armin Kirfel (Bonn) und der Vorsitzende der DGK ex-officio. U. Bismayer und A. Kirfel scheidern nach sechsjähriger Amtszeit aus. Die Mitgliederversammlung dankt den beiden Kollegen für ihre Arbeit. Für die folgende Amtszeit kandidieren:

- Caroline Röhr (Freiburg)
- Ralph Ficner (Göttingen)
- Martin U. Schmidt (Frankfurt)
- Rainer Hock (Erlangen)

Die Mitgliederversammlung beschließt, in offener Wahl abzustimmen. Einstimmig werden die Kandidaten gewählt.

### **8.4 Wahl des Komitees für den Preis Interdisziplinäre Kristallographie**

Laut der Ordnung für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie besteht das Preiskomitee aus drei Mitgliedern, die für drei Jahre gewählt werden. Es kandidieren:

- Wulf Depmeier (Kiel)
- Susan Schorr (Berlin)
- Yves Muller (Erlangen)

Die Mitgliederversammlung beschließt, in offener Wahl abzustimmen. Die Kandidaten werden bei zwei Enthaltungen und ohne Gegenstimme gewählt.

### **8.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr**

Die bewährten Kassenprüfer Leonore Wiehl und Helmuth Zimmermann stellen sich auch für das kommende Geschäftsjahr für diese Funktion zur Verfügung. Sie werden bei zwei Enthaltungen und ohne Gegenstimme gewählt.

## **9 Beschluss der Beitragsordnung**

Der in seinem Amt bestätigte Schatzmeister beantragt, die Beitragsordnung unverändert zu belassen. Die Mitgliederversammlung stimmt dem Vorschlag einstimmig zu.

Im Weiteren erläutert Herr Müller die finanzielle Unterstützung der Arbeitskreise im Jahr 2009 (siehe Tabelle).

AK	Arbeitskreis	Sprecher	Antrag 2009	Beschluss
1	Biologische Strukturen	Manfred S. Weiss	2.000,00 €	2.000,00 €
2	Hochdruck-Kristallographie	Ulrich Schwarz		
3	Elektronenmikroskopie	Matthias Rodewald		
4	Nichtkristalline Strukturen	Bernd Müller	1.500,00 €	1.500,00 €
5	Kristallphysik	Jürgen Schreuer		
6	Molekülverbindungen	Christian Lehmann	2.000,00 €	2.000,00 €
7	Neutronenstreuung	Martin Meven		
9	Theoretische Krist.	Helmuth Zimmermann		
10	Mikroskopie	Jörg Trempler		
11	Synchrotron, Topographie	Ullrich Pietsch	2.000,00 €	2.000,00 €
12	NMR-Spektroskopie	Michael Fechtelkord	600,00 €	600,00 €
13	Pulverdiffraktometrie	Robert Dinnebier	2.000,00 €	2.000,00 €
14	Computerkristallographie	Gerhard Raabe	1.500,00 €	1.500,00 €
15	Mineral.& Techn. Krist.	Herbert Pöllmann		
16	Aperiodische Kristalle	Sander van Smaalen	2.000,00 €	2.000,00 €
17	Kristallographie Lehre	Reinhard Neder		
18	Grenzflächen	Guntram Jordan		
19	Kristallchemie	Michael Scheid		
		<b>Summe</b>	<b>13.600,00 €</b>	<b>13.600,00 €</b>

Zusätzlich weist er auf die Unterstützung hin, die Nachwuchswissenschaftlern für die Teilnahme an der europäischen Kristallographietagung ECM 25 vom 16. bis 21. August in Istanbul gewährt wird.

## 10 Jahrestagungen 2010 und 2011

H. Fuess erinnert, dass 2010 die Jahrestagung in die ECA-Tagung in Darmstadt integriert wird. Diese Tagung wird mit der EPDIC kombiniert. Beide Konferenzen werden einen gemeinsamen Tag haben:

- EPDIC: 27.08. bis 30.08.2009
- ECA-Tagung: 29.08. bis 02.09.2009

Während der ECA-Tagung wird auch die jährliche Mitgliederversammlung durchgeführt.

Herr Fuess bittet bei dieser Gelegenheit nochmals eindringlich um Zuarbeiten für den deutschen Beitrag zu den IUCr-Newsletters.

Herr Neumann erläutert den bisherigen Planungsstand für die DGK-Tagung 2011. Sie wird in Salzburg gemeinsam mit der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (ÖMG) unter der örtlichen Leitung von Herrn Amthauer ausgerichtet. Im Moment wird als Termin die zweite Hälfte des Septembers 2011 favorisiert.

## 11 Sonstiges

Keine Wortmeldungen.

Abschließend dankt der alte Vorsitzende allen scheidenden Mitgliedern des Vorstands und der Kommissionen für die gute Zusammenarbeit in den vergangenen drei Jahren. Udo Heinemann übernimmt zum Abschluss das Wort. Er verleiht seiner großen Vorfreude auf die Zusammenarbeit Ausdruck. Gleichzeitig ermuntert er alle Mitglieder, aktiv am Leben der DGK teilzunehmen.

Die Mitgliederversammlung wird um 20:35 Uhr geschlossen.

W. Neumann  
(Vorsitzender)

H. Kirmse  
(Schriftführer)

Hannover, 10.03.2009



BERICHT VON DER

# 17. JAHRESTAGUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE

09.–12. MÄRZ 2009, HANNOVER

The 17<sup>th</sup> annual meeting of the German Crystallographic Society, 9<sup>th</sup> to 12<sup>th</sup> of March 2009, was organized within the “Welfenschloss Hannover” which is the main building of the Leibniz University of Hannover (LUH). The local organising committee was headed by J.-C. Buhl and C. H. Rüscher, Department of Mineralogy, and conducted through the Conventus Congress Management and Marketing GmbH, Jena. There have been 7 plenary lectures, and 118 chosen talks and 200 posters distributed in 18 sessions. The posters were permanently presented in the central place of the meeting in the “Lichthof” of the “Welfenschloss Hannover”. There was a very high frequentation of all the contributions, oral and poster, by the 490 counted participants.

The scientific program was wide spread reflecting, however, the central importance of the crystallographic tools. This maybe highlighted by the plenary lectures:

- Polarons and Bipolarons in Cuprates and Manganates (A. S. Alexandrov, Loughborough, UK).
- Crystallization control in classical and nonclassical crystallization (H. Cölfen, MPI Potsdam, Germany)
- High-pressure phases under the electron morcoscope – insights into the Earth’s interior (F. Langenhorst, Bayreuth, Germany)
- Metamaterials: new playground for modern physics (A. Pimenov, Würzburg, Germany)
- Structure of the Stress Hormone Receptor: beta1 Adrenergic Receptor (G. F. X. Schertler, Cambridge, UK)
- Materials chemistry of nonmetal nitrides – from structural fundamentals to practical applications (W. Schnick, München, Germany)
- Complexity of intermetallics (W. Steurer, Zürich, Switzerland)

All the contributions are documented within the book of abstracts published in Zeitschrift für Kristallographie 2009, Suppl. Issue No. 29 (Oldenburg Verlag, München).

Special thanks again to the excellent support by all session leaders, to the support given by LUH for preparing the lecture halls and the “Lichthof” for the poster presentation and firm exhibition, and to Conventus Congressmanagement & Marketing GmbH, Jena for the excellent cooperation and organization of this annual meeting in Hannover 2009. Special thanks to all participants.

Claus Rüscher, Institut für Mineralogie, LUH

IMPRESSIONEN VON DER  
17. JAHRESTAGUNG DER DEUTSCHEN  
GESELLSCHAFT FÜR  
KRISTALLOGRAPHIE

09.–12. MÄRZ 2009, HANNOVER

**490 Teilnehmer aus insgesamt 15 Ländern**

- Algerien 1
- Aserbaidschan 1
- Australien 1
- Deutschland 455
- Finnland 1
- Frankreich 2
- Indien 2
- Iran 1
- Niederlande 1
- Nigeria 4
- Österreich 9
- Russland 6
- Schweiz 9
- Spanien 4
- Großbritannien 3



**335 Abstracts**

- Plenarvorträge: 7
- freie Vorträge: 118
- Poster: 201
- Late-Abstracts: 9



**25 Aussteller und Sponsoren**

- Hersteller: 19



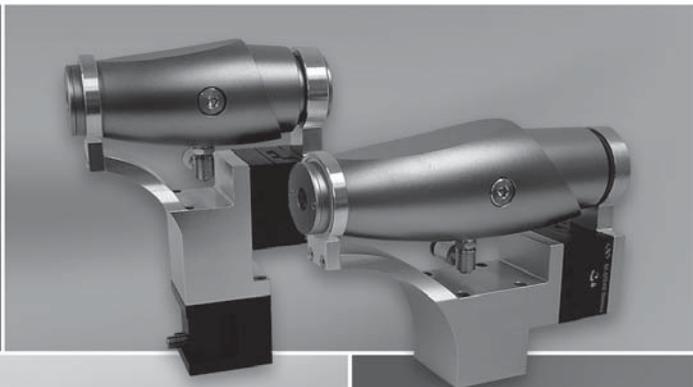
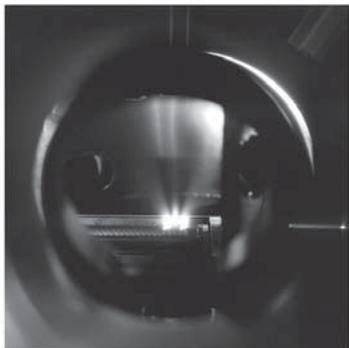


*Postersession im Lichthof des Welfenschlosses Hannover*



*Ansprache des DGK-Vorsitzenden Prof. Udo Heinemann beim Gesellschaftsabend*

# Multilayer X-ray Optics High Precision Deposition



- One- and two-dimensional focusing and parallel beam multilayer X-ray optics  
Optimized for X-ray reflectometry, high resolution and single crystal diffraction  
Up-grade of all common XRD systems
- Synchrotron optics from EUV to hard X-ray region
- Nanometer-thin films using high precision large area deposition (8" diameter / 500mm length)



**AXO Dresden GmbH**

Applied X-ray Optics Röntgenoptik und Präzisionsbeschichtung

Siegfried-Rädel-Str. 31 · 01809 Heidenau · Germany

phone: +49-351-2583-249 · fax: -49-351-2583-314

contact@axo-dresden.de · www.axo-dresden.de

## 2. DISKUSSIONSFORUM ZUR ZUKUNFT DER KRISTALLOGRAPHIE

Im Anschluss an die Jahrestagung der DGK in Hannover trafen sich am 12. März 2009 über 20 DGK-Mitglieder, um die beim Arbeitstreffen „Zur Lage der Kristallographie“ in Dresden (25./26.09.2008) begonnene Diskussion weiterzuführen. Eine Zusammenfassung der Diskussion ist nachfolgend wiedergegeben. Einige der diskutierten Themenkomplexe sollen in kleineren Gruppen weiter diskutiert und dem Diskussionsforum zu gegebener Zeit zur weiteren Beratung vorgelegt werden.

### GLIEDERUNG

1. Analyse
2. Visionen
3. Projekte
4. Verbands- und Lobbyarbeit
5. Jubiläumsjahr 2012

### 1. ANALYSE

Die Diskussion behandelte in unterschiedlichen Variationen die Frage: Wie kann sichergestellt werden, dass Kristallographie an den Universitäten in Forschung und Lehre erhalten bleibt?

Unter den Diskussionsteilnehmern bestand breites Einvernehmen darüber, dass die Kristallographie heute und in absehbarer Zukunft unverzichtbarer Bestandteil grundlagenorientierter und angewandter Forschung ist, besonders auch im Kontext fächerübergreifender Großprojekte. Es wurden Beispiele für die Beteiligung kristallographischer Gruppen an lokalen und überregionalen Forschungsverbänden genannt und es wurde angeregt, solche Beteiligungen in Zukunft verstärkt zu suchen. Dabei sollten „Verbündete“ aus ferner liegenden Fachgebieten gesucht werden, etwa aus der Biologie. Einige Diskussionsteilnehmer vertraten die Ansicht, dass der Fortbestand der Kristallographie eher aus der Forschung als aus der akademischen Lehre heraus gesichert werden könne.

Ein möglicher Grund für den Verlust kristallographischer Lehrstühle an deutschen Universitäten wurde in der traditionellen Anbindung an die Mineralogie bzw. die Geowissenschaften im Allgemeinen vermutet, deren finanzielle Mittel und Bedeutung im Inland eher abnehmen. Es wurde beschrieben, dass die Bindung der Kristallographie an die Mineralogie immer mehr aufgehoben wird, wobei lokale Gesichtspunkte an einzelnen Standorten sehr wohl zu beachten seien. Als Alternative wurde vorgeschlagen, eine engere Bindung der Kristallographie an die Materialwissenschaften zu suchen. Übereinstimmung bestand dahingehend, dass es gilt, das Überleben des Fachgebiets Kristallographie und nicht von Institutionen (Institute, Lehrstühle) zu sichern, wenn auch beide nicht völlig voneinander getrennt werden können.

Zur Frage der kristallographischen Lehre verständigte man sich zunächst darauf, dass, vor dem aktuellen sozioökonomischen Hintergrund mit breiteren Bildungsangeboten und steigenden Studentenzahlen gemessen an der Gesamtbevölkerung, das klassische

Humboldtsche Bildungsideal als Leitfaden universitärer Lehre nur noch sehr bedingt taugt. Es wurde vorgeschlagen, sich stattdessen verstärkt mit dem europäischen Bologna-Prozess und den daraus folgenden Bachelor- und Master-Studiengängen auseinanderzusetzen. In diesem Kontext wurde auf die von Prof. M. Nespolo (Nancy) koordinierte Initiative der European Crystallographic Association zur koordinierten kristallographischen Lehre (Erasmus-Mundus-Programm der EU) verwiesen. Eine intensive Diskussion wurde zu der Frage geführt, wie kristallographische Lehre sichergestellt werden kann, wenn Lehrstühle an einzelnen Universitäten verloren gehen. Ein verstärktes Engagement der DGK in der Konzeption und Durchführung von Lehrangeboten wurde als ein möglicher Ausweg gesehen.

Die Bildung einer Kommission zur Ausarbeitung eines Konzepts für eine Grundlagenvorlesung (Workshop) über Kristallographie im Rahmen der DGK und deren Einordnung ins universitäre Umfeld wurde angeregt. Dieser Kommission sollen angehören:

- Sibylle Gemming
- Theo Hahn
- Dirk Meyer
- Susan Schorr
- Leonore Wiehl
- N. N. (Bereich Biokristallographie)
- N. N. (Bereich Chemie)

## 2. VISIONEN

Für einige Fachgebiete der Kristallographie wurden Visionen für eine zukünftige Ausrichtung exemplarisch diskutiert.

In der Biokristallographie wurde die Beobachtung großer Moleküle mit hoher Orts- und Zeitauflösung in ihrer zellulären Umgebung als Fernziel für zukünftige Untersuchungen angesehen. In diesen Forschungsansätzen würde die Kristallographie im Verbund mit anderen zell- und strukturbioologischen Methoden eingesetzt. Eine besondere Bedeutung wurde dabei neuen Techniken der hochauflösenden Licht-, Fluoreszenz- und Elektronenmikroskopie, sowie der Elektronenkristallographie zugewiesen. Das besondere Potenzial von Synchrotrons und Freie-Elektronen-Lasern für die Zukunft der Strukturbioologie wurde betont.

Breite Übereinstimmung bestand in der Einschätzung, dass eine besondere Bedeutung der Kristallographie in den Materialwissenschaften liegen wird. Die Kristallographie wurde an der Schnittstelle von experimentellen Ansätzen gesehen, die einer Erklärung der Funktionsweise neuer Materialien und ihrer Eigenschaften unter extremen Bedingungen (z. B. hohe Drücke) dienen, beispielsweise im Sinne von Struktur-Eigenschafts-Korrelationen. Als Beispiele neuer Materialien wurden metallischer Wasserstoff, mit Anwendungen in der Wasserstoffspeicherung, und Metamaterialien jenseits der Multiferrozität genannt. Spezifische Beiträge der Kristallographie zu den Materialwissenschaften wurden in ultraschnellen Röntgenexperimenten bei *In-situ*-Analysen und der Untersuchung winziger Substanzmengen mittels Elektronenkristallographie gesehen. Auf die Bedeutung der Theorie für die Simulation nicht direkt zugänglicher Materialeigenschaften wurde ebenfalls hingewiesen. Ein starker Anwendungsbezug kristallographischer Analysen in den Materialwissenschaften wurde ebenfalls betont: Letzten Endes gehe es darum, in Anwendungen wie dem Defekt-Engineering und des atomaren Designs „den Atomen zu sagen, wo sie hingehen sollen“, wurde ausgeführt.

Starke globale Forschungstrends mit potenzieller Beteiligung der Kristallographie wurden auch in der pharmakologischen Forschung und der Umweltforschung, hier besonders in Bezug auf die Energieproblematik, erkannt. Es wurde betont, dass die zukünftige Rolle der Kristallographie in den genannten Forschungsfeldern von der Ausbildung des kristallographischen Nachwuchses entscheidend abhängt. Gefordert wurde eine Analyse, über welche Kompetenzen Kristallographen in diesen zukunftsweisenden Forschungsgebieten verfügen müssten. Als entscheidend für die Zukunft der Kristallographie wurde auch angesehen, dass die konkreten Beiträge kristallographischer Forschung für diese Gebiete klar herausgestellt werden. Sowohl neue kristallographische Methoden, theoretische Beiträge als auch Instrumentierungen wurden hier genannt.

Zur vertieften Diskussion über Visionen zur Kristallographie der Zukunft wurde die Bildung einer Arbeitsgruppe vorgeschlagen, die zukunftsweisende Forschungsthemen zusammenfassen und allgemeinverständlich formulieren soll, und welche die konkreten Beiträge der Kristallographie klar herausarbeiten soll. Die personelle Zusammensetzung dieser Arbeitsgruppe wurde nicht abschließend vereinbart.

### 3. PROJEKTE

In einer kurzen Diskussion wurde auf die wachsende Bedeutung der Drittmittelwerbung für die kristallographische Forschung hingewiesen. Alle Mitglieder der DGK wurden ermuntert, die Möglichkeiten ihrer Beteiligung an einschlägigen Schwerpunktprogrammen zu prüfen. Hingewiesen wurde in erster Linie auf die bekannten Förderinstrumente der Deutschen Forschungsgemeinschaft wie Graduiertenkollegs, Forschergruppen, Schwerpunktprogramme und Sonderforschungsbereiche (auch Transregio-SFBs). Es wurde auch angemerkt, dass in 2009 wieder eine Ausschreibung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung im Rahmen der Großgeräteforschung ansteht.

### 4. VERBANDS- UND LOBBYARBEIT

Eine intensiverte Verbands- und Lobbyarbeit der DGK wurde für essenziell gehalten. Die Mitgliedschaft der DGK im Deutschen Verband Technisch-Wissenschaftlicher Vereine (DVT) und in der Bundesvereinigung Materialwissenschaft und Werkstofftechnik e. V. (BV MatWerk) wurde als gute, aber möglicherweise noch nicht ausreichende Grundlage für Lobbyarbeit zu Gunsten der Kristallographie angesehen. Sowohl der DVT als auch die BV MatWerk sollen über Prof. W. Neumann und andere mit Material über die DGK versorgt werden.

Auch die eigene Außendarstellung der DGK wurde als verbesserungsfähig gesehen. So wurde der Wunsch geäußert, die Jahrestagungen der DGK durch aktive Pressearbeit einem breiteren Publikum zur Kenntnis zu bringen. Es wurde diskutiert, ob die DGK einen Pressesprecher oder einen Beauftragten für Öffentlichkeitsarbeit haben soll.

### 5. JUBILÄUMSJAHR 2012

Abschließend wurde noch kurz über das Laue-Jahr 2012 diskutiert, in dem sich die Publikation über das erste Röntgendiffraktionsexperiment an einem Kristall (W. Friedrich, P. Knipping, M. von Laue: *Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen*. In: *Bayerische Akademie der Wissenschaften, Sitzungsberichte*, 1912, S. 303–322) zum hundertsten Mal jährt. Es bestand breite Übereinstimmung, dass die DGK dieses wichtige Jubiläum

angemessen gestalten soll. Als bedeutendster Rahmen für Veranstaltungen zum Laue-Jahr wurde die Jahrestagung 2012 in München gesehen, die entsprechend ausgestaltet werden soll. Herr Depmeier regte dazu eine Kooperation mit dem Deutschen Museum in München an. Es wurden auch Namen für Redner vorgeschlagen, die eine Würdigung der Leistung Laues und seiner Mitarbeiter im Rahmen der DGK-Jahrestagung und möglicherweise bei anderen Anlässen vornehmen könnten. Angeregt wurde auch, zu lokalen Aktivitäten im Rahmen des Laue-Jahrs aufzurufen.

Dass die Aktivitäten der DGK zum Laue-Jahr in einem breiteren internationalen Kontext zu sehen sind, wurde ebenfalls betont. Es wurde auf die Notwendigkeit hingewiesen, sich mit den Veranstaltern des European Crystallographic Meetings (ECM 27) 2012 in Bergen und mit der International Union of Crystallography wegen geplanter Veranstaltungen im Laue-Jahr zu verständigen. Ob es möglich sein könnte, das Jahr 2012 national oder international zu einem „Jahr der Kristallographie“ ausrufen zu lassen, konnte nicht geklärt werden.

U. Heinemann und D. Meyer

#### TEILNEHMERLISTE

Josef-Christian Buhl  
Wulf Depmeier  
Karl Fischer  
Reinhard X. Fischer  
Sibylle Gemming  
Thorsten Gesing  
Hermann Gies  
Jürgen Glinnemann  
Theo Hahn  
Udo Heinemann  
Holm Kirmse  
Dirk Meyer  
Bernd Müller  
Erich Paulus  
Peter Schmid-Beurmann  
Andreas Schönleber  
Susan Schorr  
Jürgen Schreuer  
Hartmut Stöcker  
Sander van Smaalen  
Leonore Wiehl

# ZOLLAMTLICHES ABSURDISTAN: MIT KRISTALLEN NACH AMERIKA

Bildung und Forschung genießen ja, wie jedermann weiß, hierzulande einen hohen Stellenwert und allgemeine Unterstützung, besonders bei Politikern in Wahlkampfzeiten. Am Wahlabend um 18:01 Uhr ändern sich zwar die Perspektiven, aber daran haben wir Wissenschaftler uns inzwischen gewöhnt. Dessen ungeachtet bemühen wir uns, so gut wir können und wie es Mode ist, interdisziplinär, international und möglichst in großen Verbänden, Clustern, Schwerpunkten zu neuen Erkenntnissen zu kommen, denn individuelle Forschung ist ja nichts mehr wert. Ein gewisser Herr Einstein, dem in der Einsamkeit seines Berner Patentamtes die Relativitätstheorie eingefallen ist, wäre heute gar nicht mehr förderungswürdig.

Dies alles vor Augen haben wir uns vor einiger Zeit um Synchrotron-Messzeit an der Small Molecule Beamline der Advanced Photon Source (APS) in Argonne bei Chicago bemüht, der ein hervorragender Ruf für hochaufgelöste Experimente für die Elektronendichteforschung vorauselte (und der sich später in jeder Beziehung bestätigte). Natürlich war wie bei allen Großforschungseinrichtungen vorher ein Projektantrag erforderlich, der bei dem in den USA üblichen Ranking auch bestens durchkam und uns sogar etwas mehr Messzeit einbrachte als wir überhaupt beantragt hatten. So schlecht konnte unser Proposal also nicht gewesen sein.

Nun braucht man bekanntlich zum Messen von Einkristalldaten auch Kristalle und damit fing das eigentliche Problem an. Wir hatten eine beachtliche Anzahl von Proben von mehr als 20 Verbindungen vorbereitet. Angesichts der strengen Sicherheitsbestimmungen, insbesondere bei Flugreisen in die USA, haben wir nicht gewagt, unsere Proben im einzucheckenden und schon gar nicht im Handgepäck mitzunehmen. Also wurde ein Kurierdienst beauftragt, alles was wir in Argonne zu brauchen meinten (Kristalle, Präparierbestecke, Glasgeräte, Probenträger usw.), per Luftfracht in die USA zu befördern, was innerhalb weniger Tage zu halbwegs akzeptablen Gebühren gehen sollte. Sollte, denn auf dem Hinweg schlug erstmalig der Zoll zu und zwar der amerikanische. Wir erfuhren zunächst, dass unsere Fracht nicht ausreichend deklariert sei. Wir hatten den Inhalt zwar wahrheitsgemäß als „non toxic“, „non explosive“ und „harmless“ deklariert, aber nun bemühten wir uns noch, jede einzelne Verbindung mit Strukturformel und Eigenschaften zu beschreiben. Das reichte aber nicht, denn wir hatten es auch unterlassen, einen Warenwert anzugeben. Das ging aber gar nicht. Man darf nichts in die USA einführen, was keinen kommerziellen Wert hat. Jetzt mussten wir darüber nachdenken, was die paar Krümel, die wir oder unsere präparativen Kollegen produziert hatten, wert waren. Man konnte sehr wohl auf einen Warenwert null kommen, denn niemand würde uns wohl unsere Kristalle abkaufen wollen. Also fingen wir an, den Wert der Chemikalien abzuschätzen, die zur Synthese unserer Proben verwendet wurden, fügten noch die Preise der Glasgeräte und des sonstigen Zubehörs hinzu und kamen guten Gewissens auf eine Summe, die dem amerikanischen Zoll schließlich genehm war. Mehrere Telefonate über den Atlantik (vielen Dank an die Leute vom Kurierdienst für ihre sehr professionelle Hilfe hierbei!) und unsere Fracht kam frei und landete noch vor unserer Ankunft auf dem Tisch unseres Beamline-Betreuers.

Auf diesen ersten Akt folgte natürlich ein zweiter, denn unser Zeug musste ja wieder zurück. Also wieder Kurierdienst, diesmal gleich von Null verschiedene Wertangabe. Trotzdem, jetzt schnappt sich der deutsche Zoll unser Paket, und nun wird es wirklich absurd bei dem

Ansinnen, hierfür Zoll zu kassieren. Wir weisen zunächst darauf hin, dass wir gar keine Ware aus den USA eingeführt haben, sondern dass es sich ja um unser bzw. unserer Universität Eigentum handelt, das wir erst vor ein paar Tagen in die USA verbracht hatten. Das würde keine Rolle spielen, werden wir belehrt. Wenn wir das geltend machen wollten, hätten wir unsere Sendung versiegelt in die USA und zurück schicken müssen ohne sie dort zu öffnen. Wir wenden ein, dass wir unter diesen Bedingungen unsere Kristalle in Argonne nicht hätten messen können und unsere Reise dann nur noch touristischen Charakter gehabt hätte, was angesichts der Reisekosten unserem Dienstherrn sicher sehr missfallen hätte. Das ist aber zollamtlich nicht relevant.

Nun wird auch noch unsere Wertangabe angezweifelt. Wir sollen genaue Mengenangaben für unsere Proben machen. Dummerweise haben wir sie vorher nicht abgewogen. Unsere Angabe, einige Milligramm pro Probe, ist zollamtlich nicht hinreichend genau. Alternativ könnte der Wert auch nach Stückzahlen bestimmt werden, wird uns geraten, um uns aus der vermeintlichen Patsche zu helfen. Wir bekennen, nun schon ganz kleinlaut, dass wir unsere Kristalle auch nicht gezählt haben und wir bei Abmessungen im Zehntel- bis Hundertstel-millimeterbereich pro Kristall auch nicht so recht abschätzen können, wie viele Kristalle in einer Einige-Milligramm-Probe vorhanden sind. Einige hundert bis einige tausend werden es wohl sein.

Wir wissen nicht mehr weiter. Jetzt nimmt die Zollbehörde das Heft des Handelns in die Hand. Unsere alte Wertangabe ist plötzlich wieder im Rennen. Daraus wird die amtliche Zollgebühr im gehobenen zweistelligen Euro-Bereich bestimmt und uns als Rechnung zugeschickt. Wir fragen vorsichtshalber unsere Rechtsabteilung, ob wir Haushaltsmittel der Universität dafür aufwenden dürfen. Als das Wort „Zoll“ fällt, winkt man ab und rät: Zahlen und keine Widerrede.

Also zahlen wir den Zoll für Sachen, die nie im Ausland hergestellt oder bearbeitet wurden, keinen kommerziellen Wert haben und die immer Eigentum einer staatlichen deutschen Institution (unserer Universität) waren. Absurd, oder?

Mein Rat: Falls Sie mal Ähnliches vorhaben, lernen Sie erst internationale Zollvorschriften oder lassen Sie Ihre Kristalle zu Hause!

Peter Luger, Berlin

P. S.: Zu unserem Trost: Wir haben in Argonne hervorragende Experimente gemacht.



Bruker **AXS**



with  
**DAVINCI.  
DESIGN**

## The new D8 ADVANCE

### ● Designed for the next era in X-ray diffraction

- DAVINCI.MODE: Real-time component recognition and configuration
- DAVINCI.SNAP-LOCK: Alignment-free optics change without tools
- DIFFRAC.DAVINCI: The virtual diffractometer
- TWIST-TUBE: Fast and easy switching from line to point focus
- TWIN/TWIN SETUP: Push-button switch between Bragg-Brentano and parallel-beam geometries

[www.bruker-axs.com](http://www.bruker-axs.com)

think forward

XRD

# BERICHT VON DER SITZUNG DES ECA-COUNCIL'S IN ISTANBUL

Am Rande des European Crystallographic Meeting's (ECM 25) in Istanbul tagte der Council der European Crystallographic Association (ECA). In drei Sitzungen am 17., 18. und 19. August 2009 wurden die Angelegenheiten der ECA verhandelt. Nachfolgend eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Punkte und Beschlüsse.

## 1. Berichte

Die Mitglieder des Executive Committee's der ECA geben ihre jährlichen Berichte. Der Schatzmeister weist darauf hin, dass die Zahl der persönlichen Mitglieder der ECA 300 übersteigt. Damit wird die Wahl eines dritten Repräsentanten der persönlichen Mitglieder im ECA-Council erforderlich.

Die Sprecher der 13 Special Interest Groups (SIG) geben ihre jährlichen Berichte. Die deutschen Officers in den SIGs sind Prof. U. Pietsch (Siegen, co-chair SIG2 Charge, Spin and Momentum Density), Prof. S. van Smaalen (Bayreuth, chair SIG3 Aperiodic Crystallography), Dr. L. Dubrovinsky (Bayreuth, chair SIG11 Crystallography under Extreme Conditions) und Dr. H. Ehrenberg (Dresden, chair SIG12 Crystallography of Functional Materials). Die DGK dankt diesen Kollegen für ihr Engagement in der ECA.

## 2. European Crystallographic Meetings

Der Präsident dankt Prof. E. Kendi und dem Organisationskomitee der ECM 25 für die Ausrichtung der Tagung 2009 in Istanbul. Die Tagung wird von 786 aktiven Teilnehmern, 76 Begleitpersonen und 70 Ausstellern besucht. Das wissenschaftliche Programm umfasst 17 Hauptvorträge, 46 Mikrosymposien mit 235 Kurzvorträgen, sowie 482 Poster.

Prof. H. Fuess berichtet über den Stand der Vorbereitung der ECM 26 in Darmstadt. Die Tagung wird vom 30. August bis 2. September 2010 direkt im Anschluss an die 12<sup>th</sup> European Powder Diffraction Conference (EPDIC XII, 27. bis 30. August 2010) stattfinden.

Prof. K. W. Törnroos berichtet über den Stand der Vorbereitungen der ECM 27 in Bergen. Die Tagung wird vom 6. bis 10. August 2012 in Norwegen stattfinden.

Die ECM 28 (August 2013) wird nach Warwick (UK) vergeben. Der denkbar knapp unterlegene Mitbewerber um die Ausrichtung, Athen, wird aufgefordert, eine Bewerbung für das nächste European Crystallographic Meeting im Jahr 2015 vorzubereiten.

### 3. Wahlen zum Executive Committee der ECA

Für die Zeit von 2009 bis 2012 wird das Executive Committee folgende Mitglieder haben:

- Prof. Santiago Garcia-Granda, President  
Dept. Química Física y Analítica, Facultad de Química, Universidad de Oviedo, Spain
- Prof. John Richard Helliwell, Past President  
School of Chemistry, University of Manchester, UK
- Prof. Andreas Roodt, Vice President  
Department of Chemistry, University of the Free State, Bloemfontein, South Africa
- Dr. Petra Bombicz, Secretary  
Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary
- Prof. Radomir Kuzel, Treasurer  
X-Ray Group, Faculty of Mathematics and Physics, Prague, Czech Republic
- Prof. Alessia Bacchi, Officer  
Dipartimento di Chimica Generale ed Inorganica, Università di Parma, Italy
- Prof. Luc Van Meervelt, Officer  
Departement Chemie, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium
- Prof. Wulf Depmeier, Officer  
Institut für Geowissenschaften der Universität Kiel, Germany
- Prof. Massimo Nespolo, Education Coordinator  
Institut Jean Barriol, Nancy-Université, France
- Prof. Paolo Scardi, EPDIC Representative  
Dipartimento di Ingegneria dei Materiali, Università degli Studi di Trento, Italy

Die DGK gratuliert Herrn Prof. W. Depmeier zu seiner Wahl in das Executive Committee der ECA.

U. Heinemann, Berlin

IMPRESSIONEN VOM  
25<sup>TH</sup> EUROPEAN  
CRYSTALLOGRAPHIC MEETING  
16.-21. AUGUST 2009, ISTANBUL



*Eröffnung der ECM 25*



*Der große Hörsaal*



*Bootstour auf dem Bosphorus*



*Vortrag in einem  
Mikrosymposium*



*Türkische Musik-  
und Tanzgruppe*

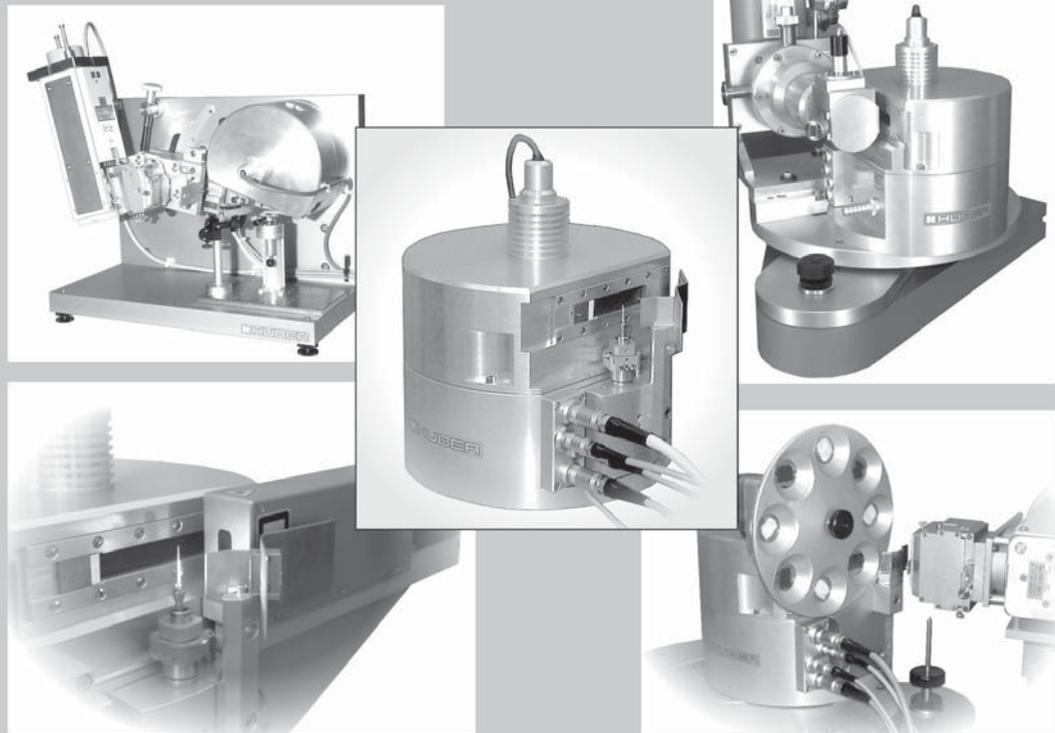


*Tanzender Derwisch  
in der Kirche St. Irene*



# **SPEED...**

## **in X-ray Powder Diffractometry**



## **HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670**

- ☑ A factor of more than 100 faster compared to conventional step scan
- ☑ X-ray powder diffraction in  $45^\circ$  (asymmetric) transmission,  $0^\circ$  to  $100^\circ$  2-theta
- ☑ Bulk samples in  $17^\circ$  (fixed grazing incidence) reflection,  $50^\circ$  to  $150^\circ$  2-theta
- ☑ Plane foil or capillary samples. 8-fold sample changer for plane foil samples
- ☑ Vertical mount for liquids,  $0^\circ$  to  $20^\circ$  (adjustable grazing incidence) reflection
- ☑ Focussing monochromatic radiation,  $K\alpha_1$  stripping not required
- ☑ Range of Bragg angles  $100^\circ$  2-theta, 20001 steps @  $0.005^\circ$
- ☑ Laser scans signals @ 16 Bit A/D res. Linear dynamic range up to 200,000 counts
- ☑ Creates all common ASCII file types ready for data evaluation like Rietveld-Refinement
- ☑ Low-temperature attachment: Closed cycle He-refrigerator, 10 to 320 K
- ☑ Hi-temperature attachment: Diode laser heater, 300 to 1800 K
- ☑ Hi-pressure attachment: Diamond anvil cell, upto 70 GPa

**HUBER**  
X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

HUBER Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG  
Sommerstrasse 4  
D-83253 Rimsting / Chiemsee  
Germany

Tel: +49 (0)8051 68780  
Fax: +49 (0)8051 687810  
info@xhuber.com  
www.xhuber.com

# KURZBERICHTE VON DER ECM 25 IN ISTANBUL

KURZBERICHT VON JENS KLING (TU DARMSTADT)

Als Doktorand ist es immer wieder eine Freude, die Möglichkeit zu haben an nationalen oder internationalen Konferenzen teilzunehmen. So bekommt man die Chance, zum einen seine eigenen Forschungen vorzustellen, als auch zum anderen seinen wissenschaftlichen Horizont zu erweitern und sich einmal mit völlig anderen Themengebieten zu beschäftigen.

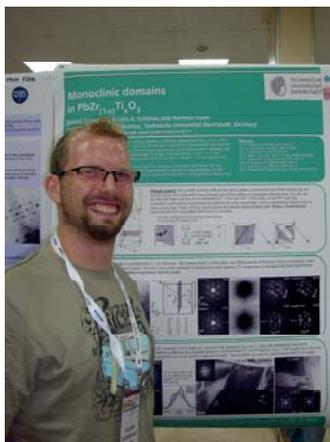
Ich selbst durfte diesmal, zum ersten Mal auf einer internationalen Konferenz, meine Ergebnisse in Form eines Vortrages vorstellen. Dementsprechend nervös war ich im Vorfeld. Der Schwerpunkt meiner Arbeit liegt auf der Charakterisierung von piezo- und ferroelektrischen Keramiken mittels Transmissions-elektronenmikroskopie, wobei ich im Besonderen *In-situ*-Experimente unter elektrischem Feld im TEM durchführe. Auf Grund der gesundheitlichen und ökologischen Bedenken bezüglich Bleis treten bleifreie Piezo- und Ferroelektrika immer stärker in den Fokus der Forschung. Hierbei sind allerdings deren Kristallstruktur und das Verhalten unter elektrischem Feld oder mechanischer Spannung noch weitgehend unbekannt und unverstanden. In meinem *In-situ*-Experiment konnte ich zum ersten Mal in bleifreien Piezoelektrika,  $(\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2})\text{TiO}_3\text{-BaTiO}_3\text{-(K}_{1/2}\text{Na}_{1/2})\text{NbO}_3$ , das Entstehen von Domänen unter elektrischem Feld zeigen.



Trotz des Schwerpunkts der ECM auf biologischen Proben und Kristallographie an Proteinen, so zumindest meine Empfindung, war die Session „Ferroic Materials“ gut besucht und mein Vortrag wurde interessiert aufgenommen.

Ansonsten zeichnet sich die ECM durch eine relativ familiäre Atmosphäre aus, in der man nicht nur wissenschaftlich diskutieren, sondern auch ungezwungen bei „Welcome Cocktails“ oder „Conference Dinner“ persönliche Kontakte knüpfen kann. Außerdem ist es auch möglich sich ein wenig am Veranstaltungsort umzuschauen und Istanbul bot einem diverse kulturelle Möglichkeiten und Sehenswürdigkeiten.

Daher danke ich hiermit noch einmal der DGK für das gewährte Reisestipendium und freue mich auf die nächste ECM gleich um die Ecke im heimischen Lande.



Dieses Jahr fand die Jahrestagung der europäischen kristallographischen Vereinigung ECA, die ECM 25, in Istanbul statt. Durch ein Reisestipendium der DGK wurde es mir ermöglicht daran teilzunehmen. Dafür möchte ich mich an dieser Stelle bedanken.

Dort konnte ich unter dem Titel „Monoclinic domains in  $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$ “ Ergebnisse aus meiner Doktorarbeit auf einem Poster vorstellen. Ferroelektrische PZT-Keramiken wie  $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$  werden weit verbreitet als Aktoren und Sensoren eingesetzt. Im Bereich der morphotropen Phasengrenze, die die Stabilitätsbereiche von rhomboedrischer und tetragonaler Phase trennt, ist die Dehnung besonders groß. Nach der Entdeckung der monoklinen Phase durch Noheda et al. [1] wurde die Rotation der Polarisation in der monoklinen Ebene als Ursache für das gute Ansprechverhalten diskutiert. In

TEM-Untersuchungen weisen die Proben, die in der Röntgenbeugung monoklin erscheinen, Nanodomänen mit Breiten zwischen 5 und 30 nm innerhalb von Mikrodomänen auf [2, 3]. Diese können durch Kohärenzeffekte zu adaptiven Reflexen und so zu Fehlinterpretationen von Röntgenbeugungsdiagrammen führen [4]. Das Schalten von Nanodomänen würde in der Mittelung als Rotation der Polarisation erscheinen. In meiner Arbeit konnte ich aber anhand von konvergenten Elektronenbeugungsbildern monokline Symmetrie in einzelnen Domänen nachweisen [5]. Von daher ist die Bildung der Nanodomänen durch den Phasenübergang  $P4mm$  zu  $Cm$  bedingt. Die beobachteten Zwillingsoperationen lassen darauf schließen.

Während der zwei Postersessions konnte ich meine Ergebnisse mit anderen Wissenschaftlern diskutieren. Diese Möglichkeit bot sich auch in den Pausen auf dem Gelände des Militärmuseums, auf dem die Konferenz stattfand. Ansonsten standen auch noch das „Young Crystallographers Meeting“ und natürlich das Galadinner zur Verfügung, um sich mit (jungen) Wissenschaftlern aus anderen Ländern auszutauschen.

Im Anschluss an die Konferenz wurde noch ein Bootsausflug auf dem Bosphorus angeboten, an dem die meisten teilnahmen. Ziel war die Burgruine Yoros, die eine spektakuläre Aussicht auf die Mündung ins Schwarze Meer bot. Auch sonst nutzten wir die freie Zeit, um diese interessante Stadt zu erkunden. Unser Hotel war dabei zentral im Stadtteil Taksim gelegen. Somit befanden sich die Restaurants und Bars vor unserer Tür, und wir konnten uns abends direkt unter das Volk mischen. Die Stadt ist mit ihrer Größe sehr beeindruckend. Dies zeigte sich vor allem bei einem spontanen Ausflug auf die „Princes’ Islands“ am letzten Tag vor der Abreise.

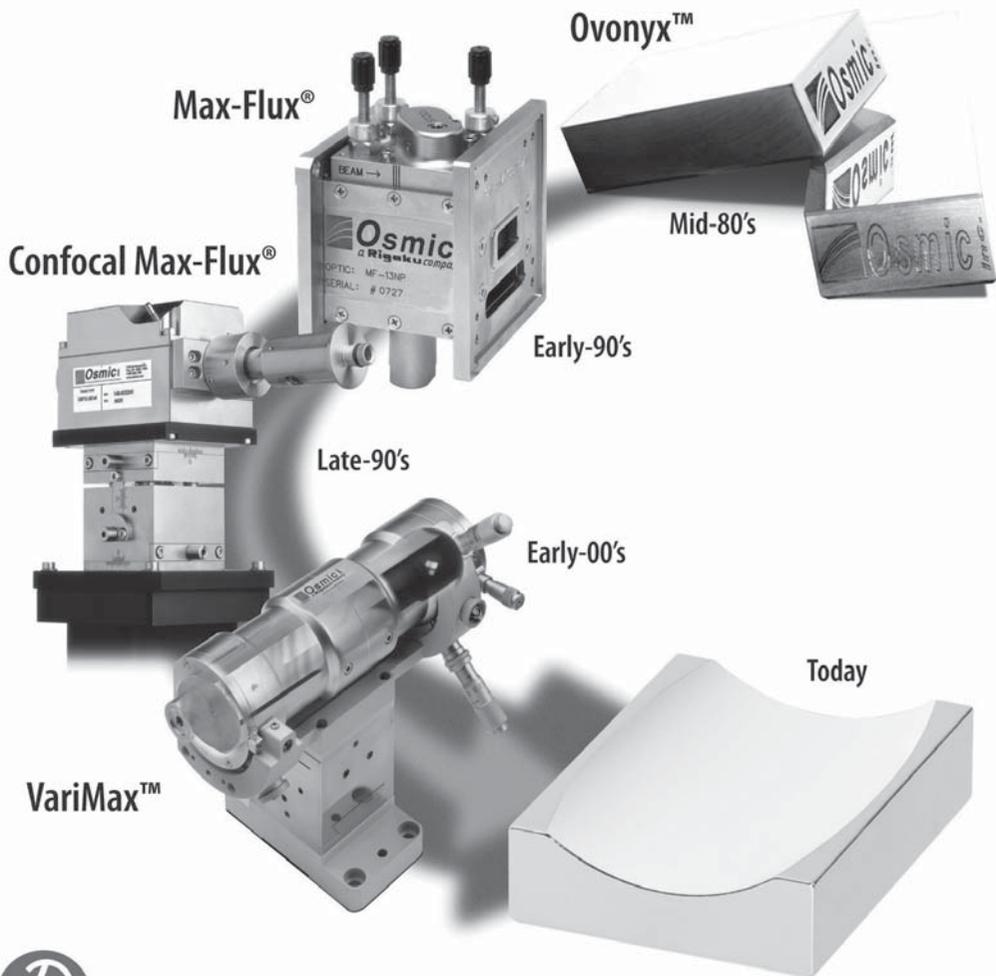
- [1] Noheda et al.: Phys. Rev. B 63 (2000) 014103.
- [2] Schmitt et al.: J. Appl. Phys. 101 (2007) 074107.
- [3] Schönau et al.: Phys. Rev. B 75 (2007) 184117.
- [4] Y. U. Wang: Phys. Rev. B 76 (2007) 024108.
- [5] R. Schierholz et al.: Phys. Rev. B 78 (2008) 024118.



# Evolution of Multilayer Optics

Leading With Innovation

Stay One Step Ahead With Osmic™ Optics



**Rigaku**

info@rigaku.com

MicroSpot™ Analyzers

## KURZBERICHT VON LINDA SCHULDT (EMBL HAMBURG OUTSTATION)

Istanbul ist eine beeindruckende Stadt, in der sich asiatische und europäische Elemente vereinen. Im übertragenen Sinne ist es somit ein sehr passender Ort für ein ECM-Meeting, da auf analoge Weise die verschiedensten Bereiche der Kristallographie zusammentreffen. Resultierend daraus ergab sich eine vielfältige Mischung aus Vorträgen, Posterpräsentationen und kulturellem Angebot.

Ich bin seit zwei Jahren Doktorandin im Team von Dr. Manfred Weiss und ich beschäftige mich mit der Strukturaufklärung von Enzymen aus der Lysinbiosynthese aus dem pathogenen Organismus *Mycobacterium tuberculosis*. Auf dem diesjährigen ECM25-Meeting in Istanbul habe ich auf einer Posterpräsentation mit dem Titel „The structure of DapD from *Mycobacterium tuberculosis*“

die Ergebnisse meines Hauptprojektes vorgestellt. Das trimere Enzym DapD katalysiert den fünften Reaktionsschritt der Lysinbiosynthese. Es ist mir gelungen, die Struktur von DapD und von DapD im Komplex mit seinem Cofaktor Succinyl-CoA zu ermitteln [1, 2]. Es wurde gezeigt, dass die enzymatische Aktivität von der Anwesenheit bestimmter Metallionen sowohl positiv als auch negativ beeinflusst werden kann. Während der Posterpräsentation kam es zu angeregten und inspirierenden Diskussionen. Letztlich wurde meine Posterpräsentation mit dem Posterpreis der IUCr ausgezeichnet.



Das vielfältige Angebot an Vorträgen und Posterpräsentationen wurde durch ein beeindruckendes kulturelles Programm ergänzt. Bei einem Konzert in der Kirche St. Irene wurden sowohl klassische als auch traditionelle Musik präsentiert, begleitet von tanzenden Derwischen – Tänzer die sich unentwegt im Kreise drehen und es doch schaffen auf der Stelle stehen zu bleiben. Nicht zu vergessen sei auch das Abschlussdinner in dem bezaubernden Garten des Dolmabahçe-Palastes. Nach Abschluss des Meetings bot sich dann noch die Möglichkeit, die Sehenswürdigkeiten Istanbuls zu erkunden, wie ein Besuch in der Blauen Moschee (die eigentlich Sultanachmet-Moschee heißt), der Hagia Sofia, der Zisterne und noch vieles mehr.

Insgesamt lässt sich zusammenfassen, dass das ECM25-Meeting in Istanbul sowohl fachlich als auch kulturell viel geboten hat. Ich möchte mich bei der DGK für die Unterstützung bei den Reisekosten bedanken.

- [1] L. Schuldt, S. Weyand, G. Kefala & M. S. Weiss: Acta Crystallogr. F 64 (2008) 863–866.  
[2] L. Schuldt, S. Weyand, G. Kefala & M. S. Weiss: J. Mol. Biol. 389 (2009) 863–879.

KURZBERICHT VON HARTMUT STÖCKER UND MATTHIAS ZSCHORNAK  
(TU DRESDEN)



Wie im vergangenen Jahr für die IUCr in Osaka, gab es auch in diesem Jahr für die ECM in Istanbul eine Förderung für junge Nachwuchsforscher von Seiten der DGK. Diese Stipendien ermöglichten es zwei Doktoranden aus Dresden die Größen der Kristallographie zu treffen und beim wissenschaftlichen Austausch aktuelle Forschungsergebnisse zu diskutieren. Wir sind beide Mitglieder der Nachwuchsgruppe Nanostrukturphysik unter Leitung von Prof. Dirk C. Meyer an der TU Dresden und konnten auf diesem Wege erstmals einen ECM-Kongress besuchen.

Wir reisten zwei Tage vor dem Kongress an und erreichten Istanbul bei Nacht, die wir bis zum Morgengrauen in einem türkischen Café verbrachten. Die Zeit vor der Tagung nutzten wir, um einen ersten Eindruck von Istanbul zu gewinnen und die Geschichte dieser einzigartigen Kulturstadt an Hand der Vielzahl von historischen Denkmälern zu erkunden. Auch die türkische Küche lernten wir recht schnell zu schätzen und es standen nicht nur der bekannte Kebap und Lahmacun sondern auch Gerichte wie Pide, Köfte oder Deniz Ürünleri und dazu typischerweise Ayran, Çay oder Raki sowie süße Desserts wie Baklava oder Lokum auf unserer Speisekarte. Eindrucksvoll waren für uns auch die abendlichen, sozial geprägten Treffen auf öffentlichen Plätzen im islamischen Fastenmonat Ramadan, bei denen kurz nach Sonnenuntergang gefeiert und ausgiebig gegessen wurde.

Der Kongress fand in Istanbul's Militärmuseum statt und begann nach einleitenden Reden u. a. von Prof. Helliwel, Prof. Larsen und dem ECA-Preisvortrag von Dr. McCuster mit einer musikalischen Darbietung der Janitscharen, einer Elitetruppe, die vom 14. Jahrhundert bis 1826 im osmanischen Reich die Leibwache des Sultans stellte. Während der Konferenz standen auch das 25. Jubiläum der ECM und die Verleihung des Erwin Felix Lewy Bertaut-Preises an Lukas Palatinus auf dem Programm. Kulturell wurde ein Konzert in der Kirche von St. Irene im äußeren Garten des Topkapi Palastes angeboten, bei dem ein Streichquartett und tanzende Derwische auftraten. Neben dem Gala-Dinner im Dolmabahçe-Palast war der letzte Höhepunkt der Tagung ein Schiffsausflug auf dem Bosphorus.

Das wissenschaftliche Programm bot sowohl in Qualität als auch in der Zahl der Beiträge eine exzellente Möglichkeit zum Austausch auf dem eigenen Fachgebiet, speziell in diesem internationalen Rahmen, aber auch über fachfremde Themen. Neben den informativen und ausführlichen Übersichtsvorträgen gab es sechs gut gegliederte, parallele Mikrosymposien auf denen aktuelle Forschungsergebnisse präsentiert und diskutiert wurden. An dieser Stelle sei mit Dank auf die ausgezeichnete Organisation der Tagung und die überaus hilfsbereiten Ansprechpartner hingewiesen.

Auf den zwei Postersitzungen konnte man den beeindruckend großen Anteil biologischer Fragestellungen erkennen, die aktuell im Rahmen der Kristallographie untersucht und oft erfolgreich beantwortet werden. Aber auch die uns interessierenden Gebiete der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen und der theoretischen Modellierung waren natürlich nicht nur auf unseren eigenen Postern vertreten. So konnten wir beide mit anderen Kristallographen ins Gespräch kommen und wertvolle Anregungen mit nach Hause nehmen.

Der Beitrag von Hartmut Stöcker „Reversible structural changes by electrostatic fields in strontium titanate at room temperature“ gab einen Überblick über viele aktuelle Forschungsergebnisse, die allesamt den Einfluss elektrischer Felder auf die Struktur von Strontiumtitanat zeigen. Strukturelle Änderungen ließen sich beispielsweise durch Röntgenbeugung und Röntgenabsorptionsspektroskopie zeigen und beeinflussen z. B. auch Festkörpereigenschaften wie Elastizität und Härte. Den Ursprung vermuten wir in der durch das elektrische Feld angetriebenen Diffusion von Sauerstoff-Leerstellen in der Perovskit-Struktur, die an der Festkörperoberfläche zu den gezeigten Veränderungen führt.

Der Posterbeitrag „DFT modelling of defects in strontium titanate“ präsentierte Ergebnisse aus der Modellierung von planaren Defekten und Punktdefekten. Am Beispiel der Ruddlesden-Popper-Serie, einer homologen Reihe mit zusätzlich eingeschobenen Strontiumoxid-Schichten, wurden aus den Rechnungen Aussagen über strukturelle Stabilität, elektronische Eigenschaften sowie Oberflächenenergien gewonnen. Die Modellierung von Sauerstoff-Vakanzen wurde vergleichend zu einem Experiment mit dem Nanoindenter herangezogen, um aus den theoretischen Elastizitätsänderungen quantitative Abschätzungen zur Änderung der Vakanzdichte durch ein elektrisches Feld zu erhalten.

An den Tagungsbesuch schlossen wir noch eine zweiwöchige Rundreise durch die Türkei an. Wir waren per Mietwagen unterwegs und bereisten bekannte historische Städte wie Troja, Pergamon und Ephesos. Nach insgesamt vier Wochen mussten wir schließlich unseren Heimflug antreten und kamen recht erschöpft, aber um viele Erfahrungen reicher zurück nach Dresden. An dieser Stelle möchten wir nochmals der DGK für die finanzielle Unterstützung danken, die es uns erst ermöglichte, diese einmalige Tagung und dieses wunderschöne Land zu besuchen.



# FACHVERBAND KRISTALLOGRAPHIE AUF DER DPG-FRÜHJAHRSTAGUNG 2010

Der Fachverband Kristallographie (KR) der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) vertritt die Kristallographie-nah arbeitenden Physiker innerhalb der DPG. Auf der letzten DPG-Frühjahrstagung in Dresden 2009 fand eine Mitgliederversammlung des FV KR statt, auf der Aktivitäten für die nächste DPG-Tagung initiiert wurden.

- A) Die nächste Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM, früher Festkörperphysik) der DPG findet vom 22. bis 26. März 2010 in Regensburg statt. Der Fachverband Kristallographie engagiert sich mit folgenden Veranstaltungen:

**i) Session: Crystallography in Nanoscience (FV KR)**

mit einem eingeladenen Hauptvortrag von Prof. Ian Robinson (London Centre for Nanotechnology & Diamond Light Source), dazu Kurz-Vorträge von ca. 15 Minuten Dauer und Poster. Organisator: Prof. Dr. Ullrich Pietsch, Universität Siegen, Fachbereich Physik.

**ii) Gemeinsame Session: Multiferroics (FV MA + FV DS + FV DF + FV KR)**

organisiert von den Fachverbänden Magnetismus, Dünne Schichten, Dielektrische Festkörper und Kristallographie.

**iii) Joint topical session: Photovoltaic Materials (FV MM + FV KR + BV MatWerk)** veranstaltet vom Fachverband Metall- und Materialphysik in Zusammenarbeit mit dem Fachverband Kristallographie und der Bundesvereinigung Materialwissenschaft und Werkstofftechnik.

Beim Einreichen von Abstracts für die DPG-Frühjahrstagung in Regensburg kann man beim Fachverband Kristallographie also zwischen diesen drei Themenbereichen auswählen. Weitere Themen stehen beim FV Dielektrische Festkörper (DF) zur Verfügung. Hinweise zum Einreichen der Abstracts finden Sie über die DPG-Homepage <http://www.dpg-physik.de> oder direkt auf dem Tagungsserver <http://regensburg10.dpg-tagungen.de>. Deadline für die Abstracts ist der 1. Dezember 2009!

- B) Unmittelbar vor der eigentlichen Tagung, am Sonntag, dem 21. März 2010 werden Tutorien zu aktuellen Forschungsthemen angeboten, die eine Einführung in die wissenschaftlichen Grundlagen der jeweiligen Fachrichtung geben und sich insbesondere an Studenten, Doktoranden und junge Wissenschaftler richten. Der Eintritt dazu ist frei. In diesem Rahmen veranstalten die Fachverbände Kristallographie und Dielektrische Festkörper gemeinsam ein **Tutorium Kristallzüchtung/Kristallphysik**. Es besteht aus drei Vorträgen mit den folgenden Sprechern:

- 1.) M. Mühlberg (Universität Köln) wird eine Einführung in die Züchtungsmethoden großer Kristalle aus der Schmelze geben. Schwerpunkt ist die Wechselbeziehung zwischen Züchtungsprozess und Kristallqualität in Bezug auf die Anwendung der Kristalle.
- 2.) E. Hausühl (Universität Frankfurt) spricht über kristallphysikalische Messungen an großen Kristallen, insbesondere von elastischen und mechano-elektrischen Eigenschaften mit Ultraschalltechniken und die dazu nötigen Qualitätsanforderungen an die Kristalle.
- 3.) D. Hesse, I. Vrejoiu, M. Alexe (MPI für Mikrostrukturphysik, Halle): Dieser Vortrag befasst sich mit Züchtung und Physik epitaktischer Schichten, insbesondere dem Zusammenhang zwischen Wachstumsparametern, Realstruktur und Eigenschaften von epitaktischen ferroelektrischen Schichten und Multilagen/Supergittern und auch dem Einfluss von elastischen Spannungen in dünnen, epitaktischen Schichten auf die ferroelektrischen Eigenschaften.

Alle physikalisch interessierten Kristallographen sind herzlich eingeladen, nach Regensburg zu kommen und sich mit einem Vortrag oder Poster im Rahmen des Fachverbandes Kristallographie auf der DPG-Tagung aktiv zu beteiligen.

Leonore Wiehl, Frankfurt



DIE ARBEITSKREISE (AK) DER DGK  
BERICHTEN:



# BERICHT ZUM DGK-AK1-WORKSHOP „X-RAY DIFFRACTION DATA COLLECTION USING SYNCHROTRON RADIATION“

13.–15.08.2009, HZB BERLIN-ADLERSHOF

Im Rahmen der Aktivitäten des Arbeitskreises 1 „Biologische Strukturen“ der deutschen Gesellschaft für Kristallographie wurde dieses Jahr bereits zum 2. Mal nach 2007 der Workshop „X-ray Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ organisiert und vom 13. bis 15. August in Berlin am BESSY-Synchrotron in Berlin-Adlershof durchgeführt.

Das Ziel des Workshops lag in der Vermittlung von theoretischem Wissen und praktischen Fertigkeiten auf dem Gebiet der Strukturbioogie bei der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung von Röntgenbeugungsexperimenten unter der Verwendung von Synchrotronstrahlung. Der Teilnehmerkreis bestand aus 20 jungen Strukturforschern (Diplomanden, Doktoranden, Postdocs) aus Deutschland, Belgien, den Niederlanden, Dänemark, Österreich, der Schweiz und der Tschechischen Republik, die aus insgesamt 42 Bewerbern ausgewählt wurden. Alle Teilnehmer besaßen lediglich begrenzte Kenntnisse auf dem Gebiet der Diffraktionsdatensammlung, die durch den Workshop vertieft werden sollten.

Der dreitägige Workshop ([www.embl-hamburg.de/workshops/2009/diffraction](http://www.embl-hamburg.de/workshops/2009/diffraction)) untergliederte sich in die Vermittlung der wissenschaftlichen Grundlagen durch neun Vorträge der sechs eingeladenen Betreuer zu den Themen Synchrotronstrahlung, Kristallvorbereitung, Sammlung und Auswertung von Diffraktionsdaten am Synchrotron, Qualitätskriterien von Diffraktionsdaten, Strahlenschäden sowie Phasenbestimmung. Weiterhin wurden die Studenten während der Durchführung von fünf Röntgenbeugungsexperimenten (je ein Experiment pro Gruppe von vier Studenten) an den BESSY-Strahlrohren für Makromolekulare Kristallographie und bei der erfolgreichen Auswertung der Beugungsdaten durch die Betreuer unterstützt. Am Ende des Workshops hatten die Studenten Gelegenheit, ihre erzielten Ergebnisse als Präsentation den anderen Teilnehmern vorzustellen. Das wissenschaftliche Programm wurde durch eine Postersession mit Beiträgen der Workshopteilnehmer abgerundet und es wurden zwei Posterpreise für die beiden besten Poster vergeben. Diese erhielten Gesa Volkers aus Greifswald für ihr Poster „Crystal Structure Analysis of TetX Monooxygenase: Example for Phasing with 3-WL MAD“ und Sven Dahms aus Jena für sein Poster „Structure of N-terminal APP Domain“.

Die Veranstaltung konnte durch die großzügige finanzielle Unterstützung der DGK sowie durch Spenden der IUCr und von internationalen Firmen und einer Tagungsgebühr von 50 € pro Teilnehmer vollständig finanziert werden. Die Organisatoren und auch die Teilnehmer schätzen diesen Workshop als sehr gelungen ein. Durch das große Engagement aller Mitwirkenden war es möglich, das anspruchsvolle Programm umzusetzen und somit ein Maximum an Wissensvermittlung zu erreichen. Aufgrund des überaus positiven Feedbacks von Seiten der Teilnehmer, wird der Workshop im Jahr 2011 erneut stattfinden.

Uwe Müller, Berlin & Manfred S. Weiss, Hamburg



*Teilnehmer des Workshops bei BESSY*

# DIE XXIX. TAGUNG DES AK 4 NICHTKRISTALLINE UND PARTIELLKRISTALLINE STRUKTUREN

Seine XXIX. (16.) Arbeitstagung führte der Arbeitskreis „Nichtkristalline und Partiiellkristalline Strukturen“ vom 15. bis 17. September 2008 traditionsgemäß im Hotel „Am Kellerberg“ in Wolfersdorf – im schönen, ruhigen und erholsamen Thüringer Holzland gelegen – durch. Die Arbeitstagung zeichnete sich durch eine angenehme und offene Atmosphäre aus. Sie wurde von allen Teilnehmern als sehr gelungen sowohl bezüglich des Inhaltes der Vorträge als auch der Organisation und wegen des guten Essens empfunden.

An der Arbeitskreistagung nahmen insgesamt zwanzig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten teil, davon sechs Doktoranden sowie drei Mitarbeiter aus der Industrie. Es wurden fünfzehn Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit – auch zu anschließenden, teilweise sehr heftigen Diskussionen – zur Verfügung stand, was mit großem Gewinn rege angenommen und realisiert wurde.

Das Schwerpunktthema der diesjährigen Arbeitskreistagung „Thermodynamik, Kinetik und Strukturen nichtkristalliner Materialien“ wurde gewählt, um auf die thermodynamischen und kinetischen Grundlagen unserer Arbeiten aufmerksam zu machen. Eine kritische Betrachtung zum Basiswissen von Strukturen und Strukturbildung nichtkristalliner Materialien sowie zu Methoden und Algorithmen, diese theoretisch, modellmäßig und experimentell zu ermitteln und zu charakterisieren, ist von Zeit zu Zeit angebracht, um entsprechende Innovationen und Problemlösungen auf diesen wissenschaftlichen und technologischen Gebieten zu forcieren.

Die Vortragenden und die Titel der gehaltenen Vorträge seien zur allgemeinen Information hier aufgeführt, wobei die Kurzfassungen der Vorträge von der Seite des Arbeitskreises <http://www.chemie.uni-jena.de/DGK-AK4> als pdf-Dateien heruntergeladen werden können:

- H.-J. Hoffmann (Berlin): Glasübergang und Relaxation
- P. Häußler (Chemnitz): Eine allgemeine Dynamik der Strukturbildung statt nur einer Thermodynamik
- P. W. Puhmann (Jena): Die metasomatische Bildung von Quarz in Carbonatsedimenten
- B. Müller (Jena): Entropische Fluktuationen, Keimbildung und Transformationen in nichtkristallinen Materialien
- G. Herms und J. Sakowski (Rostock): Strukturelle Veränderungen beim Glasübergang und in der unterkühlten Schmelze
- N. Mattern (Dresden): In situ X-ray diffraction study on the phase separation of liquid Al-In
- J. Marczinke, S. Gruner, L. Hennet, W. Hoyer (Chemnitz): Die atomare Struktur flüssiger Al-Ni Legierungen
- S. Gruner, S. Knott, A. Mikula, W. Hoyer (Chemnitz): Nahordnung in As-Se Legierungsschmelzen
- I. Kaban, K. Khalouk, W. Hoyer, J. G. Gasser (Chemnitz): Physical properties of some Ag-Sn based solder materials
- E. Rössler (Bayreuth): Glassy dynamics in nanonconfinement studied by <sup>31</sup>P NMR
- H. Rogendorf (Halle): Thermodynamik von Alkalisilicat-Solen (Wasserglas) und verwandten Materialien
- M. Ende, G. Kloess, S. Schorr (Leipzig): Quantitative Analyse geringer Nanokristallitgehalte in Obsidian
- H. Hermann (Dresden): Kommentar zur Bestimmung von Aktivierungsenergien aus kalorimetrischen Messungen

- V. Kokotin, H. Hermann (Dresden): Verbesserte theoretische Methode für die Berechnung der Enthalpie von flüssigen und amorphen metallischen Legierungen
- U. Hoppe (Rostock): Struktur der Kaliumgermanophosphatgläser – eine Reverse-Monte-Carlo-Simulation
- G. Herms, J. Sakowski (Rostock): Zur Strategie der Untersuchung von Strukturänderungen beim Glasübergang

Das Problem der Erklärung und des Verständnisses von strukturellen Bildungen nichtkristalliner, aber auch nanokristalliner Materialien besteht darin, dass sich diese Prozesse in einem Strukturbereich ( $0,5 \leq r \leq 3$ ) nm vollziehen, der sehr schwierig experimentell zu charakterisieren ist. Deshalb bestehen sehr viele kontroverse Ansichten und Theorien zu den Strukturbildungsprozessen in diesen Bereichen. Vielfältige Untersuchungen mit Relaxationsmethoden – auf makroskopischen Parameter wie Dielektrizitätskonstanten, Relaxationszeiten usw. basierend – lieferten auch keine neuartigen Erkenntnisse dazu.

Der Vorteil thermodynamischer Betrachtungen besteht darin, dass die Thermodynamik die Komplexität der Prozesse auf wesentliche Zustandsgrößen und treibende thermische Kräfte – ohne strukturelle Charakterisierungen – beschränkt; nachteilig könnte sein, dass sie im Skalenbereich der Mittelbereichsstruktur ihre Gültigkeit wegen der geringen Anzahl der teilnehmenden Teilchen verlöre. Eine Fluktuationstheorie könnte helfen, Strukturbildungsprozesse im Strukturbereich ( $0,5 \leq r \leq 3$ ) nm besser zu erklären.

Unbestritten bleibt die große Bedeutung der thermodynamisch-kinetischen Charakterisierung von Kristallisationsprozessen mittels des Johnson-Mehl-Avrami-Formalismus, welcher auch technologisch nutzbare Resultate der Aktivierungsenergien, der Bildungsgeschwindigkeiten sowie eines möglichen Bildungstyps liefert.

Es ist erfreulich, dass sich eine Reihe von Vorträgen mit den Strukturen in Schmelzen bzw. unterkühlten Schmelzen beschäftigten – damit eine international bestehende Forschungslücke schließend. Solche strukturellen Resultate können auch wesentliche Beiträge zum Verständnis des Glasübergangs beitragen.

Das diesjährige Vortragsprogramm wies wiederum in seinen fünfzehn Beiträgen das Grundanliegen des Arbeitskreises zur Auf- und Erklärung nichtkristalliner Strukturen und Strukturbildungsprozesse aus – ein gelungenes Tagungsprogramm dank des interdisziplinären Kreises der Teilnehmer.

Beeindruckend in vielerlei Hinsicht war der Ausflug ins Glasmuseum und zur Schottvilla nach Jena, wo einerseits die Pionierleistungen von Otto Schott sowohl als Begründer der modernen und wissenschaftlichen Glastechnologie als auch der eines Glaswerks, dessen Mitarbeiteranzahl innerhalb von zwanzig Jahren von fünfzehn auf über tausend anstieg, sehr gut vermittelt und herausgestellt wurden, und wo andererseits die sehr vielfältigen Anwendungsbereiche des Werkstoffs Glas aufgrund seiner nichtkristallinen Struktur und der daraus folgenden Eigenschaften faszinierten und brillierten.

Auf der Mitgliederversammlung wurde beschlossen, die XXX. Arbeitskreistagung hauptsächlich zum Thema „Strukturen nichtkristalliner Materialien aus dem Blickwinkel der Thermodynamik und der Kristallographie“ durchzuführen. Sie wird vom 14. bis 16. September 2009 – traditionell im Hotel „Am Kellerberg“ in Wolfersdorf – stattfinden. Alle an dieser Thematik Interessierten sind herzlich eingeladen.

Bernd Müller, Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena

# DIE XXX. TAGUNG DES AK 4 NICHTKRISTALLINE UND PARTIELLKRISTALLINE STRUKTUREN

Seine XXX. Arbeitstagung führte der Arbeitskreis „Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen“ vom 21. bis 23. September 2009 traditionsgemäß im Hotel „Am Kellerberg“ in Wolfersdorf – im schönen, ruhigen und erholsamen Thüringer Holzland gelegen – durch. Die Arbeitstagung zeichnete sich wiederum durch eine angenehme, offene und konstruktive Atmosphäre aus, welche noch durch die gute Küche des Hotels beflügelt wurde.

Die dreißigste Arbeitskreistagung veranlasste einen Rückblick auf die erfolgreiche Arbeit unseres Arbeitskreises zu den Strukturen nichtkristalliner Materialien, welcher vor allem in unseren Abendvorträgen realisiert wurde, zum einen in einem Vortrag unseres ehemaligen Arbeitskreissprechers Gerhard Herms unter Mitarbeit von Kurt Zickert – beide aus der Arbeitsgruppe der Universität Rostock zur Strukturaufklärung von Gläsern – unter dem Titel „Röntgen-Diffraktometrie von Gläsern unter den Bedingungen des Arbeiter- und Bauernstaates“ und zum anderen in einem Vortrag unseres langjährigen Stellvertreters des Arbeitskreissprechers Herrn Hoyer, Professor Röntgen- und Neutronendiffraktometrie an der TU Chemnitz, zur Problematik des Diffraktometereigenbaus an der TU Karl-Marx-Stadt. Diese Vorträge und die anschließende Diskussion ließen uns wieder bewusst werden, was alles in diesem Zeitraum von etwa vierzig Jahren sowohl wissenschaftlich, geräte- und rechnertechnisch als auch methodisch auf dem Gebiete der Strukturaufklärung nichtkristalliner Materialien – eingebettet in den politischen und ökonomischen Alltag – sich zugetragen und verändert hat sowie passiert ist.

An der Arbeitskreistagung nahmen insgesamt vierundzwanzig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten teil, davon sechs Doktoranden sowie vier Mitarbeiter aus der Industrie. Es wurden zwölf Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit – auch zu anschließenden, teilweise sehr heftigen Diskussionen – zur Verfügung stand. Das Spektrum der vorgetragenen Themen überstrich die metaphysisch-ontologischen Aspekte der Ordnung und des Chaos im Glas, wobei bemerkt wurde, dass Ordnung bzw. Unordnung ungeeignete Begriffe sind, Strukturen nichtkristalliner Strukturen zu charakterisieren; den Werkstoff  $\text{SiO}_2$  von seiner Herstellung bis zur Anwendung als poröses Material im nanoskaligen Bereich; vom Hinweis auf die Bedeutung der Elektronenzustände für die Strukturbildung bis zu molekuldynamischen Methoden zur Generierung von Glasstrukturmodellen und deren Dynamik; der Charakterisierung der strukturellen Grundlagen von Leitfähigkeitsänderungen in Gläsern durch Einbau von Ag; der Strukturaufklärung von Legierungen und metallischen Gläsern; der grundlegenden Bedeutung von Kugelpackungen für die Strukturbildung metallischer Gläser, aber auch zur Darstellung poröser Materialien; der Notwendigkeit und den aktuellen Möglichkeiten der Charakterisierung der strukturellen Änderungen in Abhängigkeit der Temperatur von der Schmelze über den Glasübergang zum festen Glas; bis hin zur Anwendung kristallographischer und topologischer Methoden zur Strukturbeschreibung nichtkristalliner Materialien, demonstriert an den Eigen- und Verbundpolyedern der kristallinen Phasen des  $\text{SiO}_2$  als potentielle Polyederstrukturen für nichtkristalline Materialien, vorgeführt an Modellen der Strukturen nichtkristallinen  $\text{SiO}_2$ ; aber auch von den vielen mit dieser Thematik verbundenen Problemen, die es noch zu bearbeiten gilt.

Durch diese Themenvielfalt konnte das Schwerpunktthema der diesjährigen Arbeitskreis-tagung „Strukturen nichtkristalliner Materialien aus dem Blickwinkel der Thermodynamik und der Kristallographie“ bezüglich des kristallographischen Blickwinkels fast vollständig abgedeckt werden, jedoch der thermodynamische Aspekt kam durch den Ausfall von vorgesehenen Referenten zu kurz. Etwas euphorisch konnte als Resümee der Vorträge und Diskussionen festgestellt werden, dass auch noch für weitere dreißig Arbeitskreistagungen genügend offene Probleme zu den Strukturen und Strukturbildungen nichtkristalliner Materialien gelöst werden können und müssen.

Die Vortragenden und die Titel der gehaltenen Vorträge seien zur allgemeinen Information hier aufgeführt, wobei die Kurzfassungen der Vorträge von der Seite des Arbeitskreises <http://www.chemie.uni-jena.de/DGK-AK4> als pdf-Dateien heruntergeladen werden können:

- G. Herms, J. Sakowski (Rostock): Zur Strategie der Untersuchung von Strukturänderungen beim Glasübergang
- U. Hoppe (Rostock): Structure of  $\text{NaPO}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5$  glasses
- Kaban<sup>1</sup>, P. Jovari<sup>2</sup>, W. Hoyer<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Chemnitz, <sup>2</sup>Budapest): Structural changes in  $\text{As}_2\text{S}_3$  and  $\text{As}_2\text{Se}_3$  chalcogenide glasses upon addition of Ag
- J. Marczinke<sup>1</sup>, S. Gruner<sup>1</sup>, L. Hennet<sup>2</sup>, W. Hoyer<sup>1</sup>, G. J. Cuello<sup>3</sup> (<sup>1</sup>Chemnitz, <sup>2</sup>Orléans, <sup>3</sup>Grenoble): Die atomare Struktur flüssiger Ni-Si-Legierungen
- Th. Pfeiffer, H. Roggendorf (Halle): Auflösen von Quarz, Kieselglas oder Opal in NaOH zur Herstellung von Wasserglas – Diskussion der Ergebnisse im Lichte der Thermodynamik
- B. Müller (Jena): Aspekte kristallographischer und topologischer Methoden zur Strukturbeschreibung nichtkristalliner Materialien
- D. Ehrt (Jena): Chaos im Glas
- H. J. Hoffmann (Berlin): Elektronische Struktur und thermische Eigenschaften der festen chemischen Elemente
- N. Mattern (Dresden): X-ray Diffraction of Cu-Zr Bulk Metallic Glasses
- Ph. Kuhn, J. Horbach (Köln): Structure and Dynamics of Zr-Ni Alloy Melts
- H. Hermann (Dresden): Effektive mechanische und dielektrische Eigenschaften poröser  $\text{SiO}_2$ -Gläser
- V. Kokotin, H. Hermann (Dresden): Geometrical Aspects of the Glass-Forming Ability of Dense Binary Hard-Sphere Mixtures

Eine Exkursion führte die Teilnehmer zur Kunstsammlung Jena, die anlässlich des neunzigsten Gründungsjubiläums des Bauhauses eine Ausstellung „Punkt und Linie zu Fläche – KANDINSKY am Bauhaus“ offeriert. Die Malerei und Graphik von Wassily Kandinsky als Professor am Bauhaus beeindruckte infolge ihrer sehr vielfältigen geometrischen und abstrahierenden Formen, insbesondere lassen sich daraus auch für die Bildungen nichtkristallographischer Strukturen interessante Analogien ziehen, auch bezüglich von Metamorphosen und Amorphosen. Das Zusammenführen recht unterschiedlicher Formen in den Bildern Kandinskys zu ausgewogenen, ästhetischen Darstellungen, zur Harmonie von gegensätzlichen Figuren gibt folgerichtig Anregungen zu Strukturbeschreibungen nichtkristalliner Materialien.

Die Arbeitskreisversammlung wählte einstimmig Herrn Dr. Helmut Hermann (Dresden) als Stellvertreter und Herrn Dr. Bernd Müller (Jena) als Arbeitskreissprecher für die nächsten drei Jahre. Weiterhin wurde beschlossen, die XXXI. Arbeitskreistagung hauptsächlich zum Thema „Strukturen und Strukturbildungen von nichtkristallinen zu nanokristallinen Materialien“ durchzuführen. Sie wird vom 22. bis 24. September 2010 – wiederum im Hotel „Am Kellerberg“ in Wolfersdorf – stattfinden. Alle an dieser Thematik Interessierten sind herzlich eingeladen.

Bernd Müller, Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena

# JAHRESBERICHT DES AK 6

## MOLEKÜLVERBINDUNGEN

Der Arbeitskreis hat 2008 die Reihe der bewährten Kurse zur Einkristallstrukturanalyse fortgesetzt und sich sowohl zum nunmehr fünften Mal im Kloster Hardehausen am einwöchigen Intensivkurs beteiligt, als auch die mittlerweile sechste Auflage des Kieler Workshops zu Fehlern und Fallen der Einkristallstrukturanalyse mitgetragen. Über den Intensivkurs in Hardehausen findet sich ein ausführlicher Bericht in den DGK-Mitteilungen, Heft 37 auf Seite 57.

Der Kieler Workshop wurde von Christian Näther organisiert und mit Unterstützung durch Michael Bolte (Frankfurt/Main) vom 20. bis 24. Juli 2008 durchgeführt. Der Workshop bietet maximal 25 Teilnehmern die Gelegenheit an praktischen Beispielen Problemfälle der Einkristallstrukturanalyse unter fachkundiger Anleitung zu bearbeiten. Insofern ergänzt dieser Kurs den mehr theoretisch orientierten Intensivkurs in idealer Weise.

Für 2009 sind vom Arbeitskreis wieder zwei Veranstaltungen geplant. Einerseits findet die Reihe der jährlich stattfindenden Kieler Workshops ihre Fortsetzung vom 19. bis 23. Juli 2009 im Institut für Anorganische und Institut für Organische Chemie der Universität Kiel. Organisator ist wiederum Christian Näther. Anstelle des nur alle zwei Jahre veranstalteten Intensivkurses laden der AK Molekülverbindungen und der Arbeitskreis ChemKrist der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie diese Jahr vom 14. bis 17. September nach Freiburg ein. Unter der bewährten Federführung von Caroline Röhr und Egbert Keller (Mitorganisatoren der gelungenen 14. DGK-Jahrestagung Freiburg 2006) wird der Workshop „Was hinter meiner Software steckt (Mehr Verständnis für kristallographische Zusammenhänge!)“ organisiert.

Der DGK und den Sponsoren aus der Industrie gebührt herzlicher Dank für die finanzielle Unterstützung des Arbeitskreises, die es ermöglicht die Teilnahme für den wissenschaftlichen Nachwuchs preisgünstig zu gestalten.

C. W. Lehmann, Mühlheim



# WORKSHOP DES AK 7 NEUTRONENSTREUUNG: „NEUTRONEN FÜR KRISTALLOGRAPHEN“

Die Arbeitsgruppe veranstaltete den Workshop im Anschluss an die 8. Deutsche Neutronenstreutagung in Garching an der TU München vom 17. bis 18. September 2008. Der zweitägige Workshop richtete sich an Studenten und Wissenschaftler der verschiedenen Natur- und Materialwissenschaften. Ein Ziel war eine Einführung in die verschiedenen wissenschaftlichen Anwendungen von Neutronen, das andere war die Diskussion der verschiedenen Methoden im Hinblick auf ihre Eignung für die unterschiedlichen wissenschaftlichen Arbeiten der Teilnehmer und wie sie in der Praxis an Messzeit für ihre Projekte gelangen können.

Am ersten Tag wurde die Analyse von atomaren und magnetischen Strukturen mit Hilfe der Neutronendiffraktion behandelt. Es gab vier Vorlesungen, zwei zu Pulvermethoden, zwei zu Einkristalldiffraktion, jeweils in Strukturbestimmung und Magnetismus unterteilt (R. Gilles, A. Schneidewind, M. Meven, M. Braden). Am zweiten Tag wurden vier Vorlesungen zu den Bereichen Phononen und Magnonen, diffuse Streuung, Materialwissenschaften und Soft Matter gehalten (M. Braden, F. Frey, W. Brokmeier, V. Haramus). Im Anschluss wurden bei einer Führung durch die Forschungsneutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) Instrumente zu den verschiedenen Anwendungen gezeigt.

Der Workshop war sehr gut besucht. Neben den zahlreichen angemeldeten Teilnehmern von Universitäten aus ganz Deutschland und darüber hinaus (Aachen, Augsburg, Braunschweig, Dresden, Freiberg, Köln, München, Regensburg, Göttingen, Innsbruck) kamen auch Teilnehmer der Neutronenkonferenz zu dem Workshop, so dass mehr als 50 Teilnehmer den Hörsaal füllten. Die Zuhörer stellten im Anschluss an die Vorträge viele Fragen und diskutierten in den Pausen angeregt mit den Vortragenden. Dies zeigt das große Interesse an den gezeigten Methoden und auch, dass die Mischung aus Vorträgen, Diskussionen und Führung durch die Forschungseinrichtung bei den Teilnehmern gut angekommen ist.

Der Arbeitskreis bedankt sich bei den Vortragenden, den Mitarbeitern der TU München bzw. des FRM II und der DGK, durch deren Unterstützung ein gelungener Workshop ohne Teilnahmegebühr ermöglicht wurde.

Martin Meven, München





# BERICHT DES AK 9

## THEORETISCHE KRISTALLOGRAPHIE

Bei der 17. Jahrestagung für Kristallographie in Hannover übernahm ich von Herrn Prof. Dr. Helmuth Zimmermann (Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg) die Aufgabe des Arbeitskreissprechers im AK 9 Theoretische Kristallographie der DGK. Damit verbunden sehe ich die Aufgabe, mit Ihnen gemeinsam aktuelle Entwicklungsfelder für die Theorie aufzuspüren, zu präzisieren, und im Sinne einer lebendigen Theorie gezielt in die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses einzubringen.

Als erster Schritt in diese Richtung ist für die zweite Februarwoche 2010 ein Workshop zur Modellierung in der Kristallographie geplant, der in bewährter Zusammenarbeit mit dem Sprecher des AK 14 Computational Crystallography, Herrn Prof. Dr. Gerhard Raabe, an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule in Aachen stattfinden wird. Der Kurs soll insbesondere die Grundlagen gängiger Modellierungsverfahren auf der Basis der Elektronenstrukturtheorie vermitteln und aktuelle Weiterentwicklungen aufzeigen.

Einige kurze Worte zu meinem Werdegang: Ich habe an der Technischen Universität München Chemie studiert und dort in Theoretischer Chemie bei Prof. Dr. Notker Rösch promoviert. Danach war ich für drei Jahre als Postdoktorand am Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart in der Abteilung von Prof. Dr. Manfred Rühle bei Prof. Dr. Christian Elsässer (heute Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg Brsg.) und ein Jahr als Fellow an der Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati in Triest bei Prof. Erio Tosatti vorwiegend mit festkörperphysikalischen und spektroskopischen Fragestellungen befasst. 2004 habe ich an der Technischen Universität Chemnitz im Fach Physik über den Einfluss innerer Grenzflächen auf die strukturellen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften polykristalliner Materialien sowie von Materialverbänden habilitiert. Seit 2006 bin ich Gruppenleiter am Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (Mitglied der Leibniz-Gesellschaft), wo wir uns mit physikalischen Effekten beschäftigen, die durch Abweichungen von der ungestörten, ideal kristallinen Umgebung hervorgerufen werden. Dazu zählen punktförmige und ein-/zweidimensional ausgedehnte Defekte, Größeneffekte beim Übergang zu sehr kleinen Strukturen, aber auch externe Faktoren wie angelegte Felder oder Umgebungseinflüsse wie Temperatur und Druck.

Mein Interesse an der Kristallographie basiert auf der Theorie von Punkt-, Raum- und Farbgruppen, auf deren Hilfe meine Gruppe und ich zum Aufsetzen der Simulationen und vor allem beim Analysieren der Ergebnisse nicht verzichten können. In diesem Zusammenhang sehe ich Potential für weitere Entwicklungen im Hinblick auf komplex gekoppelte Materialien, auf nanoskalige Systeme, aber auch im Hinblick auf Materialien, die nur partiell geordnet sind. Dies skizziert den Tellerrand, bis zu dem ich auf der Basis meiner eigenen Erfahrungen blicken kann. Für Ihre Anregungen, Fragen, Vorschläge und kritischen Kommentare dazu und vor allem darüber hinaus bin ich Ihnen dankbar.

Sibylle Gemming

Tel: +49-351-260-2470, s.gemming@fzd.de

Forschungszentrum Dresden-Rossendorf, Postfach 510119, D-01314 Dresden



# BERICHT DES AK 15 MINERALOGISCHE UND TECHNISCHE KRISTALLOGRAPHIE

**Sprecher:** Prof. Dr. Herbert Pöllmann

**Stellvertreter:** Prof. Dr. Horst Pentinghaus

Mitglieder des Arbeitskreises Mineralogische und Technische Kristallographie waren im Jahr 2009 auf zwei Tagungen in Halle vertreten:

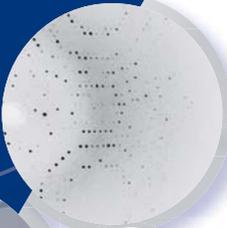
1. Workshop Building Material Analysis vom 24.03.09 bis 26.03.09 mit Ehrengast Hugo Rietveld ([www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/mingeo.html](http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/mingeo.html)),
2. Jahrestagung der deutschen Mineralogischen Gesellschaft vom 13.09. bis 16.09.2009 in Halle.

Für das Jahr 2010 ist wieder ein Kurs speziell für jüngere DGK-Mitglieder geplant, der wichtige anwendungstechnische Aspekte mit Grundlagen der mineralogischen und technischen Kristallographie verbinden soll. Beide Tagungen und Workshops werden von der ICDD unterstützt. Es ist geplant, auch verstärkt auf analytische Problemstellungen und deren Behandlungen im Rahmen des AK 15 einzugehen. Ein erster Weg der hier besprochen wurde ist ein anwendungstechnisch orientierter Rietveld-Kurs in Halle vom 22. bis 25.09.2009 mit Gastredner Prof. Dr. J. de Villiers (Universität Pretoria, Südafrika).

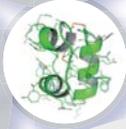
Die Ankündigung für einen Studentenkurs im Frühjahr 2010 wird ebenfalls erfolgen (siehe Ankündigungsteil Seite 104).

Herbert Pöllmann, Halle

Protein  
Crystallography



Small Molecule  
Crystallography

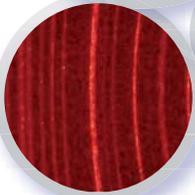
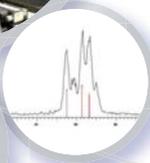


**30 W**  
**30 W**  
**air-cooled**  
**Quazar™ multilayer optics**  
**unprecedented flux density**  
**low maintenance**  
**2D focusing or collimating**  
**3 years warranty**  
**High Brilliance Sealed Tube**



for Cu and Mo  
Ag and Cr

XRD



SAXS

## 6. INTENSIVKURS ZUR STRUKTURANALYSE INKOMMENSURABLER KRISTALLE

Von Donnerstag, den 5. März, bis Sonntag, den 8. März 2009, richtete der Arbeitskreis 16 „Aperiodische Kristalle“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie unter Leitung von Sander van Smaalen zum sechsten Mal einen Kompaktkurs aus, der am Lehrstuhl für Kristallographie der Universität Bayreuth stattfand und sich mit den Grundlagen, Methoden und Besonderheiten der Strukturbestimmung und der Strukturanalyse von modulierten Strukturen und von Kompositkristallen befasste.

Der ursprünglich auf 28 Teilnehmer ausgerichtete Kurs war mit 31 Teilnehmern ausgebucht. Diese kamen aus Deutschland (14), Russland (5), der Schweiz (4), den USA (4), der Tschechischen Republik (1), Spanien (1), Polen (1) und Indien (1). Die sechs Vortragenden bzw. Tutoren waren Vaclav Petricek und Michal Dusek (beide aus Prag, Tschechien), Lukas Palatinus (Lausanne, Schweiz), Nadezhda Bolotina (Moskau, Russland), sowie Andreas Schönleber und Sander van Smaalen (beide vom Lehrstuhl für Kristallographie der Universität Bayreuth). Großer Dank gebührt der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK), die diesen Kurs durch Ihre finanzielle Unterstützung erst ermöglicht hatte. Die Teilnahme osteuropäischer Wissenschaftler wurde durch eine Reisebeihilfe der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert.

Die ersten Vorträge mit den Titeln „Aperiodic order in crystalline materials“, „Superspace description of modulated structures“, „Superspace symmetry“ und „Diffraction by incommensurate structures“ dienten als allgemeine Einführung in das Thema. Ziel war es hierbei, einen Überblick über das gesamte Forschungsgebiet der aperiodischen bzw. inkommensurablen Kristalle zu geben, in das Konzept und in die Symmetrie des  $(3+d)$ -dimensionalen Superraums als mathematisches Hilfsmittel zur Beschreibung dieser Strukturen einzuführen und das Beugungsverhalten inkommensurabler Kristalle und die Beschreibung des Strukturfaktors im Superraum zu erläutern.



*Die Teilnehmer während der Vorträge und beim praktischen Arbeiten*

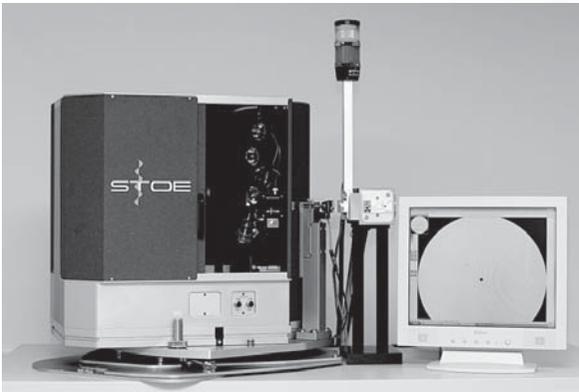
Mit den Vorträgen „Fourier methods in superspace“ und „Modulation functions by the Maximum Entropy Method“ wurden Methoden zur Findung der Atom-Modulationsfunktionen dargestellt. Der Vortrag „Structure solution by Charge-Flipping“ stellte eine *Ab-initio*-Methode vor, mit der Kristallstrukturen aperiodischer Kristalle systematisch und erfolgreich direkt im Superraum bestimmt werden können. Die weiteren Beiträge „Commensurately and incommensurately modulated structures of Lazurite minerals – a case study“, „Disorder and aperiodic order“ und „Modulated molecular compounds“ behandelten die Anwendung des Superraums zur vereinfachten Beschreibung komplexer Überstrukturen, kristallchemische Aspekte aperiodischer Strukturen und potentielle Probleme und deren Lösungen bei der Datensammlung.

Ein wesentlicher Bestandteil des Intensivkurses war das Arbeiten am Computer. Abwechselnd zu den Vorträgen am Vormittag konnten die Kursteilnehmer nachmittags – nach einem Einführungsvortrag „Introduction to JANA2006“ – das soeben Gelernte sofort in Rechenübungen und beim praktischen Arbeiten anwenden und vertiefen. Dazu standen den Teilnehmern jeweils ein eigener Arbeitsplatzrechner in einem CIP-Pool der Universität Bayreuth zur Verfügung, auf dem die notwendigen Computerprogramme JANA2006 (V. Petricek, M. Dusek und L. Palatinus, Prag) und SUPERFLIP (L. Palatinus und G. Chapuis, Lausanne) installiert waren. Unter Zuhilfenahme einer Anleitung konnten sich die Kursteilnehmer an ausgewählten Beispielen verschiedener Schwierigkeitsgrade Schritt für Schritt in die unterschiedlichen Problemstellungen einarbeiten und wurden gleichzeitig durch das Prozedere der Strukturverfeinerung modulierter Strukturen geführt. Die in der Anleitung gestellten Fragen und Aufgaben regten dazu an, sich diverse Aspekte der Strukturanalyse im Superraum, wie zum Beispiel die Herleitung der Symmetriebeziehungen zwischen den einzelnen Modellparametern, selbst auszuarbeiten. Während dieser praktischen Arbeiten waren alle Vortragenden als Tutoren präsent, um die größeren und kleineren Probleme sofort mit Rat und Tat zu lösen. Für die Rechenübungen und das praktische Arbeiten am Computer stand etwa die Hälfte der gesamten Zeit zur Verfügung.

Die Teilnehmer kamen wissenschaftlich gesehen aus der anorganischen und organischen Festkörperchemie, Festkörperphysik, Metallkunde, Biochemie, Strukturbiologie und aus der pharmazeutischen Industrie. Dies zeigt, dass weiterhin in allen Bereichen der Kristallographie ein ungeschmäleretes Interesse am Thema der aperiodischen Kristalle besteht. Aufgrund der positiven Resonanz während dieses und auch der letzten Kurse ist der „7<sup>th</sup> Workshop on Structural Analysis of Incommensurate Crystals“ für das Frühjahr 2011 geplant.

Andreas Schönleber, Bayreuth

# STOE IPDS 2T Einkristalldiffraktometer



- Imaging Plate mit 2-Kreisgoniometer und maximal  $137^\circ 2\theta$
- 5 Positionen:  $0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ 2\theta$
- Hoch- und Tieftemperaturzusätze
- Für abgeschmolzene Röhre, Drehanode und Microfokus BDS

# STOE STADI P Pulverdiffraktometer

- Monochromatische  $K\alpha_1$ -Strahlung für Fe, Co, Cu, Mo oder Ag-Anoden
- Transmissions- / Debye-Scherrer- oder Bragg-Brentano Geometrie
- Multi Purpose Diffraktometer
- Hochdurchsatzanalyse und Kombinatorik
- Verschiedene Detektorsysteme
- Hoch- und Tieftemperaturzusätze





*Teilnehmer und Vortragende des  
6. Intensivkurses zur Strukturanalyse Inkommensurabler Kristalle*



*Die Teilnehmer des 4. Topas User's Meeting*

## 4. TOPAS USER'S MEETING

### „DEVELOPMENT AND APPLICATION OF MACROS USING THE ALGEBRAIC LANGUAGE OF TOPAS“

Das vierte Topas User's Meeting fand vom 18. bis 20. Juni 2009 in Sardinia oberhalb von Trento statt und wurde von Paolo Scardi, Robert Dinnebier und Arnt Kern organisiert. Dieses Mal lag der Themenschwerpunkt des Meetings auf der Entwicklung und Anwendung von MACROS in „Topas academic“ sowie auf der Mikrostrukturanalyse unter Verwendung der Programme PM2K und Topas.

Am Workshop, der im Centro Congressi Panorama „über den Dächern Trentos“ stattfand, nahmen 41 Teilnehmer sowie 11 Vortragende aus insgesamt 16 Ländern teil. Zu jedem Vortrag gab es neben der Theorie auch einen entsprechenden Praxisteil. Zu Beginn gab Robert Dinnebier eine Einführung in die Verwendung der Topas-Macro-Sprache. Danach folgte der Vortrag von James Cline, der den Fundamental-Parameter-Ansatz sowie Instrumentenprofil-Funktionen behandelte. Andreas Leineweber sprach über die physikalische Interpretation anisotroper Linienverbreiterung.

Am nächsten Tag demonstrierte Bernd Hinrichsen die Verwendung von „Charge Flipping“ zur Strukturlösung in Topas. Anschließend folgte der Beitrag von Pamela Whitfield, der die Probleme von Vorzugsorientierung bei Strukturlösungen behandelte. Kevin Stone stellte das Verfahren der „robusten Verfeinerung“ vor, das es ermöglicht Strukturverfeinerungen auch dann durchzuführen, wenn zusätzlich zum untersuchten Material noch Fremdphasen unbekannter Struktur vorliegen. John Evans präsentierte die parametrische Rietveldverfeinerung, die es ermöglicht auch nicht-kristallographische Parameter direkt aus den Pulverdaten zu verfeinern. Außerdem zeigte er die Möglichkeiten, der Verfeinerung von „Distortion Modes“ anstelle von Atompositionen. Melanie Müller demonstrierte wie die parametrischen Rietveldverfeinerung zur Ermittlung der Kinetik von Phasenumwandlungen angewendet werden kann.

Am letzten Tag begann Bill David mit seinem Beitrag über die Analyse der Partikelgröße in Topas. Ivan Halasz stellte vor, wie TLS-Matrizen aus Pulverdaten verfeinert werden können. Zusätzlich zeigt er, wie man Zustandsgleichungen unter Verwendung von Penalty-Funktionen in Topas minimieren kann. Ian Madsen präsentierte verschiedene Wege, die quantitative Phasenanalyse in Topas auch für Proben mit amorphem Anteil ermöglichen. Zum Abschluss gaben Paolo Scardi und Matteo Leoni eine Einführung in die „Whole Powder Pattern Method“ und zeigten mögliche Anwendungen im Programm PM2K.

Aber auch der persönliche Austausch kam bei diesem Meeting nicht zu kurz. Die gemeinsamen Abendessen, mit italienischer Küche und Wein, eröffneten die Möglichkeit, sich über die Themen des jeweiligen Tages noch in gemütlicher Runde auszutauschen. Die Proceedings zum Workshop sind zurzeit in Arbeit.

Melanie Müller, Stuttgart



PERSONALIA:



## WOLFRAM SAENGER – 70 JAHRE



*Blumen von der DGK zum  
70. Geburtstag von  
Wolfram Saenger (rechts)  
am 23. April 2009*

Im Kreise seiner Mitarbeiter und Kollegen feierte Prof. Wolfram Saenger seinen 70. Geburtstag am Institut für Chemie der Freien Universität Berlin.

Wolfram Saenger zählt zu den Pionieren der Strukturbioogie in Deutschland. Er wurde in Frankfurt-Höchst als Sohn eines Chemikers geboren und studierte von 1958 bis 1964 Chemie an der TH Darmstadt und der Universität Heidelberg. Bereits 1965 promovierte Wolfram Saenger unter der Anleitung von Friedrich Cramer zum Dr.-Ing. mit einer Arbeit über schnelle Kinetiken an Cyclodextrin-Einschlussverbindungen.

Während seiner Postdoktorandenzeit (von 1965 bis 1967) an der Harvard University bei Robert B. Woodward und Jack Z. Gougoutas erlernte Wolfram Saenger das Handwerk der Kristallographie. Nach seiner Rückkehr nach Deutschland bekam er Gelegenheit, am Max-Planck-Institut für experimentelle Medizin in Göttingen ein eigenes kristallographisches Labor zu etablieren, das sich mit Strukturanalysen von Einschlussverbindungen, Nukleinsäuren und vermehrt von Proteinen schnell einen Namen machte. Seit 1981 bekleidet Wolfram Saenger eine Professur am Institut für Kristallographie (jetzt Institut für Chemie) der Freien Universität Berlin. Bis zum heutigen Tag hat er fast 600 Aufsätze zu verschiedenen strukturchemischen und -biologischen Themen in wissenschaftlichen Fachzeitschriften und zwei vielbeachtete Monographien – „Principles of Nucleic Acid Structure“ (1983) und „Hydrogen Bonding in Biological Structures“ (1991) – publiziert.

Wolfram Saengers wissenschaftliches Wirken wurde mit zahlreichen Auszeichnungen gewürdigt. Er ist Mitglied der European Molecular Biology Organization (EMBO, seit 1984) und der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften (seit 1994). Im Jahre 1988 wurde er mit dem Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft, 1989 mit dem Alexander-von-Humboldt-Preis und 2004 mit der Carl-Hermann-Medaille der DGK ausgezeichnet. Als Vorsitzender der „Arbeitsgemeinschaft Kristallographie“ (AGKr) engagierte er sich für die Zusammenführung der deutschen Kristallographen nach der Wiedervereinigung und die Gründung der DGK.

Udo Heinemann, Berlin



LAUDATIO ANLÄSSLICH DER  
VERLEIHUNG DER WILL-KLEBER-  
MEDAILLE DER DGK  
AN PROF. DR. RUDOLF ALLMANN  
DURCH PROF. DR. WERNER FISCHER

Sehr geehrter Herr Vorsitzender, meine Damen und Herren, vor allem aber – lieber Rudi,

als ich gebeten wurde, anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Medaille an Herrn Prof. Dr. Rudolf Allmann aus Marburg eine Laudatio zu halten, zögerte ich zunächst etwas, da ich mich für solche Reden nicht recht begabt halte. Dann habe ich aber doch gern zugesagt, denn schließlich kennen wir beide uns seit fast 50 Jahren. Bis zur gleichzeitigen Verabschiedung in den Ruhestand 1996 haben wir im gleichen Institut – erst als wissenschaftliche Mitarbeiter, dann als Professoren – gearbeitet und in einem nicht immer einfachen Umfeld die gegenseitige Achtung und einen stets freundschaftlichen Umgang gewahrt. Dafür schon gleich meinen herzlichen Dank.

Bevor ich zur Begründung der Auszeichnung und zum Dank der DGK komme, möchte ich Ihnen zunächst Herrn Allmann näher vorstellen. Rudolf Allmann wurde am 19. Februar 1931 in Kötzschau bei Merseburg, also im jetzigen Sachsen-Anhalt geboren. Bald nach seiner Geburt zog die Familie nach Wettelrode im Kreis Sangerhausen um. Dort verbrachte er seine Jugend und legte 1949 in Sangerhausen sein Abitur ab. Anschließend studierte er zunächst von 1949 bis 1952 in Halle Chemie und Mathematik mit dem Ziel Höheres Lehramt. Nachdem er einige Jahre an seiner alten Schule unterrichtet hatte, setzte er sein Studium 1955 bis 1959 in Marburg fort. Dort wurde sein Studium in Halle nicht anerkannt, er musste also noch einmal ins Studium. Das erwies sich als Glücksfall, denn erst dadurch kam er mit der Kristallographie in Berührung und wurde von ihr nicht wieder losgelassen – eine Erfahrung, die ich mit ihm teile, denn auch ich kam als Lehramtskandidat mit den gleichen Fächern zur Kristallographie. Für ihn in Marburg und für mich in Kiel konnten die äußeren Umstände allerdings unterschiedlicher kaum sein, so dass wohl auch bei ihm die Faszination des Fachs die entscheidende Rolle spielte. Er begann in Marburg mit der Arbeit an seiner Dissertation, folgte dann aber 1961 als wissenschaftlicher Mitarbeiter seinem Doktorvater Erwin Hellner nach Kiel, als dieser dort Direktor des Mineralogischen Instituts wurde. Das Promotionsverfahren beendete Herr Allmann 1963 allerdings von auswärts mit dem Rigorosum in Marburg, nachdem ihm seine erste Kristallstrukturbestimmung an einer Jodadditionsverbindung des p-Jod-n, n-dimethylanilins gelungen war. 1964 erhielt Erwin Hellner einen Ruf zurück nach Marburg und nahm alle Kristallographen des Kieler Instituts mit, also auch Herrn Allmann. Nach einem einjährigen Aufenthalt in den USA habilitierte sich Rudolf Allmann hier 1968 mit einer Arbeit über Doppelschichtstrukturen mit inkommensurablen, brucitähnlichen Schichten. 1970 wurde er zum Professor ernannt und blieb dann dem Marburger Mineralogischen Institut bzw. dem Fachbereich Geowissenschaften treu bis zur Erreichung des Ruhestands, der für ihn mehr ein Unruhestand werden sollte.

Zu der Zeit, als wir uns kennen lernten, befand sich die Kristallstrukturbestimmung in Deutschland im Aufschwung: Die Intensitäten der Röntgenreflexe wurden zunehmend durch Zählrohrmessungen gewonnen statt durch Schätzung von Filmschwärzungen, die ersten

Computerprogramme standen zur Verfügung (wenn man auch noch weite Reisen zu einem geeigneten Rechner in Kauf nehmen musste – nach Paris, dann nach Düsseldorf, Stuttgart, Darmstadt), und die Möglichkeiten zeichneten sich ab, welche die direkten Methoden zunächst nur der Vorzeichenbestimmung eröffnen würden. Methode der Wahl war aber vor allem die Auswertung von Pattersonsynthesen, die man ohne Kenntnis der Vorzeichen der Strukturfaktoren berechnen konnte, die aber nur Abstandsvektoren lieferten. Dementsprechend stellte jede Strukturbestimmung eine intellektuelle Herausforderung dar, die auch uns junge Mitarbeiter faszinierte und die wir ausleben konnten, da Herr Hellner für die bestmöglichen Bedingungen sorgte. Bei keinem von uns ging aber die Faszination so weit wie bei Herrn Allmann, der geradezu süchtig nach Strukturen wurde. Immer wieder wurde er dabei ertappt, dass er über der Pattersonsynthese eines Diplomanden brütete, bevor dieser sie zu Gesicht bekam. Dementsprechend bleibt die genaue Anzahl der von ihm bestimmten Strukturen im Dunklen. Aus seiner Publikationsliste geht aber hervor, dass sie über 100 liegt. Diese Liste umfasst übrigens 124 Zeitschriftenpublikationen, von denen 100 Strukturbestimmungen enthalten. Viele davon sind in chemischen Zeitschriften veröffentlicht, da die Verbindungen von Chemikern synthetisiert worden waren. Hinsichtlich der Substanzen zeigte sich Herr Allmann keineswegs wählerisch, denn er bestimmte die Strukturen von organischen und metallorganischen Verbindungen ebenso wie von anorganischen und speziell von Mineralen. So betrifft z. B. die meistzitierte seiner Arbeiten die Struktur des Minerals Pyroaurit. Rudolf Allmann wäre aber nicht Rudolf Allmann, wenn er es bei der Bestimmung von Strukturen allein belassen hätte, ohne darüber nachzudenken, was einer Kristallstruktur zugrunde liegt. So gibt es von ihm weitere Arbeiten zum Thema Bindungslängen und Bindungsstärken, Wasserstoffbrücken und drei Publikationen zu grundsätzliche Fragen im Zusammenhang mit der Strukturbestimmung. Auch in die Mineralogie weisen einige Arbeiten. In späteren Jahren interessierten ihn die Möglichkeiten der Pulverdiffraktometrie, die er in zwei Büchern darstellte. Mit einem Elektroniker zusammen automatisierte er ein Pulverdiffraktometer, das vor allem in der Lehre eingesetzt wurde. Alles in allem ist sein Lebenswerk bis dahin bereits eine öffentliche Würdigung wert, aber diese heutige Ehrung und den damit verbundenen Dank der DGK und vieler Wissenschaftler darüber hinaus hat er sich hauptsächlich für das verdient, was er nach seinem Ausscheiden aus dem so genannten aktiven Dienst für die Allgemeinheit geleistet hat, nämlich für die kritischen Revision der Dateneinträge der Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).

Die systematische Dokumentation von Kristallstrukturen hat in Deutschland eine lange Tradition, begründet durch die „Strukturberichte“ aus den 30er Jahren des vorigen Jahrhunderts. In ihnen wurden nicht nur die Strukturparameter aufgelistet sondern die Strukturen auch Strukturtypen zugeordnet. Mit den relativ wenigen damals schon bekannten Strukturen war dies von Hand zu leisten. Die Fortsetzung der Strukturberichte in den „Structure Reports“ beschränkte sich dann aber auf die reine Dokumentation. Die Suche nach verwandten Strukturen wurde dementsprechend mühsam. Als erkennbar wurde, welche Möglichkeiten die Computerisierung bieten würde, wurden daher unabhängig voneinander zwei Versuche gestartet, eine elektronische Datenbank für anorganische Strukturen aufzubauen, nämlich von Günter Bergerhoff in Bonn und von Erwin Hellner in Marburg. Das Hellnersche Projekt führte nicht zum Durchbruch, nicht zuletzt weil er es mit einer nicht allgemein brauchbaren Symbolik verknüpfte. Bergerhoff erkannte rechtzeitig, dass Aufbau und Pflege einer umfassenden und benutzerfreundlichen derartigen Datenbank die Ressourcen eines Universitätsinstituts übersteigen würden und konnte das Fachinformationszentrum in Karlsruhe für das Vorhaben gewinnen. Inzwischen enthält diese Datenbank ICSD fast 120.000 Einträge und bietet diverse Möglichkeiten des gezielten Zugriffs. Bei dieser Datenmenge konnte es natürlich nicht ausbleiben, dass zunächst Fehler auftraten, zumal auch die Originalarbeiten nicht immer fehlerfrei waren, und dass Lücken blieben. Herr Allmann

hatte dies erkannt und bot seine Hilfe an, als er sozusagen unbeschäftigt wurde. Inzwischen hat er 13 Jahre mühevoller Kleinarbeit hinter sich, denn er blieb nicht bei der Fehlersuche stehen, sondern begann danach mit der Zuordnung zu Strukturtypen. Hierfür waren auch grundsätzliche neue Überlegungen erforderlich, über die er 2007 in einer Publikation in *Acta Crystallographica* berichtete. Als Bedingung für einen Strukturtyp forderte er dabei, dass es für ihn mindestens 3 Vertreter geben müsse. Als Resultat dieser ebenfalls äußerst aufwendigen Arbeit kann ICSD jetzt 5000 Strukturtypen präsentieren, denen 70 % der erfassten Strukturen angehören. Es ist Herrn Allmann also zu verdanken, dass diese Datenbank inzwischen ein Forschungsinstrument darstellt, von dem Fritz Laves und Carl Hermann beim Erstellen der Strukturberichte kaum träumen konnten.

Man kann sich fragen, warum Herr Allmann diese Mühsal auf sich genommen hat, nachdem er an dem Hellnerschen Projekt nicht beteiligt war. Wenn man ihn so gut kennt wie ich, ist dies nicht so überraschend. Zwei seiner Eigenschaften mögen wohl dazu beigetragen haben: Zum einen ist dies seine Fähigkeit, auch komplizierte Texte mit erstaunlicher Geschwindigkeit fehlerfrei zu erfassen. Bei einem Schnelllesetest auf einem Institutsfest stellte er das einmal eindrucksvoll unter Beweis. Er nutzte diese Begabung dazu, wissenschaftliche Literatur in ungewöhnlichem Umfang zu studieren, und stieß dabei immer wieder auf Fehler in Strukturarbeiten, die ihn irritierten. Seine andere Eigenschaft ist seine gutmütige Hilfsbereitschaft, mit der er keiner Aufgabe aus dem Weg ging, um die andere gern einen Bogen machten. Ob es dabei um kleinere Dinge ging wie die Kassenprüfungen, oder um größere wie die Grabrede für einen zu früh verstorbenen Mitarbeiter oder die Betreuung tiefbegabter Studenten – Rudolf Allmann sprang ein und machte seine Sache gut. Auf dieser Linie liegt nun also – sozusagen als Gipfelleistung – auch seine Arbeit an der Datenbank, für die er heute verdienstermaßen geehrt wird.

Lieber Rudi, im Namen der DGK und in meinem eigenen Namen möchte ich Dir unser aller Dank aussprechen und Dir vom Herzen gratulieren. Wir alle wünschen Dir noch viele Jahre körperlicher und geistiger Frische, damit Du die Betreuung der ICSD erfolgreich fortsetzen kannst und sich Deine Hoffnung erfüllt, sogar noch die Strukturverwandtschaften entsprechend der Bärnighausenschen Stammbäume einzubauen.



# DANKESREDE FÜR DIE VERLEIHUNG DER WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE AUF DER DGK-TAGUNG

IN HANNOVER AM 09.03.2009

Sehr geehrter Herr Vorsitzender, meine verehrten Damen und Herren,

es war für mich eine freudige Überraschung, als Herr Bohatý mich Ende Januar anrief, um mir die anstehende Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze mitzuteilen. Es ist vor allem meine Arbeit an der Datenbank für anorganische Kristallstrukturen ICSD, die das Komitee bewogen hat, mir diese ehrenvolle Auszeichnung zu verleihen und ich möchte Ihnen etwas darüber berichten. Diese Arbeit begann vor 13 Jahren mit meiner Pensionierung und beansprucht seitdem einen Großteil meines Lebens. Kurz vor meiner Pensionierung wurde die Datenbank auch für Privatpersonen erschwinglich, da der Datenträger vom teuren Magnetband auf die handlicheren und billigeren CD's umgestellt wurde. Dadurch konnte ich mir eine eigene CD leisten und die Datenbank einer eingehenden Prüfung unterziehen. Als unverständlicher Fehler fiel mir dabei die Struktur eines Natriumchlorid-bromid Mischkristalls auf, bei der das Brom als  $\text{Br}^+$  auf dem Natriumplatz platziert war, anstatt sich seinen Gitterplatz mit dem Chloratom zu teilen. Außerdem fehlte über die Hälfte der Mineralnamen, selbst wenn diese im Titel der referierten Arbeit angegeben waren. Eine schmerzliche Lücke für einen Mineralogen. So bot ich dem Fachinformationszentrum in Karlsruhe meine Mitarbeit an ohne zu ahnen, welcher Zeit- und Arbeitsaufwand damit einhergehen würde. 1996 enthielt die Datenbank ca. 45000 Strukturen. Inzwischen hat sich der Bestand auf 120.000 fast verdreifacht.

Zunächst habe ich als Mineraloge die Minerale überprüft und die fehlenden Mineralnamen nachgetragen. Jetzt enthält die ICSD ca. 18000 Mineralstrukturen von etwas über 3000 Mineralspezies. Danach wurde die Datenbank mit den Strukturen der „Structure Reports“ abgeglichen, die bis 1990 die anorganischen Kristallstrukturen sammelten. Allein für das letzte Jahr 1990 waren 150 Strukturen aus den „Structure Reports“ noch nicht in der ICSD enthalten.

Dann folgte ungefähr bis 2002 die Aufnahme der Metallstrukturen, die bis dahin nur unvollkommen aufgenommen waren. Insgesamt konnte ich so in diesen 6 Jahren an die 18.000 Strukturen neu aufnehmen. Beim Abgleich der Strukturen mit der Originalliteratur fällt mir in der letzten Zeit auf, dass in den Fachbibliotheken zwar noch Studenten sitzen, diese aber keine Bücher mehr benutzen und ich als Störenfried auffalle, weil ich mir alle drei Minuten ein neues Buch hole.

Schließlich konnte ich mich meinem Hauptziel, der Zuordnung der Strukturen zu Strukturtypen, widmen. Voraussetzung dafür war eine Vereinheitlichung der Pearsonsymbole. Jedem der 14 Bravaisgitter entspricht jetzt genau ein Symbol und die Anzahl der Atome pro Zelle bezieht sich immer auf die Standardzelle. Dadurch werden die Pearsonsymbole invariant gegenüber Zelltransformationen. Der leider verstorbene Professor Parthé, der mir am Anfang mit vielen nützlichen Hinweisen zur Seite gestanden hat, meinte zwar, ohne eine vorhergehende Standardisierung der Strukturen wäre eine Zuordnung zu Strukturtypen nicht zu schaffen. Und tatsächlich gibt es einige Strukturtypen, wie z. B. den Olivintyp, bei denen

für die sechs möglichen Achsentransformationen andere Einschränkungen für die Achsenverhältnisse angegeben werden mussten. Insgesamt hat aber die fehlende Standardisierung den Arbeitsaufwand nicht so stark wie vorhergesagt erhöht. Für die 4860 Strukturtypen mit mindestens drei Vertretern, die im nächsten Update vorhanden sein werden, sind nur 5900 Definitionszeilen nötig gewesen. Der Mehraufwand wegen fehlender Standardisierung beträgt also nur 20 %. Das heißt aber nicht, dass auch in Zukunft in der ICSD keine standardisierten Daten vorhanden sein werden. Vielmehr ist für die Web-Version der ICSD die Standardisierung in Arbeit. Herrn Dr. Hinek muss ich danken für das Erstellen eines Programms, das alle Strukturtypen in der Datenbank – auf der Grundlage einer „Suchliste“ – in einem einzigen Batchlauf automatisch zuweist und auch für die schnelle Umsetzung meiner Wünsche für den Einbau neuer Möglichkeiten in das Dateneingabeprogramm. Ohne diese Zusammenarbeit wäre ich nicht in wenigen Jahren mit den Strukturtypen fertig geworden. Meiner Frau muss ich danken, dass sie mir für diese zeitraubende Arbeit den Rücken frei gehalten hat.

Noch eine Bemerkung zur Vollständigkeit der Datenbank: Ein Vergleich mit den Abstraktbänden kristallographischer Tagungen zeigt, dass fast die Hälfte der dort erwähnten Strukturen nie veröffentlicht wird. Um diesen Datenschatz zu heben wäre es sehr hilfreich, wenn alle Autoren einmal Ihre Publikationsliste mit den Strukturen abgleichen, die unter ihrem Namen in der ICSD vorhanden sind. Schicken Sie mir dann Ihre Publikationsliste mit Anmerkungen, welche Strukturen in der ICSD noch fehlen. Außerdem können noch in Regalen schlummernde unveröffentlichte Strukturen als „Personal Communication“ in die ICSD aufgenommen werden.

Ich hoffe, dass ich Sie mit meinen Ausführungen nicht gelangweilt habe, und dass ich auch noch einige weitere Jahre zum Wachsen und zur Verbesserung der Datenbank beitragen kann.

Rudolf Allmann

# LAUDATIO ZUR VERLEIHUNG DER CARL-HERMANN-MEDAILLE AN PROF. DR. ARMIN KIRFEL

IN HANNOVER AM 09.03.2009

Meine sehr geehrten Damen und Herren,

Wir ehren heute mit der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille unseren lieben, geschätzten Kollegen Armin Kirfel. Die Carl-Hermann-Medaille ist die höchste Auszeichnung, welche die Deutsche Kristallographische Gesellschaft an sehr verdiente Kristallographinnen und Kristallographen zu vergeben hat. Sie ehrt den Preisträger für seine herausragende wissenschaftliche Leistung auf dem Gebiet der Kristallographie und hält natürlich auch das Andenken an einen der prominentesten Vertreter unseres Faches, Prof. Carl Hermann, wach.

Schauen Sie sich nun bitte diese zwei Fouriertransformationen an. Gerne hätte ich Armin Kirfel heute und hier selber gefragt, wer oder was dort wohl transformiert wurde. Zurzeit braucht Armin Kirfel aber seine Kraft, um einer Erkrankung zu begegnen, die ihn heute leider daran hindert, persönlich anwesend zu sein und mit uns gemeinsam hier in Hannover zu feiern. Für unser aller am Realraumsehen trainiertes Auge ist es sehr schwierig bis unmöglich, anhand der beiden Transformationen zu erkennen, wie wohl ihre Entsprechungen nach der Rücktransformation aussehen mögen.

Ich halte es aber nicht für ausgeschlossen, dass Armin Kirfel mit einer Kombination aus genauem Beobachten, kritischem Nachdenken und der Verknüpfung mit dem bereits vorher Gesagten – nur zwei Personen wurden bisher genannt – einen „best guess“ abgeben würde, der von der Realität nicht weit entfernt läge. Nämlich, dass es sich hier um die Transformationen zweier Porträts handelt, seines eigenen und desjenigen Carl Hermanns. Die Ähnlichkeit der Beiden im Beugungsraum (achten sie auf die Brillen im Realraum) ist schon ein sehr guter Hinweis darauf, dass Armin Kirfel ein exzellenter Kristallograph und würdig ist, in die Reihe der mit der Carl-Hermann-Medaille Geehrten aufgenommen zu werden. Doch dies alleine ist sicherlich nur eine notwendige, nicht aber eine hinreichende Bedingung für die Preisverleihung.

Die in Kristallographenkreisen so hilfreiche Fouriertransformation soll hier aber nicht nur für diese einführende Motivation der Ehrung erhalten. Sie steht hier auch und insbesondere für die Meisterschaft Armin Kirlfels, mit der er ein – vielleicht das – Kerngeschäft der modernen Kristallographie beherrscht: Die Messung von Beugungsdaten mit höchster erreichbarer Präzision – hier macht er keine Kompromisse –, die Auswertung der Daten bis ins letzte Detail ihres Informationsgehaltes – hier scheut er keinerlei Mühen – und nicht zuletzt die natürlich kristallklare Präsentation der Forschungsergebnisse – hier verlangt er sich in der Klarheit der Formulierung alles ab.

Wie erreichen Sie, lieber Armin Kirfel, dieses Ziel immer wieder und scheinbar so leicht? Wahrscheinlich weil sie die zehnte Arbeitsregel Victor Goldschmidts – formuliert in seinem „Kursus der Kristallometrie“ – verinnerlicht haben: *„Bist Du an der Arbeit, so bestehe die Welt nur aus dem kleinen Punkt deiner konzentrierten Aufmerksamkeit“*.

Dies ist das Goldschmidtsche „Zen“ der Kristallographie, wie wohl auch das Zen jeder ernsthaften und sinnvollen Beschäftigung gleich mit welchem Forschungsgegenstand. Während gemeinsamer Arbeitsjahre in Würzburg durfte ich Armin Kirfel bei der Ausübung dieser „meditativen Übung Forschung“ beobachten. Die Übung beginnt damit, dass er sich in sein Büro zurückzieht und die Tür schließt – vielleicht, dies kann ich aber nicht definitiv sagen, hat er dann alle E-Mails und das Läuten seines Telefons ignoriert und höchstwahrscheinlich ein paar Zigaretten gedreht und für die nächsten Stunden bereit gelegt. Und dann hat er in dieser kreativen Ruhe eifrig den einzig wahren Exzellenzcluster genutzt den wir besitzen, nämlich den Zellhaufen unter unserer Schädeldecke, den wir gemeinhin als Gehirn bezeichnen und der unter günstigen Umständen nach intensiver Beschäftigung mit der Materie ein neuronales Feuerwerk abbrennt, welches man dann landläufig einen neuen Gedanken oder auch eine neue Erkenntnis nennt.

Verzeihen Sie, lieber Armin Kirfel, solche geschraubten Sätze in ihrer Laudatio! Denn ihre Meisterschaft in der Formulierung wissenschaftlicher Ergebnisse zeigt, dass sie sich auch die siebte Goldschmidtsche Regel zu Herzen nehmen: *„Kurz und klar; kein Wort zu viel.“*

Und ich weiß, dass sie die schnörkellose, die präzise Sprache lieben und beherrschen. Da sind sie zu Hause. Im Reich der klaren Formulierungen bei maximaler Ökonomie der Worte. Immer wieder habe ich Armin Kirfel zu Studenten sagen hören: *„Was sie nicht in schriftlicher Form kurz und klar formuliert zu Papier bringen können, haben sie noch nicht verstanden. Denken Sie doch noch einmal darüber nach.“*

Und seine Studenten haben diesen Rat befolgt, weil er stets selber das beste Beispiel gab und an seinen Formulierungen hart gearbeitet hat. Seine äußerste Konzentration auf den Kern der wissenschaftlichen Frage, diese Frage an die Natur überhaupt anfangs in der richtigen Weise zu stellen, zeichnet Armin Kirfel aus – hier ist er ein Forscher par excellence. Goldschmidt sagt dazu: *„Fragst Du die Natur eindringlich, so wird sie antworten. Oft schweigt sie lange, dann hast Du nicht richtig gefragt.“*

Armin Kirfel haben die Kristalle oft geantwortet. Und Armin Kirfel hat in seinen Forschungsprojekten nicht die Modefragen gestellt, nicht gerade die Drosophilas der Kristallographie bearbeitet. Die von ihm beackerten Forschungsfelder sind steinig gewesen, aber gerade deshalb auch so spannend und in der Lösung der Probleme so befriedigend und das Fach Kristallographie voran bringend. Dieses hoch konzentrierte Forschen ermöglicht Armin Kirfel eine große Vielfalt von Forschungsthemen bei gleichzeitigem Tiefgang zu verfolgen und erfolgreich zu bearbeiten.

Die Bandbreite seiner Forschung reicht von der Bestimmung detailliertester Elektronendichten über die Anisotropie der anomalen Dispersion und genaueste Bestimmungen der Kationverteilung in Mineralen, bis hin zur TOF Neutronenpulverbeugung, zur Neutronentomographie und Kooperationen mit den Geisteswissenschaften in Form der Zusammenarbeit mit Kollegen aus der Archäologie. Über 200 Publikationen sind so entstanden, Tagungsbeiträge, Jahresberichte etc. nicht mitgezählt. Sein Perfektionismus im Experimentieren wie in der späteren Darstellung der Ergebnisse verleiht seinen Arbeiten Bestand und macht sie zur Referenz und zum Fundament für folgende Forschergenerationen.

Durch seine Forschung hat er das Ansehen der Kristallographie auch über die Landesgrenzen hinweg gefördert und war immer ein guter Botschafter wissenschaftlichen Arbeitens an deutschen Universitäten. Wenn Sie weltweit Experten suchen, etwa im Bereich der Anisotropie der anomalen Dispersion, für Fragen der chemischen Bindung in Mineralen und

Kristallen, für die Bestimmung der Kationenverteilung in Silikaten mit Anwendung als „Geo-Speedometer“, für kristallographische Hochdruck-Hochtemperaturexperimente oder auch die zerstörungsfreie Untersuchung wertvoller archäologischer Funde – sie werden immer wieder auf den Namen Armin Kirfel stoßen.

Für mich zu den schönsten Arbeiten Armin Kirlfels gehören die Bestimmungen von Elektronendichten mit hochenergetischer Röntgenstrahlung. Quasi extinktions- und absorptionsfrei gemessene Datensätze, die im besten Sinne akribisch ausgewertet, tiefe und detailreiche Einblicke in die Natur chemischer Bindung im geordneten Zustand der Materie erlauben. Dies gehört zum Besten, was die Kristallographie leisten kann und ist ein Aushängeschild für unser Fach; eine perfekte Verknüpfung des Methodischen mit profundem kristallographischen Fachwissen – und all das mündet dann noch sozusagen nebenbei in wunderschöne Elektronendichtekarten voll des ästhetischen Reizes. *„Wahrheit und Schönheit sind unzertrennliche Geschwister, Lieblingskinder der schaffenden Natur. Als drittes erscheint das Gefühl des Glücks.“*

Diese zwölfte Regel Goldschmidts trifft es hier voll und ganz. Auch dieses Glück des erforschen Könnens und Dürfens, war auf Armin Kirlfels Gesicht immer wieder zu sehen, wenn er nach Beendigung der Denkklausur aus seinem Zimmer kam, weißer Rauch von der Zigarettenspitze aufsteigend, und in das Büro der Doktoranden stürzte, um seine brandneuen Erkenntnisse zu diskutieren. Seine Frage: *„Wat löbt, meine Herren?“* war am Mineralogischen Institut der Universität Würzburg oftmals der Auftakt zu stundenlangen Diskussionen über die bearbeiteten kristallographischen Probleme. Aber auch am späten Freitagnachmittag bei einem Schoppen Wein der Auftakt zum Gedankenaustausch über Gott und die Welt. Und spätestens am frühen Montagmorgen stand er wieder „auf der Matte“ mit seiner Frage: *„Wat löbt?“* – nicht immer zur Erheiterung der Mitarbeiter, die fleißig und guten Willens waren, aber irgendwie einmal darauf gestoßen sind, das zwischen dem *„Wat löbt“* des Freitags und dem *„Wat löbt“* des Montags eigentlich ein Wochenende liegen sollte.

Armin Kirlfels gelebte Freude an der Foschung war immer so spürbar, dass ich sie gerne als Triebfeder, als Motivation und Ansporn für alle Mitarbeiter bezeichnen möchte, die mit Armin Kirfel jemals zusammengearbeitet haben. So wie Armin Kirfel das Forschen vorgelebt hat, so hat er auch stets ein Vorbild als Hochschullehrer gegeben. Ich kann hier am Besten wieder aus Sicht der Würzburger Zeit loben, habe ich diese doch miterlebt.

Armin Kirfel hat in Würzburg direkt nach seiner Berufung begonnen, die Kristallographie als Fach fest im Vorlesungszyklus des Fachbereichs Geowissenschaften zu verankern und selber in unermüdlicher Lehrtätigkeit in Vorlesungen und Praktika die Anziehungskraft der Kristallographie auf die Studierenden – auch interdisziplinär – gestärkt und so ein anregendes „kristallographisches Leben innerhalb der Geowissenschaften“ ermöglicht und gefördert. Er war als Kollege und Lehrer immer Vorbild, jederzeit ansprechbar und sein fachlicher Rat geschätzt und von hohem Wert. Sein integratives, bescheidenes Wesen führte zu einer großen Akzeptanz der Kristallographie innerhalb der Fakultät und anderen Fachbereichen wie der Physik, der Chemie und der Archäologie.

Diese fächerübergreifende Akzeptanz mag nicht zuletzt seinem ruhigen, besonnenen und unprätentiösen Wesen geschuldet sein. Durch seine Beliebtheit unter Kollegen und Studenten hat er sich auch als Förderer eines Wesenskerns der Kristallographie hervorgetan, der für uns heute umso überlebenswichtiger ist: Ihrer fächerübergreifenden Nützlichkeit und Relevanz.

Hier soll es nun genug sein mit den harten Fakten, die auch zum Loben gehören: Der Anzahl der Publikationen, der Nennung von Preisen und Ehrungen, der Mitgliedschaften in wissenschaftlichen Vereinigungen, Armin Kirfels Engagement in Kommissionen und sein unermüdlicher Einsatz für die Großforschung z. B. in Hamburg und am ISIS und und und...

All diese Fakten und Grundvoraussetzungen für den Erhalt einer so hohen Auszeichnung sind gegeben, von Freunden zusammengetragen und dokumentiert worden und wurden auf Herz und Nieren durch das hochgeschätzte, ehrenwerte Preiskomitee geprüft und für gut befunden. Wenn Sie noch mehr über Armin Kirfels Forschungen wissen möchten, konsultieren sie die einschlägige Fachliteratur – unter seinem Namen werden sie fündig – garantiert!

Ich möchte nun das etwas verlängerte Ende meiner Laudatio mit der vierzehnten und letzten Arbeitsregel auf Victor Goldschmidts Liste einleiten: „*Finire aude – wage abzuschließen*“.

Goldschmidts Regel bezieht sich wohl darauf, Forschung zu Ende zu bringen, zumindest zu einem abgerundeten Teilergebnis, falls zunächst keine vollständige Klärung der Fragen erzielt werden kann und diese Ergebnisse dann zu publizieren. Die Anzahl der Publikationen Armin Kirfels zeigt, dass er auch hier mit Goldschmidt übereinstimmt.

Leider haben aber maßgebliche ministerielle und universitäre Kreise in Bonn in Unkenntnis des Lateinischen oder durch willentliche Fehlübersetzung aus dem „wage abzuschließen“ ein „wage zuzuschließen“ gemacht und zeitgleich mit der Emeritierung unseres diesjährigen Preisträgers erneut einen traditionsreichen und wissenschaftlich äußerst fruchtbaren Standort kristallographischer Forschung in Deutschland geschlossen. Ein Wagnis – im Sinne des wage abzuschließen – für die Verantwortlichen war es eher nicht, ist doch die Mehrzahl der Naturwissenschaftler von friedlicher Natur. So blieb es auch bei dieser Institutsschließung bei schriftlichen Noten und Petitionen dagegen; wie gewohnt ohne Wirkung auf die Verantwortlichen solcher Destruktionen.

Angesichts dieser Entwicklung, drängt sich mir das Bild auf, unseren lieben Kollegen Kirfel nach Bekanntwerden des Schließungsplanes in Bonn ein wenig als Sisyphos vorzustellen. Immer wieder den schönen und für viele andere naturwissenschaftliche Disziplinen äußerst wertvollen Kristall der Forschung den Hang der Erkenntnis hinauf zu rollen, in dem sicheren Wissen, dass dieser Kristall bald schon zum letzten Mal hinabrollen wird ins tiefe Jammertal der Einsparungen.

Ich hoffe sehr für Armin Kirfel, dass er im besten Sinne ein camusscher Sisyphos ist, letztlich glücklich; glücklich über die Teilhabe an einem wunderbaren Beruf und zufrieden mit dem Geleisteten. Ihm ist sicher kein Beitrag zu dieser Schließung anzulasten. Im Gegenteil: Bei diesem Prozess der Schließung des Lehrstuhls alle Mitarbeiter motiviert mitzunehmen und in diesen Zeiten des Personalabbaus und massiv reduzierter Infrastruktur solch hervorragende Forschungsergebnisse zu erarbeiten, wie er es in Bonn getan hat, ist mehr als der Nachweis, dass Armin Kirfel alle Eigenschaften eines sehr guten Hochschullehrers in sich vereint – in der Summe ergeben alle diese Eigenschaften das gelebte Vorbild.

Was kann man mehr verlangen? Und auch, dass Armin Kirfel spätestens jetzt, ob solchen Lobes innerlich aufstöhnen würde und denken: „*Mein Gott, Hock, jetzt lass' man gut sein*“ zeigt sein Naturell. Er ist ein Mann, dem der „repräsentative Auftritt“ oder das „Streben nach Publizität“ ferne liegt – uneitel bis in den Kern. Er hat immer seine Zeit lieber hochwertiger Lehre, exzellenter Forschung und der geschliffenen Darstellung seiner Ergebnisse gewidmet.

Schade nur, lieber Armin Kirfel und liebe Anwesende, dass die Kristallographie forschungspolitisch wohl nicht als systemrelevant angesehen wird. Sonst könnten wir auf ein paar dicke Tropfen des gerade herniedergehenden Geldmonsuns hoffen, die es manchem Lehrstuhl erlauben würden, Teile ihrer Grundausstattung aus der Zeit des Namensgebers der heute verliehenen Medaille gegen zeitgemäße Technik auszutauschen. Vielleicht täte es ja auch schon eine Abwrackprämie für allzu betagte Diffraktometer.

Sicher ist eines: Zum Ankurbeln einer schwächelnden Wirtschaft durch Konjunkturprogramme dienen verrottete Schultoiletten und undichte Universitätsdächer allemal. Eine für Krisenzeiten stets vorgehaltene, kräftig herunter gekommene Infrastruktur im Bildungssektor kann somit immerhin zur Abpufferung von binnenländischen Wirtschaftsschwächen im Gefolge von globalen Finanzkrisen dienen. Was wollen wir mehr?

Doch stört diese Frage nur den freudigen Anlass des feierlichen Aktes dieser Preisverleihung und ich komme nun wirklich zum Ende. Armin Kirfel ist nach meiner Einschätzung ein „leiser Haudegen“, ein Mann der das Richtige besonnen, aber mit entschlossener Kraft tut. Und so wird er auch das Unabänderliche verkraften und sich hoffentlich nun nach seiner Emeritierung nicht gänzlich aus der Forschung zurückziehen, soweit es seine Gesundheit zulässt. Viel ginge sonst der Kristallographie in Deutschland zu früh verloren.

Ich möchte Armin Kirfel nun aus dem Welfenschloss im Namen aller anwesenden Kolleginnen und Kollegen zur Ehrung mit der Carl-Hermann-Medaille herzlich gratulieren und ihm gleichzeitig die allerbesten Genesungswünsche senden. Wir hoffen demnächst wieder von Ihnen zu hören, lieber Armin Kirfel! Damit es auch wieder heißt: „*Wat löbt?*“

Rainer Hock, Erlangen

# FEIERLICHE ÜBERGABE DER CARL- HERMANN-MEDAILLE AN PROF. DR. ARMIN KIRFEL

Anlässlich der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie wurde Herr Prof. Dr. Armin Kirfel (Bonn) mit der Carl-Hermann-Medaille für sein wissenschaftliches Lebenswerk ausgezeichnet. Leider konnte Herr Kirfel an der Festveranstaltung in Hannover nicht teilnehmen, so dass die Übergabe auf einen späteren Zeitpunkt verschoben wurde.

Am 7. Mai 2009 trafen sich in den Räumen der Kristallographie der Humboldt-Universität in Berlin-Adlershof Freunde und Weggefährten zur feierlichen Übergabe. Der Runde gehörten neben Armin Kirfel und Gattin, Leonore Wiehl als Vorsitzende des Preiskomitees, Rainer Hock (Laudator), Karl Fischer (Ehrenmitglied der DGK, Lehrer von A. Kirfel), Wolfgang Neumann (Stellvertretender Vorsitzender der DGK) und Holm Kirmse (ehemaliger Schriftführer der DGK) an.

Der Preisträger verließ seiner tiefen Rührung Ausdruck und bedankte sich für die hohe Ehrung. In der anschließenden geselligen Runde um den originalen Will-Kleber-Tisch, an dem bis heute die Studenten ihre Prüfungen ablegen, wurde sowohl auf die vergangenen Zeiten als auch – mit etwas Sorge – in die Zukunft der Kristallographie geblickt.

H. Kirmse, Berlin



*Glückwunsch an den für sein Lebenswerk ausgezeichneten A. Kirfel (rechts).*



*Feierliche Verlesung des Textes der Urkunde durch L. Wiehl.*



*Die Teilnehmer der feierlichen Übergabe der Carl-Herrmann-Medaille an Prof. Dr. Armin Kirfel; von links nach rechts: Rainer Hock, Karl Fischer, Armin Kirfel, Leonore Wiehl, Wolfgang Neumann. Fotos: H. Kirmse.*



LAUDATIO AUF DEN  
MAX-VON-LAUE-PREISTRÄGER 2009  
DR. JOHAN HATTNE

Sehr geehrter Herr Vorsitzender, sehr geehrte Damen und Herren, liebe Kollegen,

es ist eine große Ehre für mich, heute Abend hier zu stehen und den Max-von-Laue-Preisträger 2009, Dr. Johan Hattne, vorzustellen. Lieber wäre es mir allerdings gewesen, bei Ihnen im Publikum sitzen zu können und Prof. Sine Larsen, der Präsidentin der IUCr, zuzuhören. Ich hatte Frau Larsen gebeten, die Laudatio für Herrn Hattne zu halten, und sie wollte auch erst kommen, konnte das dann aber aufgrund von Termenschwierigkeiten doch nicht einrichten. Allerdings hat sie mir gestern Abend noch ein paar Zeilen geschickt und mich gebeten, diese an ihrer statt zu verlesen:

A few lines for the 17<sup>th</sup> meeting of the DGK and Johan Hattne's reception of the 2009 Laue award.

The "Deutsche Gesellschaft für Kristallographie" is with its more than 1,000 members the largest organization of its kind in Europe. Crystallography has strong traditions in Germany. One may even say that crystallography was "invented" in Germany with Max von Laue's famous experiment in 1912. Among the crystallographic societies in Europe, the German DGK is the only one that needs a four-days meeting with three parallel microsposium sessions to present all the achievements in crystallographic research in Germany. This richness of crystallographic research in Germany is clearly reflected in the programme for this 17<sup>th</sup> national meeting. In writing these lines I took the time to study the programme more closely and it is a pleasure to see that it has been possible to maintain the strong scientific traditions in crystallography and at the same time embark into the new scientific areas that have so much enlarged and enriched the crystallographic community. Just to mention: The use of neutrons and synchrotron radiation, and very importantly also the developments in structural biology.

I hope once to get the opportunity to attend a DGK annual meeting. During this year's meeting I am unfortunately giving lectures at a Hercules course, teaching crystallography to young scientists that will be the coming users of the European synchrotrons and neutron facilities.

There is another more personal reason in addition to the excellent and attractive scientific programme of the 17<sup>th</sup> DGK meeting for my wish to attend this year's meeting. It would have given me the opportunity to be present at the ceremony when the DGK's Max-von-Laue prize 2009 is awarded to Johan Hattne for the outstanding work he did during his Ph.D. thesis. I was very happy when I learned that this year's award has been given to Johan.

Johan did his Ph.D. work at the EMBL outstation in Hamburg under the supervision of Dr. Victor Lamzin. Johan is of Swedish nationality, but he moved to Germany when he was only 3 years old. He returned to Sweden about 10 years later and via Kingston (in Ontario, Canada – not Jamaica) and Halmstad at the Swedish West Coast he made it to Uppsala and joined the relatively recently conceived engineering program for molecular biotechnology. At

some point he realized that he had two left hands and that he should leave the work in the laboratory to better skilled people. He turned himself towards computers and after another detour via Montreal (Canada) obtained his M.Sc. in biotechnology engineering and a M.Sc. in computer science. After that he moved to Hamburg to pursue his Ph.D. at the European Molecular Biology Laboratory EMBL. Since EMBL has collaboration contracts with a number of European Universities, EMBL Ph.D. students have the possibility to get their Ph.D. degree from a University close to their home country. One of the Universities that have a collaboration contract with EMBL is the University of Copenhagen, and this is how I came into the picture as Johan Hattne's University supervisor. Johan's Ph.D. thesis entitled "Pattern recognition and automated modeling of polynucleotides in macromolecular crystallography" was defended successfully at Copenhagen University on the 2<sup>nd</sup> October 2008.

To give some perspective of the significance of Johan's thesis it is necessary to provide a little bit of background of his research:

The knowledge of structure at the atomic level can help tremendously in the elucidation of the molecular function of biological macromolecules and their complexes. Over the years, X-ray crystallography has become the most common technique for the determination of accurate and highly detailed three-dimensional structures of proteins. While many of the steps from processing the raw experimental data to interpreting the electron density are automated in sophisticated software suites, nucleic acids still pose a challenge even to the experienced crystallographer. For example, although the double-stranded B-DNA helix is the most abundant structural unit in nucleic acids, very diverse and complicated folds can occur in DNA and, particularly, in RNA.

Johan Hattne has developed a novel pattern-recognition-based procedure for the automated location and modeling of DNA and RNA molecules in crystallographic electron-density maps. The main tools he has employed in this work are rotation-invariant moments, computed from local regions of electron density. A combination of a number of such numerical features allows the efficient location of candidate nucleobase or phosphate fragments. Combining the backbone structure with the located nucleobases yields fairly complete atomic models of the nucleic acids. This was demonstrated strikingly and convincingly on the structure of the 30S ribosomal subunit at 3.1 Å resolution, where the method produced about 80 % of the nucleic acid backbone structure in just one hour of computer time. One hour compared to several months that were required to build the model manually only a few years back. Johan's developments present a tremendous advancement and they can and must be expected to contribute significantly to the throughput aims of modern structural biology.

Übrigens, Johan hat auch ein Poster (B11) hier auf der Tagung und ist sicherlich bereit, jedem Interessenten mehr über seine Arbeiten zu erzählen. Jetzt allerdings erst einmal zurück zu Sine's Brief...

Let me also make some personal comments:

It has been a great pleasure to follow the progress and development of Johan Hattne's research during his Ph.D. study and to witness the completion of his thesis, which is an example of a successful scientific collaboration in Europe. A young engineer from Sweden carries out research in a European institution in Germany and obtains a degree from Denmark. This clearly shows the international nature of our science that we have to nurture at both the

national and international levels. Let me conclude by congratulating Johan Hattne for receiving this prestigious award and by sending my best wishes to all the participants of the 17<sup>th</sup> DGK meeting for a continued successful and scientifically fruitful meeting.

Sine Larsen, President of the International Union of Crystallography

Ich kann und möchte den Worten von Frau Larsen nichts weiter hinzufügen. Aber vielleicht erlauben Sie mir noch eine kleine Nachbemerkung. Johan hat mir mal erzählt, dass er gerne Kampfflieger geworden wäre. Dieser Kindheitstraum wurde durch einen Augenarzt jäh beendet, als dieser Johan seine erste Brille verschrieb. Ich denke, auch dieser Augenarzt verdient unseren Dank. Nämlich dafür, dass er Johan vor einer Karriere als Kampfpilot bewahrt hat und ihn uns damit für die Wissenschaft erhalten hat.

Manfred S. Weiss, Hamburg



# AUSZEICHNUNG FÜR PROF. DR. SERGEY VLADIMIROVICH KRIVOVICHEV



Prof. Dr. Sergey Vladimirovich Krivovichev (Department of Crystallography, State University Saint Petersburg, Russia) hat vom Russischen Präsidenten einen „2008 Russian Federation President Prize in Science and Innovation for Young Scientists“ verliehen bekommen. Prof. Krivovichev war 2002–2003 Alexander von Humboldt-Stipendiat in der Arbeitsgruppe von Prof. W. Depmeier (Kristallographie, Institut für Geowissenschaften, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel) und ist gegenwärtig Partner in einer Alexander von Humboldt-Institutskooperation mit Prof. U. Bismayer (Hamburg), Prof. Th. Schleid (Stuttgart) und Prof. W. Depmeier (Kiel).

## **Pressemitteilung vom 09.02.09:**

The award ceremony, timed to coincide with Russian Science Day, took place in the Kremlin's Catherine Hall. Dmitry Medvedev congratulated the laureates on their achievements and presented them with medals, diplomas, and the accompanying certificates.

In his remarks at the ceremony, the President noted the importance of incentives and prizes and announced that he has signed a decree increasing the Presidential Grants for young scientists. The decree will increase the grant for a Ph.D. degree holder to 600,000 roubles (around \$ 16,000) and for a D.Sc. degree holder to one million roubles (around \$ 28,000), Mr. Medvedev said, expressing the hope that the increases would give an important boost to raising the level of research.

Mr. Medvedev signed the Decree “On the Russian Federation President Prize in Science and Innovation for Young Scientists” in July 2008. The decree established a prize that is awarded to citizens of Russia for their important contribution to developing Russian science and their innovative work. The prize aims to encourage further research and create good conditions for new scientific discoveries and innovative achievements.



ANKÜNDIGUNGEN:



# EUROPEAN POWDER DIFFRACTION CONFERENCE – EPDIC 12

27. BIS 30. AUGUST 2010

und

# EUROPEAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING – ECM 26

29. AUGUST BIS 2. SEPTEMBER 2010

**Veranstalter:** European Crystallographic Association ECA  
EPDIC-Komitee  
Technische Universität Darmstadt

Im nächsten Jahr werden die europäischen Kristallographie-Tagungen EPDIC und ECM im neuen Wissenschafts- und Kongresszentrum „Darmstadtium“ (Element 110, entdeckt bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung GSI) stattfinden. Die Jahrestagung unserer Gesellschaft entfällt daher. Die Mitgliederversammlung der DGK wird integriert. Es ist seit vielen Jahren das erste Mal, dass sich EPDIC und ECM an einem Ort treffen. Gegenwärtig wird das wissenschaftliche Programm zusammengestellt. Für die EPDIC ist das entsprechende Komitee zuständig, für die ECM besteht das Programmkomitee aus den Vorsitzenden der „Special Interest Groups“ (SIG) und einigen Mitgliedern des „Executive Committee“ und DGK-Vertretern für die fünf „Focus Areas“. Die Tagungen sind nach den üblichen Vorgaben (Keynote bzw. Plenary Lecture, Microsymposia, Poster) gegliedert.

Die EPDIC-Tagung wird am Freitag, den 27. August 2010 am frühen Abend beginnen, die Eröffnung der ECM 26 ist für Sonntag, den 29. August geplant. Am 30. August werden beide Veranstaltungen parallel laufen. Die Ausstellung wissenschaftlicher Geräte ist beiden Tagungen gemein. Darmstadt zeichnet sich durch seine Nähe zum Rhein-Main-Flughafen aus, ist aber auch per Bahn oder Auto gut zu erreichen. Lohnenswert ist ein Besuch des Jugendstilensembles „Mathildenhöhe“. Die Tagungsgebühren sind noch nicht endgültig festgelegt, werden sich aber im üblichen Rahmen der beiden Tagungen halten. Für Teilnehmer an beiden wird es Ermäßigungen geben. Auch einige Workshops (bisher Hochdruck, PDF-Methoden, Mathematische Kristallographie) sind vorgesehen. Ich hoffe, viele DGK Mitglieder nächstes Jahr in Darmstadt (wieder)zusehen.

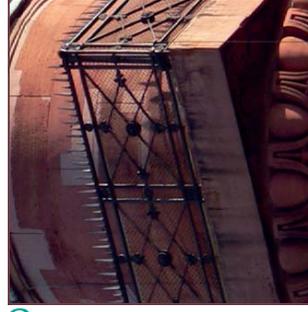
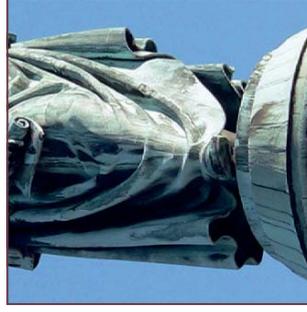
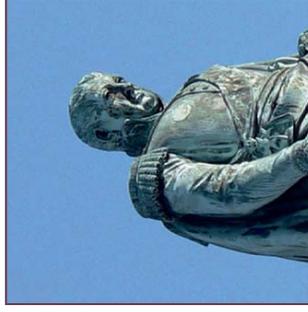
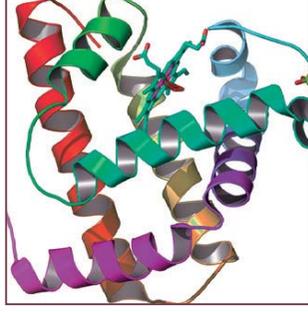
Hartmut Fuess, Darmstadt  
hfuess@tu-darmstadt.de

26th European

Crystallographic Meeting

29 August–2 September 2010

Darmstadt, Germany

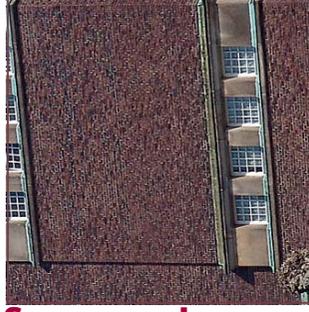
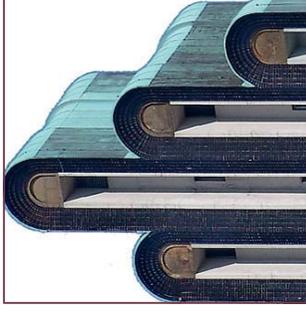
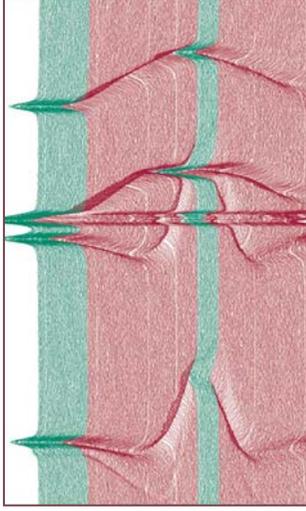


Quelle: [www.darmstadtium.de](http://www.darmstadtium.de)

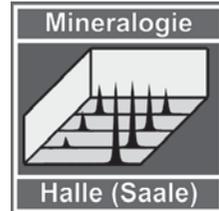
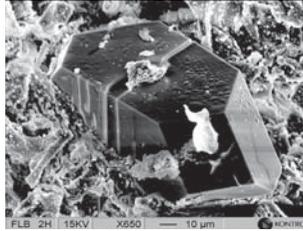
12<sup>th</sup> **E**uropean  
**P**owder **D**iffraction **C**onference  
27-30 August 2010  
Darmstadt, Germany



Darmstadt 2010



www.epdic12.org



## **9. Hallesche Diskussions- und Arbeitstagung Mineralogische und Technische Kristallographie am Institut für Geowissenschaften/Mineralogie- Geochemie**

Von-Seckendorff-Platz 3, 06120 Halle (Saale)  
gemeinsam mit dem Arbeitskreis 15 der  
Deutschen Gesellschaft für Kristallographie

am  
Montag 15. März 2010

Thema:  
Kristalline und amorphe Materialien –  
Vom Labor zur Anwendung

**Beginn:** 10:00 Uhr

**Anmeldung:**

Prof. Dr. Herbert Pöllmann – [herbert.poellmann@geo.uni-halle.de](mailto:herbert.poellmann@geo.uni-halle.de)

Dr. Stefan Stöber – [stefan.stoeber@geo.uni-halle.de](mailto:stefan.stoeber@geo.uni-halle.de)

Dr. Thomas Witzke – [thomas.witzke@geo.uni-halle.de](mailto:thomas.witzke@geo.uni-halle.de)



ANKÜNDIGUNG EINER  
ARBEITSKREISTAGUNG DES AK 11  
HOCHAUFLÖSENDE  
RÖNTGENSTREUUNG UND  
SYNCHROTRONSTRAHLUNG

Liebe Mitglieder des ehemaligen AK 8 und des AK 11,

in der vorlesungsfreien Zeit im Februar/März 2010 soll ein zweitägiges Treffen des AK 11 an der TU Bergakademie Freiberg abgehalten werden. Dazu wollen wir zum einen über moderne Methoden aber auch über die neuen Synchrotronstrahlungsquellen einschließlich des XFEL Vorträge hören und Diskussionen führen. Das Tagungsprogramm wird gemeinsam von Prof. Dr. Dirk C. Meyer (TU Bergakademie Freiberg) und Dr. Carsten Paulmann (Universität Hamburg, HASYLAB/DESY) zusammengestellt werden. Der genaue Veranstaltungstermin wird noch festgelegt und auf der Homepage der DGK veröffentlicht.

Die Anmeldung von Vorträgen sowie die Anzeige des Teilnahmeinteresses kann erfolgen an:

- Dirk C. Meyer, [dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de](mailto:dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de), Tel.: 03731/39-2860
- Carsten Paulmann, [carsten.paulmann@desy.de](mailto:carsten.paulmann@desy.de), Tel.: 040/8998-2601

In Freiberg bietet sich unter anderem ein Besuch der Mineraliensammlung „Terra Mineralia“ oder eine Einfahrt in ein Besucherbergwerk an. Wir würden uns über eine rege Teilnahme freuen.

Dirk Meyer, Freiberg



# RÖNTGENLABOR Dr. M. Ermrich

## Röntgendiffraktometrie – Röntgenfluoreszenzanalyse

Am Kandelborn 7, D - 64354 Reinheim / b. Darmstadt

Email: roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de

<http://www.roentgenlabor-ermrich.de>

Fax: (+49) 6162 - 939 824

Tel.: (+49) 6162 - 837 56

### Auftragsanalytik / Forschung / Projektarbeit

Reflexion / Transmission / Hochtemperatur / Dünne Schichten ...

### Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor

Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

### Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

Seminar „Röntgendiffraktometrie“ über die TAW Wuppertal / 2x im Jahr

### Ansprechpartner und Vertrieb der Programme

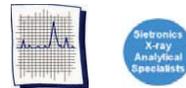


crystallographica search/match  
OxfordCryosystems



Oxford, United Kingdom

SiroQuant  
Sietronics Pty Ltd.



Canberra, Australia

#### CSD crystallographica

**Das** Werkzeug für Lehre & Forschung  
in der Kristallographie.

Von der Kristallansicht bis zum simultan  
modifizierbaren Beugungsdiagramm.

#### CSM search/match

**Das** Werkzeug für die qualitative  
Phasenanalyse.

- am Rohdaten- Diagramm ohne Peaksuche  
- mit in-situ Pulverdiagrammsimulation  
Alle Datenformate.

#### SiroQuant- Rietveld

**Das** Werkzeug zur quantitativen  
Phasenanalyse mit der Rietveldmethode.

Wachsende Datenbank > 1000 Phasen.  
Bestimmung des amorphen Anteils.  
Alle Datenformate.

Fragen Sie nach dem upgrade 3.0 !

## TAGUNGEN UND TERMINE

04. – 07.10.2009 **„16<sup>th</sup> Larson Workshop Association for Crystallization Technology“ in Ames (USA)**  
Kontakt: Dennis Vigil (vigil@iastate.edu)  
<http://www.ucs.iastate.edu/mnet/crystallization/about.html>
05. – 07.10.2009 **„SKIN2009 – Studying Kinetics with neutrons“, Institut Laue-Langevin, Grenoble (Frankreich)**  
Kontakt: Karine Sultan (skin2009@ill.eu)  
<http://www.ill.eu/news-events/workshops-events/skin2009>  
Deadlines: Abstracts bis 01.06.2009  
Registrierung bis 01.09.2009
05. – 08.10.2009 **JCNS Workshop „Trends and Perspectives in Neutron Scattering on Soft Matter“ in Tutzing**  
Kontakt: Dr. Thomas Gutberlet (jcns-workshop@fz-juelich.de)  
[http://www.jcns.info/Workshop\\_Softmatter](http://www.jcns.info/Workshop_Softmatter)  
Deadlines: Abstracts bis 15.06.2009  
Registrierung bis 15.06.2009 bzw. 31.07.2009
07. – 08.10.2009 **„Herstellung und Charakterisierung von massiven Verbindungshalbleitern“ in Freiberg**  
Kontakt: [http://www.dgkk.de/ak9/einladung\\_anmeld.pdf](http://www.dgkk.de/ak9/einladung_anmeld.pdf)  
Deadlines: Registrierung bis 21.09.2009
12. – 13.10.2009 **Joint Users' Meeting SLS, SINQ and SμS (JUM@Pb 09) im PSI (Paul Scherrer Institut) Villingen (Schweiz)**  
Kontakt: PSI User Office (slsuo@psi.ch)  
<http://user.web.psi.ch/jump09>  
Deadlines: Abstracts bis 15.07.2009/ 15.09.2009  
Registrierung bis 15.09.2009
13. – 15.10.2009 **„Specimen Preparation for X-ray Fluorescence“ Workshop in Newtown Square (USA)**  
Kontakt: Leah Mooney (clinics@icdd.com)  
<http://www.icdd.com/education/spec-xrf-workshop.htm>
18. – 23.10.2009 **„8<sup>th</sup> International Conference on Nitride Semiconductors“**  
Kontakt: <http://icns8.org/>  
Deadlines: Abstracts bis 31.05.2009  
Registrierung bis 28.09.2009

19. – 20.10.2009 **„20<sup>th</sup> Annual International Light Scattering Colloquium“ in Santa Barbara (USA)**  
 Kontakt: Lindsey McGowan (lmcgowan@wyatt.com)  
<http://www.wyatt.com/events/colloquium>
19. – 21.10.09 **„Basic Rietveld Refinement and Indexing“ Workshop in Newtown Square (USA)**  
 Kontakt: Leah Mooney (clinics@icdd.com)  
<http://www.icdd.com/education/rietveld-workshop.htm>
22. – 23.10.2009 **„Advanced Rietveld Refinement and Indexing“ Workshop in Newtown Square (USA)**  
 Kontakt: Leah Mooney (clinics@icdd.com)  
<http://www.icdd.com/education/rietveld-workshop.htm>
26. – 28.10.2009 **„8<sup>th</sup> Polymorphism and Crystallization Scientific Forum“ in Philadelphia (USA)**  
 Kontakt: <http://www.polymorphismforum.com>
27. – 29.10.2009 **„L.A.B. Exhibition and Conference“ in Birmingham (Großbritannien)**  
 Kontakt: [info@lab-uk.co.uk](mailto:info@lab-uk.co.uk), <http://www.lab-uk.co.uk>
28. – 29.10.2009 **„International workshop for the Materials Imaging and Dynamics Instrument at the XFEL“ in Grenoble (Frankreich)**  
 Kontakt: Anders Madsen (amadsen@esrf.fr)  
<https://indico.desy.de/confRegistrationFormDisplay.py?confId=2058>  
 Deadlines: Registrierung bis 19.10.2009
28. – 30.10.2009 **„International Workshop on the Analysis and Refinement of the Electron Density“ in Marrakesch (Marokko)**  
 Kontakt: Prof. Nouzha Bouhaida (nouzha@ucam.ac.ma)  
<http://www.ucam.ac.ma/fssm/adrx>  
 Deadline: Registrierung bis 15.07.2009
28. – 31.10.2009 **„67<sup>th</sup> Annual Pittsburgh Diffraction Conference“ in Georgia (USA)**  
 Kontakt: [http://www.pittdifsoc.org/PDC\\_2009](http://www.pittdifsoc.org/PDC_2009)  
 Deadlines: Abstracts bis 16.10.2009

02. – 04.11.2009 **„22<sup>nd</sup> MAX-lab Annual User Meeting“ in Lund (Schweden)**  
 Kontakt: Stefan Wiklund (stefan.wiklund@maxlab.lu.se)  
<http://www.maxlab.lu.se/usermeeting/index.html>
- 05.11.2009 **„Impact of Crystallography in an Industrial Environment“ (BCA Group) in St Helens (Großbritannien)**  
 Kontakt: Mark Farnworth (mark.farnworth@pilkington.com)  
<http://ig.crystallography.org.uk/meet09am.htm>
04. – 05.11.2009 **„Workshop on Neutron Spin Echo Spectroscopy“ in Oak Ridge (USA)**  
 Kontakt: Pamela Haythorn (haythornpt@ornl.gov)  
 Michael Ohl (m.ohl@fz-juelich.de)  
<http://neutrons.ornl.gov/conf/NSE2009/index.shtml>  
**Deadlines: Abstracts bis 21.09.2009**  
**Registrierung bis 14.10.2009**
05. – 06.11.2009 **„Zeit- und temperaturlaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie (XI) In-situ Untersuchungen“ Workshop in Pfinztal**  
 Kontakt: Dr. Paul Bernd Kempa  
 (paul-bernd.kempa@ict.fraunhofer.de)  
<http://www.ict.fraunhofer.de/VuM/Veranstaltungen>  
 Deadlines: Abstracts bis 15.08.2009  
 Registrierung bis 31.10.2009
05. – 08.11.2009 **13. Physikerinnentagung in Frankfurt am Main**  
 Kontakt: Eva Katharina Rafeld (info@physikerinnentagung.de)  
<http://www.physikerinnentagung.de>  
 Deadlines: Abstracts bis 14.09.2009  
 Registrierung bis 02.11.2009
10. – 11.11.2009 **„PETRA III Extension Workshop“ in Hamburg**  
 Kontakt: <http://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=2208>
10. – 12.11.2009 **„5<sup>th</sup> International Conference on Mechanical Stress Evaluation by Neutrons and Synchrotron Radiation (MECA SENS V/QuBS2009)“ in Mito (Japan)**  
 Kontakt: mecasens-5@jaea.go.jp  
<http://nsrc.jaea.go.jp/mecasens-5>  
 Deadlines: Abstracts bis 30.06.2009  
 Registrierung bis 31.07.2009 bzw. 30.09.2009

11. – 13.11.2009 **„International School for Young Scientists Advanced Research in photon sciences – Experimental capabilities of the European XFEL“ Moskau (Russland)**
- Kontakt: I.P. Makarov (secr@ns.crys.ras.ru)  
<https://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=2165>
- Deadlines: Registrierung bis 06.11.2009
16. – 20.11.2009 **„HSC11: Application of neutron and synchrotron radiation to magnetism“ in Grenoble (Frankreich)**
- Kontakt: Nick Brookes (hsc@esrf.fr)  
<http://www.esrf.eu/events/conferences/HSC/HSC11>
- Deadlines: Registrierung bis 24.08.2009
26. – 28.11.2009 **Workshop: „Trends in Cold Neutron Time-of-Flight Spectroscopy“ (TiCN-ToF) in Grenoble (Frankreich)**
- Kontakt: Jacques Ollivier (ticntof@ill.eu)  
<http://www.ill.eu/news-events/workshops-events/ticntof/>
- Deadlines: Abstracts bis 18.10.2009  
 Registrierung bis 06.11.2009
- 30.11. – 04.12.2009 **„MRS Fall Meeting 2009: X-Ray Scattering Methods for Characterisation of Advanced Materials Workshop“ in Boston (USA)**
- Kontakt: [http://www.mrs.org/s\\_mrs/sec.asp?CID=24276&DID=250395](http://www.mrs.org/s_mrs/sec.asp?CID=24276&DID=250395)
03. – 04.12.09 **Seminar „Röntgendiffraktometrie“ in Altdorf bei Nürnberg**
- Kontakt: Dr. M. Ermrich (roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de)  
<http://www.taw.de>
07. – 09.12.2009 **„Neutron Scattering Symposium (AINSE/ANBUG)“ in Lucas Heights (Sydney, Australien)**
- Kontakt: ainese@ansto.gov.au, <http://www.ainse.edu.au/ainse.html>
09. – 11.12.2009 **„FXE workshop 2009“ in Budapest (Ungarn)**
- Kontakt: Imke Gembalies (imke.gembalies@xfel.eu)  
<https://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=2197>
- Deadlines: Registrierung bis 01.11.2009
10. – 15.01.2010 **„8<sup>th</sup> NCCR Practical Course in Biomolecular Modelling“ in Kandersteg (Schweiz)**
- Kontakt: Dr. Patrick Sticher (sticher@bioc.uzh.ch)  
<http://www.structuralbiology.uzh.ch/course2010.asp>

20. – 21.01.2010 **„SOLEIL Users’ Meeting“ in Palaiseau (Frankreich)**
- Kontakt: Sylvie Pavan (SUM10@synchrotron-soleil.fr)  
<http://www.synchrotron-soleil.fr/Soleil/ToutesActualites/Workshops/2010/SUM10>
- Deadline: Abstracts bis 07.12.2009
27. – 29.01.2010 **„International Workshop on Single-Crystal Diffraction with Polarised Neutrons“ (Flipper 2010) in Grenoble (Frankreich)**
- Kontakt: flipper@ill.eu  
<http://www.ill.eu/news-events/workshops-events/flipper-2010>
- Deadlines: Abstracts bis 30.11.2009  
 Registrierung bis 30.11.2009
15. – 18.02.2010 **„The meetings of Biology and Synchrotron Radiation (BSR) and Medical Applications of Synchrotron Radiation (MASR)“ in Melbourne (Australien)**
- Kontakt: <http://www.masr2010.org/>
- Deadlines: Abstracts bis 30.10.2009  
 Registrierung bis 27.11.2009
24. – 26.02.2010 **SNI 2010 in Berlin**
- Kontakt: Dr. Christine Titel (sni2010@congressa.de)  
[http://www.helmholtz-berlin.de/events/sni2010/index\\_de.html](http://www.helmholtz-berlin.de/events/sni2010/index_de.html)
- Deadlines: Abstracts bis 15.10.2009  
 Registrierung bis 15.11.2009
08. – 12.03.2010 **„19<sup>th</sup> Meeting of the International Collaboration on Advanced Neutron Sources“ (ICANS-XIX) in Grindelwald (Schweiz)**
- Kontakt: **Werner Wagner** (werner.wagner@psi.ch)  
<http://icans.web.psi.ch>
- Deadlines: Abstracts bis 21.09.2009  
 Registrierung bis 20.11.2009
11. – 13.03.2010 **„6<sup>th</sup> International Workshop on X-ray Radiation Damage to Biological Crystalline Samples“ in Stanford (Großbritannien)**
- Kontakt: <http://smb.slac.stanford.edu/news/workshops/rd6>
11. – 19.03.2010 **„31<sup>st</sup> Berlin School on Neutron Scattering“ in Berlin**
- Kontakt: Marie Haltod (nschool@helmholtz-berlin.de)  
[http://www.helmholtz-berlin.de/events/neutronschool/contact\\_de.html](http://www.helmholtz-berlin.de/events/neutronschool/contact_de.html)
- Deadlines: Registrierung bis 15.10.2009

21. – 26.03.2010 **DPG-Frühjahrstagung in Regensburg**
- Kontakt: <http://regensburg10.dpg-tagungen.de>  
 Deadlines: Abstracts bis 01.12.2009  
 Registrierung bis 17.02.2010 bzw. 17.03.2010
05. – 09.04.2010 **„2010 MRS Spring Meeting“ in San Francisco (USA)**
- Kontakt: [http://www.mrs.org/s\\_mrs/sec.asp?CID=16773&DID=216957](http://www.mrs.org/s_mrs/sec.asp?CID=16773&DID=216957)  
 Deadlines: Abstracts bis 02.11.2009
07. – 10.04.2010 **„POLYCHAR 18“ in Siegen**
- Kontakt: <http://www.uni-siegen.de/fb8/polychar18>  
 Deadlines: Abstracts bis 30.10.2009  
 Registrierung bis 30.08.2009
12. – 15.04.2010 **„BCA Spring Meeting 2010“ in Warwick (Großbritannien)**
- Kontakt: Dr. Simon Coles ([s.j.coles@soton.ac.uk](mailto:s.j.coles@soton.ac.uk))  
<http://crystallography.org.uk/bca-spring-meeting-2010>  
 Deadlines: Abstracts bis 05.02.2010
12. – 16.04.2010 **„School on Fundamental Crystallography“ in Bloemfontein (Südafrika)**
- Kontakt: <http://www.crystallography.fr/mathcryst/SouthAfrica2010.php>
18. – 22.04.2010 **„PCG Rietveld School“ in Durham (Großbritannien)**
- Kontakt: [john.evans@durham.ac.uk](mailto:john.evans@durham.ac.uk)  
[http://www.dur.ac.uk/john.evans/webpages/pcg\\_rietveld\\_school\\_2010.htm](http://www.dur.ac.uk/john.evans/webpages/pcg_rietveld_school_2010.htm)
22. – 23.04.2010 **Seminar „Röntgendiffraktometrie“ in Wuppertal**
- Kontakt: Dr. M. Ermrich ([roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de](mailto:roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de))  
<http://www.taw.de>
24. – 28.05.2010 **„International School of Crystallisation in Granada (Spanien)**
- Kontakt: <http://www.iscgranada.org>
25. – 28.05.2010 **„3<sup>rd</sup> International Symposium on Diffraction Structural Biology“ (ISDSB2010) in Paris (Frankreich)**
- Kontakt: Prof. Roger Fourme ([roger.fourme@synchrotron-soleil.fr](mailto:roger.fourme@synchrotron-soleil.fr))  
<http://www.synchrotron-soleil.fr/Workshops/2010/ISDSB>  
 Deadlines: Abstracts bis 15.02.2010, Registrierung bis 01.05.2010

- 31.05. – 04.06.2010 **„37<sup>th</sup> International Symposium on Compound Semiconductors“ (ISCS2010) in Kagawa (Japan)**  
 Kontakt: <http://www.iscs2010.org/index.php?FrontPage>
- 31.05. – 04.06.2010 **„22<sup>nd</sup> International Conference on Indium Phosphide and Related Materials“ (IPRM 2010) in Kagawa (Japan)**  
 Kontakt: [http://www.iprm.jp/html/iprm\\_top.html](http://www.iprm.jp/html/iprm_top.html)  
 Deadlines: Abstracts bis 10.12.2009
03. – 13.06.2010 **„Structure and Function from Macromolecular Crystallography: Organisation in Space and Time“ in Erice (Italien)**  
 Kontakt: Paola Spadon (paola.spadon@unipd.it)  
<http://crystaleric.org/Erice2010/2010.htm>  
 Deadline: Registrierung bis 30.11.2009
06. – 11.06.2010 **„Crystal Engineering“ in Waterville Valley (USA)**  
 Kontakt: Gautam R. Desiraju (gautam\_desiraju@yahoo.com)  
<http://www.iucr.org/news/notices/meetings-by-date>  
 Deadlines: Registrierung bis 16.05.2010
- 21.06. – 02.07.2010 **„MathCryst Summer Schools: Topological Crystal Chemistry & Irreducible representations of space groups“ in Nancy (Frankreich)**  
 Kontakt: Anne Clausse (Anne.Clausse@crm2.uhp-nancy.fr)  
<http://www.crystallography.fr/mathcryst/nancy2010.php>
26. – 30.06.2010 **„American Conference on Neutron Scattering 2010“ in Ottawa (Kanada)**  
 Kontakt: <http://www.cins.ca/acns2010/>
05. – 08.07.2010 **„8<sup>th</sup> International workshop on Polarised Neutrons in Condensed Matter Investigations“ (PNCMI2010) in Delft (Niederlande)**  
 Kontakt: <http://www.tnw.tudelft.nl/live/pagina.jsp?id=3f2f14d1-c18b-4276-aa94-90d5d52fc337>
05. – 08.07.2010 **„5<sup>th</sup> International Conference on Molecular Materials“ (MOLMAT 2010) in Montpellier (Frankreich)**  
 Kontakt: <http://www.molmat2010.fr/>  
 Deadlines: Abstracts bis 15.09.2009  
 Registrierung bis 15.03.2010

11. – 16.07.2010 **„37<sup>th</sup> International Conference on Vacuum UltraViolet and X-ray Physics“ (VUVX 2010) in Vancouver (Kanada)**  
 Kontakt: <http://www.vuvx2010.ca/>
18. – 23.07.2010 **„Diffraction Methods In Structural Biology“ in Lewiston ()**  
 Kontakt: Gautam R. Desiraju (gautam\_desiraju@yahoo.com)  
<http://www.grc.org/programs.aspx?year=2010&program=crystaleng>  
 Deadlines: Registrierung bis 16.05.2010
24. – 29.07.2010 **„ACA Annual Meeting“ in Chicago (USA)**  
 Kontakt: <http://meeting2010.amercrystalassn.org/>  
 Deadlines: Abstracts bis 31.03.2010  
 Registrierung bis 31.05.2010
02. – 06.08.2010 **„59<sup>th</sup> Annual Denver X-ray Conference“ in Denver (USA)**  
 Kontakt: <http://www.dxcicdd.com/>
08. – 13.08.2010 **„International Conference on Crystal Growth“ (ICCG-16) in Peking (China)**  
 Kontakt: Prof. Minhua Jiang (mhjiang@sdu.edu.cn)  
<http://www.iocg.org/ICCGupcomingevents.htm>
01. – 07.08.2010 **„The International Summer School on Crystal Growth“ (ISSCG-14) in Dalian (China)**  
 Kontakt: Prof. Mu Wang (muwang@nju.edu.cn)  
<http://www.iocg.org/ICCGupcomingevents.htm>
21. – 27.08.2010 **„20<sup>th</sup> General Meeting of the International Mineralogical Association“ in Budapest (Ungarn)**  
 Kontakt: <http://www.ima2010.org>  
 Deadlines: Abstracts bis 06.03.2010  
 Registrierung bis 30.11.2009 bzw. 30.04.2010
23. – 27.08.2010 **„Free Electron Laser Conference“ in Malmö (Schweden)**  
 Kontakt: <http://fel2010.maxlab.lu.se/>
27. – 29.08.2010 **„MaThCryst Satellite Conference of ECM26“ in Darmstadt**  
 Kontakt: <http://www.crystallography.fr/mathcryst/darmstadt2010.php>

27. – 30.08.2010 **„12<sup>th</sup> European Powder Diffraction Conference“ (EPDIC12) in Darmstadt**

Kontakt: Prof. Dr. Ing. Hartmut Fuess (hfuess@tu-darmstadt.de)  
*<http://www.epdic12.org>*

29.08. – 02.09.2010 **„26<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting“ (ECM) in Darmstadt**

Kontakt: Prof. Dr. Ing. Hartmut Fuess (hfuess@tu-darmstadt.de)  
*<http://www.ecm26.org/>*

10. – 16.09.2010 **„13<sup>th</sup> International Conference on the Crystallisation of Biological Macromolecules“ (ICCBM13) in Dublin (Irland)**

Kontakt: *<http://www.iccbm13.ie>*

## D G K - H O M E P A G E

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie DGK hat ihre eigene Homepage unter der folgenden Adresse im Internet:

<http://www.dgkristall2.de>

Verantwortlich für die Gestaltung der DGK Homepage ist Herr Dr. Götz Schuck (Villigen, Schweiz). Anregungen, Informationen etc., aber auch kritische Anmerkungen sind willkommen.

### **WWW-Redakteur:**

Dr. Götz Schuck (goetz.schuck@psi.ch)

---

## D M G - H O M E P A G E

Auch die Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG) hat eine Homepage im Internet:

<http://www.dmg-home.de>

Der WWW-Server der DMG dient als Fixpunkt für die elektronische Kommunikation innerhalb der Gesellschaft sowie zur Verbreitung von Informationen über die DMG und die Mineralogie als Wissenschaft im Internet. Der WWW-Server wird vom Institut für Mineralogie und Geochemie der Universität zu Köln technisch bereitgestellt und betreut.

### **WWW-Redakteur:**

Dr. Ralf Milke (milke@zedat.fu-berlin.de)

---

## D G K K - H O M E P A G E

Die Homepage der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK) ist im Internet unter der Adresse

<http://www.dgkk.de>

zu finden. Neben einem Link zum Mitteilungsblatt sind auf den Web-Seiten Ansprechpartner in Institutionen und Firmen angegeben, in denen Mitglieder der DGKK tätig sind. Der WWW-Server wird vom IKZ Berlin technisch bereitgestellt und betreut.

### **WWW-Administratoren:**

Sabine Bergmann und Uwe Rehse (rehse@ikz-berlin.de)



**Ich bin an der Mitarbeit in folgenden Arbeitskreisen der DGK interessiert:**

- AK 1 [ ] Biologische Strukturen
- AK 2 [ ] Hochdruck-Kristallographie
- AK 3 [ ] Elektronenmikroskopie
- AK 4 [ ] Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen
- AK 5 [ ] Kristallphysik
- AK 6 [ ] Molekülverbindungen
- AK 7 [ ] Neutronenstreuung
- ~~AK 8~~ (seit 3/2003 zusammengelegt mit AK 11)
- AK 9 [ ] Theoretische Kristallographie
- AK 10 [ ] Mikroskopie
- AK 11 [ ] Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung
- AK 12 [ ] Spektroskopie
- AK 13 [ ] Pulverdiffraktometrie
- AK 14 [ ] Computational Crystallography
- AK 15 [ ] Mineralogische und Technische Kristallographie
- AK 16 [ ] Aperiodische Kristalle
- AK 17 [ ] Kristallographie in der Lehre
- AK 18 [ ] Grenzflächen
- AK 19 [ ] Kristallchemie



