





Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). 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 bezahlte Anzeigen der Firmen AXO Dresden, Bruker AXS, Crystal Impact GbR, EFG GmbH, Huber Diffraktionstechnik, Incoatec, Jena Bioscience, PANalytical, Rigaku und Röntgenlabor Dr. Ermrich.

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:

Prof. Dr. Dirk C. Meyer
Technische Universität Bergakademie Freiberg
Institut für Experimentelle Physik
Leipziger Straße 23, D-09596 Freiberg
Tel.: +49-3731-39-2860, Fax: +49-3731-39-4314
E-Mail: dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de

Redaktionsbereiche:

Anzeigen und Werbung: Dr. Tilmann Leisegang, t.leisegang@hzdr.de
Veranstaltungshinweise: Stephan Ritter, stephan.ritter@physik.tu-dresden.de
Herstellung: Dr. Hartmut Stöcker, hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.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 der DMG: Prof. Dr. Ulrich Bismayer
Universität Hamburg, Mineralogisch-Petrographisches Institut
Grindelallee 48, D-20146 Hamburg
Tel: +49-40-41232050, Fax: +49-40-41232422
E-Mail: ubis@mineralogie.uni-hamburg.de

Vertreter der DPG: PD Dr. Leonore Wiehl
Universität Frankfurt, Inst. f. Geowissenschaften, Facheinheit Mineralogie/Kristallographie
Altenhöferalle 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

Liebe Mitglieder der DGK,

im Namen des gesamten Vorstands darf ich Sie recht herzlich als Leser der 41. Mitteilungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie begrüßen. Gleichzeitig wünsche ich Ihnen ein glückliches, gesundes und erfolgreiches Neues Jahr 2012.

Dieses Jahr 2012 ist ein Besonderes für die Kristallographie. Vor einhundert Jahren (1912) erschienen in den Sitzungsberichten der Bayerischen Akademie der Wissenschaften zwei Arbeiten, welche die moderne Kristallstrukturanalyse begründeten. Zunächst berichteten Walter Friedrich, Paul Knipping und Max Laue über „Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen“ (S. 303–322), darauf präsentierte Max Laue „Eine quantitative Prüfung der Theorie für die Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen“ (S. 363–373). Vorausgegangen war der experimentelle Nachweis der Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen. Diese Experimente und ihre theoretische Deutung waren von großer und grundlegender Bedeutung für die gesamten Naturwissenschaften, denn sie bewiesen unmittelbar sowohl die Wellennatur der Röntgenstrahlen als auch die Gitterstruktur der Kristalle. Die Erkenntnisse der Münchner Forscher wurden von der Wissenschaft umgehend akzeptiert und in ihrer Bedeutung erkannt; bereits 1914 wurde Max von Laue mit dem Physik-Nobelpreis für seine Entdeckung der Röntgendiffraktion an Kristallen ausgezeichnet. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie hat ihren Nachwuchspreis nach Max von Laue benannt.

Das einhundertste Jubiläum des Laue-Experiments steht im Mittelpunkt aller kristallographischen Veranstaltungen im **Laue-Jahr 2012**. Unsere Jahrestagung vom 12. bis 15. März 2012 findet an historischer Stätte in München statt und beginnt mit einem Laue-Tag, an dem Geschichte, Gegenwart und Zukunft der Kristallographie in einer Reihe von herausragenden Vorträgen präsentiert werden sollen. Die nach zweijähriger Unterbrechung wieder an ihrem gewohnten Märztermin stattfindende Jahrestagung steht ganz im Zeichen des Laue-Jubiläums und freut sich auf regen Zuspruch aus Ihrem Kreis. Ich darf an dieser Stelle auch auf die Mitgliederversammlung der DGK in München hinweisen, auf der ein neuer Vorstand gewählt wird. Die Einladung mit Tagesordnung ist in diesem Heft abgedruckt.

Das Laue-Experiment und seine Bedeutung für die Kristallographie wird auch im Mittelpunkt des *European Crystallographic Meeting* (ECM-27) in Bergen (Norwegen) stehen. Die *International Union of Crystallography* beantragt bei den Vereinten Nationen für 2014 ein Internationales Jahr der Kristallographie. Sollten die Vereinten Nationen diesem Antrag auf ihrer Vollversammlung im September 2012 stattgeben, wäre das ein weit sichtbarer und wunderbarer Abschluss der internationalen Veranstaltungen in der Folge des Laue-Experiments.

Danken möchte ich zum Schluss noch Georg Amthauer und seinen Mitarbeitern und Kollegen aus Salzburg für die Ausrichtung der gemeinsamen Jahrestagung der DGK, der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) und der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (ÖMG) im September 2011 in Salzburg. Wenn auch nicht ganz so viele DGK-Mitglieder wie gehofft den Weg nach Salzburg gefunden haben, so bot die Tagung den Besuchern doch ein beeindruckendes wissenschaftliches Programm und das erwartet schöne Ambiente in der Mozartstadt.

Jetzt dürfen wir uns auf die Laue-Tagung in München freuen!

Ihr
Udo Heinemann

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	6

Redaktionelle Beiträge:

Einladung zur Mitgliederversammlung der DGK	9
Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 21.09.2011 in Salzburg	11
Anlage zum Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand	21
Anlage zum Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand	22
Anlage zum Bericht des Vertreters der DGK in der DPG	23
Satzung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	25
Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	39
Kurzberichte der Reisestipendiaten zum XXII. IUCr-Kongress in Madrid	43
Buchbesprechung: „Einführung in die Kristallographie“	51
VIII Regional School on Crystallography and Diffraction	56

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht des AK 4 „Nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen“	61
Jahresbericht des AK 6 „Molekülverbindungen“	63
Workshop „Neutronenstreuung für Kristallographen“ des AK7 „Neutronenstreuung“	65
Bericht des AK 11 „Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung“	66
Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2011	69

Bericht zum Doktoranden-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“	70
Bericht aus dem AK 18 „Oberflächen und Grenzflächen“	73

Personalia:

Laudation zur Verleihung des Max-Von-Laue-Preises 2011 an Frau Alexandra Friedrich	77
Laudatio anlässlich der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2011 an Herrn Gernot Heger	79
Hans Georg von Schnering	83

Ankündigungen:

Einladung zur DGK-Jahrestagung 2012 in München	95
Einladung zur DGK-Jahrestagung 2013 in Freiberg	96
Tagungen und Termine	97
Homepages von DGK, DMG und DGKK	103
Aufnahmeformular	104
Arbeitskreise der DGK	105
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	106

EINLADUNG ZUR MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DGK

Die Mitgliederversammlung findet im Rahmen der Jahrestagung 2012 der DGK um 18:00 Uhr, am Mittwoch, dem 14. März 2012, im Hörsaal A140 des Hauptgebäudes der Ludwig-Maximilians-Universität, Geschwister-Scholl-Platz 1, 80539 München statt.

Vorläufige Tagesordnung

1. Begrüßung der Teilnehmer
2. Feststellung der Beschlussfähigkeit
3. Annahme der Tagesordnung
4. Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 21.09.2011 in Salzburg (veröffentlicht in diesem Heft der „Mitteilungen der DGK“)
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 Vertreters der DMG im Vorstand
 - 5.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand
 - 5.8 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG
 - 5.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen
 - 5.10 Bericht des Redakteurs der Homepage
6. Entlastung des Vorstands
7. Wahlen:
 - 7.1 Wahl des Vorstands
 - 7.2 Wahl von Mitgliedern des Nationalkomitees
 - 7.3 Wahl von Mitgliedern des Komitees für den Max-von-Laue-Preis
 - 7.4 Wahl von Mitgliedern des Komitees für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie
 - 7.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr
8. Beschluss der Beitragsordnung und Spendenaufruf
9. Jahrestagungen 2013 und 2014
10. Sonstiges

Udo Heinemann, Vorsitzender

Rigaku

Fully functioning benchtop X-ray crystallography system

- Robust, simple design
- Intuitive software, ideal to support non-expert users
- Exceptional data quality – ready to publish structures to or exceeding IUCr publication standards

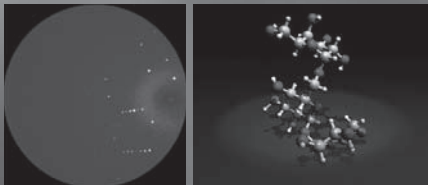


XtaLAB mini

Benchtop X-ray crystallography system



Suitable for short and long unit cell axes



● Sample: Raffinose ● Sample size: 0.25 × 0.13 × 0.12 mm ● R₁: 4.29 %

Rigaku Corporation

Rigaku Americas Corporation

9009 New Trails Drive, The Woodlands, Texas 77381-5209, USA
Phone: 1-281-362-2300 Fax: 1-281-364-3626
e-mail: info@rigaku.com

4-14-4, Sendagaya, Shibuya-ku, Tokyo 151-0051, Japan
Phone: 81-3-3479-0618 Fax: 81-3-3479-6112 e-mail: rinttyo@rigaku.co.jp

Rigaku Beijing Corporation

2801A, Tengda Plaza, No.168, Xizhimenwai Avenue,
Haidian District, Beijing 100044, P.R.China
Phone: +86-010-8857-5768 Fax: +86-010-8857-5748
e-mail: info@rigaku.com.cn

www.Rigaku.com

Rigaku Europe SE

Gross-Berliner Damm 151, 12487 Berlin, Germany
Phone: +49-30-9264035-0 Fax: +49-30-6264035-10
e-mail: rose@rigaku.co.jp

PROTOKOLL ZUR
MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER
DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR
KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 21.09.2011 IN SALZBURG

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der gemeinsamen Jahrestagung 2011 der DGK mit der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (ÖMG) und der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) um 18:00 Uhr, am Mittwoch, dem 21. September 2011, im Hörsaal 402 des Fachbereichs Materialforschung und Physik der Universität Salzburg, Heilbrunnerstraße 34, 5020 Salzburg, statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Herr Prof. Heinemann, eröffnet die Sitzung und begrüßt die anwesenden Mitglieder der DGK.

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

- Prof. Dr. Dr. h. c. G. Christian Amstutz (Heidelberg)
- Dr. Jörg Bergmann (Dresden)
- Prof. Dr. Joachim Behlke (Berlin)
- Prof. Dr. Dr. h. c. Friedrich Liebau (Kiel)
- Prof. Dr. Jürgen Petzoldt (Mainz)
- Dr. Klaus Röller (Unna)
- Prof. Dr. Hans Georg von Schnering (Stuttgart)
- Prof. Dr. Erwin Hellner (Marburg)

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagungsordnung wird mit folgender Änderung einstimmig angenommen: Unter TOP 7 soll über die geänderte Satzung der DGK entschieden werden.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 31.08.2010 in Darmstadt

Das Protokoll wird – wie in Heft 40 der DGK-Mitteilungen, Seite 13 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Berichte

5.1 Bericht des Vorsitzenden

Herr Heinemann berichtet über den Zeitraum zwischen der ECM 26 in Darmstadt im August/September 2010 und der Gemeinsamen Jahrestagung von DGK, DMG und ÖMG in Salzburg im September 2011. In dieser Zeit tagte der DGK-Vorstand zweimal, am 11.03.2011 (VS 2011-I) in Berlin und am 20.09.2011 (VS 2011-II) in Salzburg.

International Union of Crystallography (IUCr): Der Jahresbeitrag der DGK für 2011 in Höhe von 10.000 SFr wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) mit dem üblichen Verweis entrichtet, dass sich aus der Zahlung keine Verpflichtung für Folgejahre ableitet. Bei der Zahlungsabwicklung ergab sich ein Problem bezüglich der Wechselkurse zwischen Euro und Schweizer Franken, das mittlerweile ausgeräumt ist. Der Zwischenfall zeigt, dass für die DGK ein Risiko durch vollständige oder teilweise Zahlungsausfälle seitens der DFG besteht. 2013 soll von der IUCr als „International Year of Crystallography“ (IYCr 2013) gefeiert werden. Das IYCr muss noch von der Vollversammlung der Vereinten Nationen beschlossen werden. Die DGK ist mit dem Vorstand der IUCr in Kontakt, um eine angemessene Präsentation des Laue-Experiments (1912) während des IYCr 2013 sicherzustellen. Die Teilnahme junger Kristallographinnen und Kristallographen aus deutschen Forschungseinrichtungen am IUCr-Kongress 2011 in Madrid wurde durch die Vergabe von Reisestipendien unterstützt. Es wurden nicht alle ausgelobten Stipendien abgerufen. Zu anderen Angelegenheiten der IUCr berichtet der Vorsitzende des Nationalkomitees.

European Crystallographic Association (ECA): Der ECA-Council tagte zweimal während des IUCr-Kongresses in Madrid. Der Council beschloss die Schaffung von „General Interest Groups“ (GIGs) zusätzlich zu den „Special Interest Groups“ (SIGs). Eine „GIG for Young Crystallographers“ ist bereits aktiv, eine „GIG for Senior Crystallographers“ ist in Vorbereitung. Die von der ECA beantragte „European Graduate School of Crystallography“ (Master und PhD) unter dem ERASMUS-MUNDUS-Programm der EC wurde trotz exzellenter wissenschaftlicher Bewertung nicht zur Förderung empfohlen. Die europäische Tagung ECM 29 im Jahr 2015 wurde nach Rovinj in Kroatien vergeben.

Neufassung der Satzung der DGK: Die von der Mitgliederversammlung 2010 in Darmstadt beschlossenen Neufassungen der DGK-Satzung, der Ordnung für den Max-von-Laue-Preis und der Satzung der Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie, sowie die Ordnung für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie und das Protokoll der Mitgliederversammlung wurden dem Finanzamt für Körperschaften Berlin übergeben. Das Finanzamt macht eine weitere Änderung der Satzung zur Auflage, in welcher der Zweck der Gesellschaft (§ 2) im Sinne des Steuerrechts enger gefasst ist. Nach Konsultation des auf Stiftungs- und Vereinsrecht spezialisierten Abbe-Instituts für Stiftungswesen an der Friedrich-Schiller-Universität Jena wurde § 2 neu gefasst und wird hier zur Beschlussfassung vorgelegt.

DFG-Fachkollegien: Nominierungen von Wissenschaftlern für die Neuwahl der Fachkollegien (2012–2015) wurden zum Jahresende 2010 eingereicht. Die DGK war erstmalig für vier Fachkollegien vorschlagsberechtigt. Für das Fach 201-04 „Strukturbiologie“ wurde eine gemeinsame Liste mit der Gesellschaft für Biochemie und Molekularbiologie (GBM) und der Deutschen Gesellschaft für Biophysik (DGfB) federführend eingereicht. Für das Fach 316-01 „Organische und Anorganische Geochemie, Biogeochemie, Mineralogie, Petrologie, Kristallographie, Lagerstättenkunde“ wurde die Liste der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) unter-

stützt. Für die Fächer 307-01 „Experimentelle Physik der kondensierten Materie“ und 406-04 „Materialwissenschaften – Strukturierung und Funktionalisierung“ wurden die Listen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) unterstützt. Die von der DGK mitgetragenen Nominierungen wurden weitgehend in die Wahllisten übernommen. Es ist wichtig, dass die in der Kristallographie Tätigen sich aktiv an den Wahlen im Herbst beteiligen.

Salzburg-Tagung: Entsprechend unserem Antrag unterstützt die DFG die Gemeinsame Jahrestagung mit einer Zuwendung in Höhe von 5.480 €.

Preise: Auf dem gemeinsamen Ehrenabend der veranstaltenden Gesellschaften wurde die Carl-Hermann-Medaille der DGK an Herrn Prof. Dr. Gernot Heger (Aachen) verliehen. Mit dem Max-von-Laue-Preis der DGK wurde Frau Dr. Alexandra Friedrich (Frankfurt) ausgezeichnet.

Es werden keine Fragen an Herrn Heinemann gestellt.

5.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Herr Fischer berichtet in Vertretung von Herrn Pietsch zunächst über die „22nd General Assembly der International Union of Crystallography“ in Madrid, 27.–30. August 2011. An drei Sitzungsterminen der „IUCr General Assembly“ wurden im Wesentlichen folgende Punkte behandelt:

- Die Gesellschaften für Kristallographie aus Bulgarien und Irland wurden als neue Mitglieder in die IUCr aufgenommen.
- Es wurde eine geringfügige Änderung der Statuten zur Regelung der Wahl der sechs „IUCr Officers“ aus drei geographischen Regionen und zur Einführung elektronischer Abstimmungen vorgenommen. Alle Änderungen wurden einstimmig angenommen.
- Das Jahr 2013 wird zum „International Year of Crystallography“ erklärt. Entsprechende Verhandlungen laufen mit der UNESCO, um dies auch seitens dieser Organisation zu unterstützen und zu propagieren. Alle nationalen Gesellschaften sind aufgefordert, über ein entsprechendes Programm im Jahr 2013 nachzudenken. Ein Logo zum Jahr der Kristallographie wurde im Rahmen eines Wettbewerbs erstellt.
- Die finanzielle Situation der IUCr ist stabil, jedoch vom Wechselkurs des Schweizer Franken abhängig, da alle Konten in der Schweiz geführt werden müssen.
- Der neunte Ewald-Preis wurde an E. Dodson, C. Giacovazzo und G. M. Sheldrick verliehen.
- Eine Reihe von Täuschungsversuchen wurde unter anderem in Acta Cryst. Publikationen entdeckt und nachträglich diskreditiert.
- G. R. Desiraju (Indien) wurde zum neuen Präsidenten der IUCr als Nachfolger von Sine Larsen gewählt. C. Lecomte (Frankreich) wurde als Vizepräsident gewählt. In mehreren Wahldurchgängen wurde Wulf Depmeier für eine dreijährige Laufzeit in das „Executive Committee“ gewählt.
- Der IUCr-Kongress 2017 wird in Hyderabad (Indien) stattfinden, das in der Abstimmung gegen Prag gewonnen hat. Der Kongress 2014 wird in Montreal (Kanada) durchgeführt.

5.3 Bericht des Schriftführers

Herr Sträter berichtet über die Mitgliederentwicklung der DGK. Im Jahr 2010 gab es 27 Eintritte und 12 Austritte. Im Jahr 2011 sind bisher 18 Eintritte und 8 Austritte zu verzeichnen. Die Zahl der Mitglieder beträgt gegenwärtig 1096, darunter 236 Mitglieder mit offenen Beiträgen (Stand 17.09.2011).

5.4 Bericht des Schatzmeisters

Herr Müller berichtet über die Jahresbilanz der DGK für das Geschäftsjahr 2010.

Insgesamt hatte die DGK im Jahre 2010 Einnahmen von 27.218,82 €, davon Einnahmen aus den Mitgliederbeiträgen von 23.323,76 €, aus dem Geschäftsbereich 3800 € von den Anzeigen für die Mitteilungen. Die Zinseinnahmen aus den Konten betragen nur 67 €, was dem niedrigen Zinsniveau aufgrund der Finanzkrise geschuldet ist. Von den Einnahmen wurden für die Administration 435,95 €, für den Aufwendersersatz (Reisen u. Ä.) 1234,97 € und für die Mitteilungen der DGK 5502,76 € verwendet. Fast 16.000 € wurden zur Förderung der Arbeitskreise und für Reisestipendien zur ECM 26 in Darmstadt vergeben. Für die DGK-Mitteilungen wurden 5500 € verwendet, wobei 3800 € dank dem Engagement von Herrn Meyer als verantwortlichem Redakteur durch Anzeigen eingenommen wurden. Die finanzielle Arbeit der DGK zur Förderung von Wissenschaft und Forschung sowie der Lehre kann somit als sehr gut bezeichnet werden. Zeitnah zur Verwendung bis Ende 2011 stehen somit noch 3943,72 € zur Verfügung.

<u>Jahresbilanz 2010 der DGK</u>			
Einnahmen 2010			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2010	19.162,48 €	23.323,76 €
	Barzahler 2010	2.832,11 €	
	Barzahler Nachzahlung	939,17 €	
	Dauermitglieder	390,00 €	
Spenden			20,00 €
Zinsen	Girokonto	-5,50 €	67,06 €
	Rücklagekonto		
	Dauermitglieder	14,78 €	
	Cashkonto 081, 085	57,78 €	
Broschüren Kristallographie			8,00 €
Anzeigen für Mitteilungen			3800,00 €
Summe Einnahmen			27.218,82 €
Ausgaben 2010			
Mitteilungen			-5.502,76 €
Arbeitskreise	Förderung	-8.725,00 €	-8.025,00 €
	Rückführung	700,00 €	
Administration	Barzahler, Postgebühren	-142,00 €	-435,95 €
	Stornogegebühren	-51,00 €	
	Büromaterial,		
	Kommunikation	-242,95 €	

Aufwendungsersatz (Reisen)			-1.234,97 €
Preis Interd. Krist.			-100,00 €
Reisestipendien ECM 26			-6.863,90 €
Beiträge DGK ECA, DVT			-1.112,52 €
Summe Ausgaben			-23.275,10 €
Bilanz Ein- und Ausgaben 2010 der DGK			
			3.943,72 €
Kontoführung 2010			
Konto	31.12.2009	31.12.2010	Änderung
Giro	427,56 €	899,39 €	471,83 €
Rücklage Dauermitglieder	0,00 €	2.414,78 €	2.414,78 €
DGK-Cash 081	18,53 €	1.075,64 €	1.057,11 €
Kapital der DGK	446,09 €	4.389,81 €	3.943,72 €

Im Jahre 2010 konnte wiederum ein Max-von-Laue-Preis vergeben werden (an Dr. Evgeny Alekseev, Kiel), so dass zum 31.12.2010 eine Rücklage von 1044 € für die Preisvergabe 2011 zur Verfügung steht. Die Erträge für 2010 aus dem Laue-Kapital betragen leider nur 919,63 €, so dass zukünftig wohl zu Spenden aufgerufen werden muss, um die Preisvergabe zu gewährleisten (siehe folgende Tabelle).

<u>Jahresbilanz 2010 Max-von-Laue-Preis-Kapital</u>			
Einnahmen 2010			
Zinsen	Laue-Sparbuch 051, 920	8,31 €	919,63 €
	Laue-Preis-Stiftung 171, 930	911,32 €	
Summe Einnahmen			919,63 €
Ausgaben 2010			
Laue-Preis 2010	Dr. Evgeny Alekseev, Kiel		-1.500,00 €
Summe Ausgaben			-1.500,00 €
Bilanz Ein- und Ausgaben 2010			-580,37 €
Kontoführung 2010			
Konto	01.01.2010	31.12.2010	Änderung
Laue-Sparbuch 051	1.358,67 €	0,00 €	-1.358,67 €
Laue-Sparbuch 920	0,00 €	802,62 €	802,62 €
Laue-Preis-Kapital 171	60.266,08 €	0,00 €	-60.266,08 €
Laue-Preis-Kapital 930	0,00 €	60.241,76 €	60.241,76 €
Kapital des Preises	61.624,75 €	61.044,38 €	-580,37 €
Kapital 31.12.2010			60.000,00 €
Rücklage 31.12.2010			1.044,38 €

Die Vergabe des Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie (an Herrn Harry Müller, Leipzig) hat die Erträge des Kapitals aufgebraucht, so dass eine Rücklage von 83,37 € in das Jahr 2011 gegeben werden kann. Das Preisgeld ergibt sich aus den Zinseinnahmen des Stiftungskapitals. Aufgrund des gegenwärtigen Niedrigzinses ist eine weitere Preisvergabe vor 2014 nicht zu erwarten (siehe folgende Tabelle).

Jahresbilanz 2010 Stiftung Interdisziplinarität der Kristallographie			
Einnahmen 2010			
Zinsen	Sparbuch 131, 830	9,07 €	461,46 €
	Stiftungskapital 121, 870	452,39 €	
Vorverauslagung DGK			100,00 €
Summe Einnahmen			561,46 €
Ausgaben 2010			
Stiftungs-Preis 2010	Preisgeld 2010 Harry Müller		-2.000,00 €
Summe Ausgaben			-2.000,00 €
Bilanz Ein- und Ausgaben 2010			-1.438,54 €
Kontoführung 2010			
Konto	01.01.2010	31.12.2010	Änderung
Stiftungs-Sparbuch 131	1.433,34 €	0,00 €	-1.433,34 €
Stiftungs-Sparbuch 830	0,00 €	9,13 €	9,13 €
Stiftungskapital 121	30.188,57 €	0,00 €	-30.188,57 €
Stiftungskapital 870	0,00 €	30.174,24 €	30.174,24 €
Veränderung	31.621,91 €	30.183,37 €	-1.438,54 €
Kapital 31.12.2010			30.000,00 €
Rücklage 31.12.2010			83,37 €

Insgesamt wies der Schatzmeister darauf hin, dass alle finanziellen Mittel satzungsgemäß und zweckgemäß ausgegeben wurden.

5.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfung für das Geschäftsjahr 2010 durch Herrn Lehmann und Herrn Schreuer ergab, dass die Kasse fehlerfrei geführt wurde und die Mittel dem Satzungszweck entsprechend ausgegeben wurden.

5.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Herr Bismayer fasst die wichtigsten Punkte seines Berichts im Anhang (siehe Seite 21) zusammen.

5.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

Frau Wiehl fasst die wichtigsten Punkte ihres Berichts im Anhang (siehe Seite 22) zusammen.

5.8 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG

Frau Wiehl berichtet in Vertretung von Herrn Braden über die wichtigsten Punkte seines im Anhang auf Seite 23 abgedruckten Berichtes.

5.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Herr Meyer dankt dem Redaktionskollegium, insbesondere Herrn Stöcker, für seine Arbeit im vergangenen Jahr. Es soll nach Möglichkeit noch ein zweites Heft in diesem Jahr erscheinen.

5.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Tagesordnungspunkt 5.10 entfällt, da Herr Schuck nicht anwesend sein konnte.

6 Entlastung des Vorstands

Herr Schreuer als Kassenprüfer beantragt die Entlastung des Vorstands. Der Vorstand wird ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen für das Geschäftsjahr 2010 entlastet.

7 Änderung der Satzung der DGK

Die entsprechenden Texte wurden über die Homepage unter www.dgkristall2.de/intern zugänglich gemacht. Herr Heinemann stellt zunächst die Änderungen vor und erläutert die Hintergründe für die Satzungsänderung. Die Satzung wird ohne Gegenstimmen und Enthaltungen angenommen. Die neue Satzung findet sich in diesem Heft auf Seite 25.

8 Wahlen

8.1 Neuwahl von Mitgliedern des Preiskomitees der Carl-Hermann-Medaille

Nach der Ordnung für die Carl-Hermann-Medaille besteht das Preiskomitee aus vier Mitgliedern, die für drei Jahre gewählt werden. Es kandidieren:

- Herr Depmeier,
- Frau Wiehl,
- Herr Lehmann,
- Herr van Smaalen,
- Herr Wahl.

In geheimer Abstimmung werden Herr Wulf Depmeier (49 Stimmen), Frau Leonore Wiehl (46 Stimmen), Herr Christian Lehmann (44 Stimmen) und Herr Sander van Smalen (34 Stimmen) in das Preiskomitee gewählt.

8.2 Nachwahl von Mitgliedern des Komitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze

Nach der Ordnung für die Will-Kleber-Gedenkmünze besteht das Preiskomitee aus vier Mitgliedern, die für drei Jahre gewählt werden. Die Amtszeit von Herrn Paufler läuft noch bis 2013. Herr Bohatý und Herr Zimmermann können nicht wiedergewählt werden. Es kandidieren für diese drei Mitglieder:

- Frau Gemming,
- Herr Sträter,
- Frau Becker,
- Herr Roth,
- Herr Jordan,
- Herr Buhl.

In geheimer Abstimmung werden Herr Josef-Christian Buhl (31 Stimmen), Frau Petra Becker (29 Stimmen) und Herr Georg Roth (27 Stimmen) in das Preiskomitee gewählt.

8.3 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Herr Lehmann und Herr Schreuer werden als Kassenprüfer für das Jahr 2011 bestätigt.

9 Beschluss der Beitragsordnung

Aufgrund der finanziellen Situation der DGK schlägt der Schatzmeister entsprechend der Empfehlung des Vorstandes vor, den Jahresbeitrag 2012 wie bisher zu erheben. Die Beitragsordnung wird durch den Hinweis ergänzt, dass der Einmalbeitrag eines Ruhestandsmitglieds nicht zeitnah zu verwenden ist. Die Mitgliederversammlung folgt diesem Antrag einstimmig (ohne Enthaltungen und Gegenstimmen). Die Beitragsordnung lautet damit:

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V.

Der Jahresbeitrag ist für das laufende Jahr bis jeweils zum 31. Januar zu entrichten. Er wird in der Regel mittels Bankeinzugsverfahren eingezogen. Der Jahresmitgliedsbeitrag beträgt 30 € und für studentische Mitglieder 10 €. Auf Antrag kann der Vorstand einem Mitglied einen reduzierten Beitragssatz entsprechend der folgenden Beitragstabelle genehmigen:

A	Ordentliche Mitglieder	30 €
B	Studentische Mitglieder	10 €
D	Doktoranden (bis maximal zum 31. Lebensjahr)	10 € auf Antrag
E	Stellungslose Mitglieder	10 € auf Antrag
F	Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand	10 € auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand

Ein Ruhestandsmitglied kann ab Vollendung des 65. Lebensjahres auf Antrag eine lebenslange Mitgliedschaft durch Entrichten eines nicht zeitnah zu verwendenden Einmalbetrages (ohne weitere zukünftige Beitragszahlungen) von 120 € erwerben.

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 21. September 2011 in Salzburg beschlossen.

Des Weiteren schlägt Herr Müller vor, ein Rücklagekonto für die Beiträge der Dauermitglieder einzurichten. Da die DGK mittlerweile 22 Dauermitglieder hat, entspricht dies einem Gesamtbeitrag von 2640 €. Dieser Betrag soll im Sinne der Dauermitgliedschaft über einen Zeitraum von etwa 12 Jahren verwendet werden. Dafür soll ein Rücklagekonto für den Dauermitgliedsbeitrag eingerichtet werden, von dem jährlich etwa 8 % in die aktuellen Mittel übernommen werden sollen. Die Mitgliederversammlung beschließt einstimmig (ohne Enthaltungen und Gegenstimmen) die folgende Ordnung für die Einrichtung und Führung eines Rücklagekontos für die Beiträge der Dauermitglieder.

Ordnung für Beiträge der Dauermitglieder

Ein Ruhestandsmitglied kann ab Vollendung des 65. Lebensjahres auf Antrag eine lebenslange Mitgliedschaft durch Entrichten eines nicht zeitnah zu verwendenden Einmalbetrages (ohne weitere zukünftige Beitragszahlungen) von 120 € erwerben. Dieser Beitrag wird einem Rücklagenkonto der DGK „Dauermitglieder“ gut geschrieben. Die Erträge dieses Rücklagenkapitals fließen diesem direkt zu. Das Rücklagenkapital „Dauermitglieder“ ist nicht unmittelbar zeitnah zu verwenden. Jährlich wird ein Betrag von etwa 8 % dieses Rücklagenkapitals der zeitnahen Verwendung zugeführt.

10 Beschluss der Jahrestagungsordnung

Mit der auf Seite 39 abgedruckten Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der DGK sollen insbesondere für die Organisatoren der DGK-Jahrestagungen die Rahmenbedingungen zur Planung und Durchführung dieser wichtigsten Veranstaltung der DGK definiert werden. Zu Punkt 7 der Ordnung wird diskutiert, ob festgelegt werden soll, dass die Raumkoordinaten der in den Posterabstracts beschriebenen Strukturen mit der Posterveröffentlichung in einer Strukturdatenbank elektronisch hinterlegt werden müssen. Es wird geschätzt, dass etwa die Hälfte aller auf der Jahrestagung präsentierten Strukturen später nicht veröffentlicht wird und die Koordinaten somit wahrscheinlich nicht hinterlegt werden. Herr Heinemann merkt an, dass eine verpflichtende Veröffentlichung der Koordinaten vor einer finalen Publikation problematisch für viele Teilnehmer sein könnte. Die Autoren der eingereichten Posterabstracts sollen daher aufgefordert werden, die Strukturen in geeigneten Datenbanken zu hinterlegen. Punkt 7 der Ordnung soll dahingehend ergänzt werden. Die Jahrestagungsordnung wird mit 0 Gegenstimmen und 2 Enthaltungen angenommen.

11 Jahrestagungen 2012 und 2013

Herr Schmal berichtet über den Stand der Vorbereitungen zur DGK-Jahrestagung 2012 in München, die vom 11. bis 15. März 2012 im Hauptgebäude der Ludwig-Maximilians-Universität München stattfinden wird. Die organisatorische Abwicklung erfolgt über *Conventus*. Die internationale Sichtbarkeit wird durch einen zusätzlichen Tag zum Laue-Jubiläum mit internationaler Beteiligung verstärkt. Die Webseite der Konferenz ist www.conventus.de/dgk2012.

Herr Meyer stellt den Stand der gegenwärtigen Vorbereitungen zur Jahrestagung 2013 in Freiberg dar.

12 Sonstiges

entfällt

Udo Heinemann, Vorsitzender
Norbert Sträter, Schriftführer

ANLAGE ZUM
BERICHT DES VERTRETERS DER DMG
IM VORSTAND

Im Berichtszeitraum 2010/2011 erfolgten DMG-Vorstandssitzungen am 19.09.2010 anlässlich der DMG-Jahrestagung in der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster und am 25./26.03.2011 in Bad Honnef.

Während der Tagung in Münster wurden die Abraham-Gottlob-Werner-Medaille in Silber an Prof. H. R. Wenk von der University of California, Berkeley verliehen. Der Viktor-Moritz-Goldschmidt-Preis ging an Dr. Sandro Jahn vom Geoforschungszentrum Potsdam und mit dem Ramdohr-Preis wurde Bastian Joachim vom Geoforschungszentrum Potsdam ausgezeichnet.

Die DMG verfügt seit Ende 2010 über ein Elektronisches Mitgliederverzeichnis unter www.schweizerbart.de/services/societylogin/ejm.

Die Fachkollegienwahl der DFG erfolgt im Herbst 2011. Zwischen DGK und DMG wurden die zu nominierenden Kandidaten für das Fachkollegium 316 „Geochemie, Mineralogie und Kristallographie“ abgestimmt.

Auf der Homepage der DFG-Geokommission befindet sich das Strategiepapier zum Thema „Dynamische Erde – Zukunftsaufgaben der Geowissenschaften“ (Bestellung gegen Schutzgebühr von 3 €): www.geokommission.de/Dynamische_Erde.html.

Die Durchführung der 7. Internationalen Tagung „Mineralogy & Museums“ ist 2012 vom 27. bis 29.08. in Dresden vorgesehen: www.conventus.de/mm7.

Im Jahr 2011 werden sieben Doktorandenkurse angeboten. Details sind auf der Homepage der DMG genannt: www.dmg-home.de/kursprogramm.html.

Im Jahr 2012 wird die DMG-Jahrestagung zusammen mit den Mineralogical Societies of Great Britain and Ireland, Frankreich, Schweiz, Österreich, Spanien, Polen und Italien in Frankfurt durchgeführt (02.–06.09.2012): <http://emc2012.uni-frankfurt.de>. Für 2013 ist eine Gemeinschaftstagung von DMG und GV in Tübingen vorgesehen und 2014 wird die DMG-Tagung in Mainz stattfinden.

Ulrich Bismayer, Hamburg

ANLAGE ZUM
BERICHT DES VERTRETERS DER DPG
IM VORSTAND

Die nächste Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) findet vom 25. bis 30. März 2012 in Berlin statt. Auch dort wird das Thema „100 Jahre Laue-Experiment“ eine gebührende Würdigung finden. Aus diesem Anlass organisiert die Fachgruppe Kristallographie (KR) gemeinsam mit den Fachverbänden BP (Biologische Physik), CPP (Chemische Physik und Polymerphysik), DF (Dielektrische Festkörper), MA (Magnetismus), MM (Metall- und Materialphysik) und GP (Geschichte der Physik) ein fachverbandsübergreifendes Symposium mit dem Titel „100 years of X-ray diffraction: From the Laue experiment to new frontiers“.

Dies ist eines von insgesamt acht fachverbandsübergreifenden Symposien, die bereits jetzt schon im Physikjournal angekündigt sind (Ausgabe 09/2011). Es besteht aus fünf eingeladenen Vorträgen, die den Bogen spannen von den historischen Anfängen bis zu aktuellen und zukünftigen Experimentiermöglichkeiten mit Synchrotron und FEL an Proben aus allen Bereichen der harten und weichen Materie, von der Materialphysik und -chemie bis zur Biologie.

Damit verknüpft wird es eine Fachsitzung unter gleichem Namen mit eingereichten Beiträgen (Kurzvorträge, Poster) geben als Joint Session von KR, BP, CPP, DF, MA, MM, GP und MI. Hier ist auch der Fachverband Mikrosonden mit im Boot.

Die in den letzten Jahren erfolgreiche Fachsitzung „Crystallography in Nanoscience“ soll auch im nächsten Jahr wieder angeboten werden.

Auf der Sitzung der SKM am 02.07.2011 ist die Fachgruppe Kristallographie als Mitglied in die Sektion Kondensierte Materie aufgenommen worden.

Die Fachgruppe Kristallographie hat zurzeit 239 Mitglieder (Stand 04.07.2011). Das ist ein Zuwachs von 7 Mitgliedern seit Januar 2011.

Termine der nächsten DPG-Tagungen der Sektion Kondensierte Materie (SKM):

- 2012: Berlin, 25. – 30.03.2012
- 2013: Regensburg, 10. – 15.03.2013
- 2014: Dresden, 31.03. – 04.04.2014

Leonore Wiehl, Frankfurt

ANLAGE ZUM
BERICHT DES VERTRETERS DER DGK
IN DER DPG

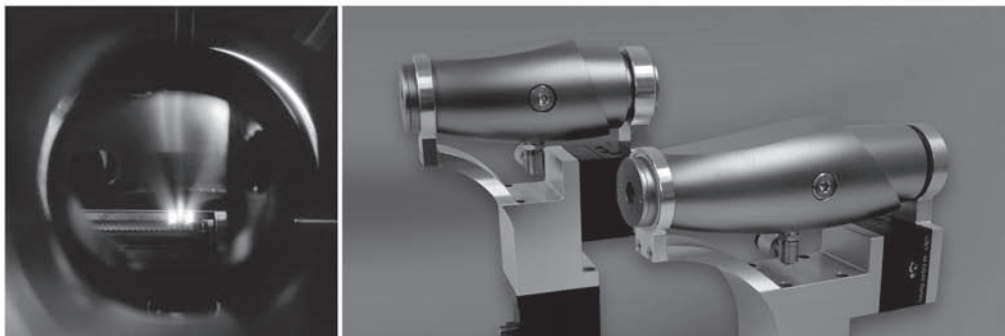
Der Bericht bezieht sich auf die Vorstandsratsitzung der DPG am 13. März 2011 in Dresden und einzelne Punkte, die seitdem bekannt wurden:

- Das „New Journal of Physics“ hat sich sehr gut entwickelt und erwirtschaftet einen Gewinn für die DPG. Die Beteiligung der DPG wird in der Web-Seite nur unzureichend sichtbar.
- Die Ausführungsbestimmungen zur Satzung der DPG wurden geändert. Unter anderem wurden die Vergabe von Ehrennadeln und die Einsetzung einer Nominierungskommission aufgenommen.
- Der 2. und 3. Bauabschnitt der Sanierung des Physikzentrums werden in Auftrag gegeben. Insbesondere betrifft dies die Sanierung der Zimmer in der dritten Etage. Dies wird durch die Beteiligung der VG-Wort, Spenden und Eigenmittel finanziert.
- Eine Studie zur Akzeptanz des Abschlusses Physik-Bachelor in der Industrie wurde erarbeitet. Dazu wurden Führungskräfte aus Fach- und Personalabteilungen von 28 Firmen befragt. Der Universitätsbachelor-Abschluss wird derzeit kritischer als derjenige der Fachhochschulen gesehen. In der Industrie wird der Universitätsbachelor-Abschluss in Physik als „unvollständig“ erachtet. Bedarf besteht für höher qualifizierte Physiker.
- Die Vergabe des Walter-Schottky-Preises ist für die nächste Zeit sichergestellt.
- Die junge DPG (jDPG) besteht seit fünf Jahren. Es gibt bereits 1200 Mitglieder organisiert in 32 Hochschulstandorten. Die „jungen“ Mitglieder der DPG zeigen großes Interesse an Exkursionen, die es erlauben, Forschung einmal außerhalb der eigenen Universität kennenzulernen. Im Juli 2011 fand erstmalig eine eigenständige Konferenz der jDPG statt.
- In einem Strategiepapier wurden Ideen zur Rolle und Organisation der „European Physical Society“ (EPS) formuliert, die in eine Reform der EPS einfließen sollen.
- Herr René Matzdorf wird für die Amtszeit vom 1. April 2011 bis zum 31. März 2013 zum DPG-Vorstandsmitglied für das Ressort „Bildung und wissenschaftlicher Nachwuchs“ gewählt.
- Die Heidelberger Professorin Johanna Stachel (Kern- und Teilchenphysikerin) wird neue Präsidentin der DPG ab April 2012.

Markus Braden, Köln

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 reflection
Up-grade of all common XRD systems
- Synchrotron optics from EUV to the hard X-ray region
- Nanometer-thin films fabricated by high precision large area deposition (8" diam. / 500 mm length)
- Thin film multi-element reference samples for XRF

AXO DRESDEN GmbH

Applied X-ray Optics – High Precision Deposition

Winterbergstr. 28 · 01277 Dresden · Germany
 phone: +49-351-83391-3249 · fax: +49-351-83391-3314
 contact@axo-dresden.de · www.axo-dresden.de



SATZUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V. (DGK)

(Stand: 21.09.2011)

Präambel

- §1 **Name, Sitz, Geschäftsjahr**
- §2 **Zweck der Gesellschaft**
- §3 **Gemeinnützigkeit**
- §4 **Mitgliedschaft**
- §5 **Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis**
- §6 **Rechte und Pflichten der Mitglieder**
- §7 **Mitgliedsbeiträge und Finanzierung**
- §8 **Organe der Gesellschaft**
- §9 **Die Mitgliederversammlung**
- §10 **Der Vorstand**
- §11 **Der engere Vorstand**
- §12 **Wahlen zum Vorstand**
- §13 **Nationalkomitee für Kristallographie**
- §14 **Der Beirat**
- §15 **Arbeitskreise und Kommissionen**
- §16 **Assoziierte Gesellschaften**
- §17 **Carl-Hermann-Medaille**
- §18 **Will-Kleber-Gedenkmünze**
- §19 **Max-von-Laue-Preis**
- §20 **Änderungen des Statutes und Auflösung der DGK**
- §21 **Haftung**

Präambel

Die Gründung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK) stellt die organisatorische Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Vereinigungen „Arbeitsgemeinschaft Kristallographie“ (AGKr) und „Vereinigung für Kristallographie“ (VFK) dar.

§1 Name, Sitz, Geschäftsjahr

1. Die Gesellschaft trägt den Namen „Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.“ (DGK) und ist im Vereinsregister eingetragen.
2. Die DGK ist eine juristische Person und hat ihren Sitz in Berlin.
3. Das Geschäftsjahr ist das Kalenderjahr.

§2 Zweck der Gesellschaft

1. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie erfüllt ihren Zweck in der Förderung der Wissenschaft und Forschung, sowie der Bildung.

2. Die Zielstellungen zur Realisierung des Zwecks sind dabei insbesondere:
 - die Förderung der kristallographischen Wissenschaften und der Forschung,
 - die Weiterentwicklung der Bildung und Lehre in der Kristallographie,
 - die Förderung und Weiterbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses.
3. Um diesen Zweck effizient erfüllen zu können, stellt sich die DGK unter anderem der Aufgabe, möglichst alle auf dem Gebiet der Kristallographie Tätigen auf freiwilliger Basis zusammenzuführen.
4. Der Zweck wird unter anderem verwirklicht durch:
 - Veranstaltung von Jahrestagungen zum umfassenden wissenschaftlichen Erfahrungsaustausch auf allen Gebieten der Kristallographie;
 - Veranstaltungen der Arbeitskreise wie wissenschaftliche Tagungen, Workshops und Kurse, insbesondere zu aktuellen Problemen von Lehre und Forschung der Kristallographie;
 - Veranstaltung von Workshops, Diskussionstagungen und Kursen zur Weiterbildung und fachlichen Qualifizierung junger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler auf allgemeinen und speziellen Gebieten der Kristallographie, auch gemeinsam mit fachnahen und assoziierten Gesellschaften;
 - Vergabe von Reisestipendien an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zur Teilnahme an Tagungen wie denen der IUCr und ECA, den Jahrestagungen der DGK sowie den Veranstaltungen der Arbeitskreise;
 - Herausgabe der Mitteilungen der DGK sowie der Berichte aus den Arbeitskreisen zur umfassenden Information der Mitglieder sowie der Allgemeinheit über alle Angelegenheiten der Kristallographie;
 - Ehrungen von verdienstvollen und hervorragenden Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf dem Gebiet der Kristallographie zum Beispiel mit der Carl-Hermann-Medaille, der Will-Kleber-Gedenkmünze und dem Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie, sowie dem Max-von-Laue-Preis für junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler;
 - Vertretung der Kristallographie in den nationalen und internationalen Einrichtungen sowie die Vertretung Deutschlands in den internationalen Vereinigungen und Organisationen, soweit Interessen der Kristallographie in Deutschland berührt sind.

§3 Gemeinnützigkeit

1. Die DGK verfolgt ausschließlich und unmittelbar gemeinnützige Zwecke im Sinne des Abschnitts „Steuerbegünstigte Zwecke“ der Abgabenordnung zur Förderung von Wissenschaft und Forschung.
2. Der Verein ist selbstlos tätig; er verfolgt nicht in erster Linie eigenwirtschaftliche Zwecke.
3. Mittel der Gesellschaft dürfen nur für die satzungsmäßigen Zwecke verwendet werden. Die Mitglieder erhalten keine Zuwendungen aus Mitteln der Gesellschaft.
4. Es darf keine Person oder Institution durch Ausgaben, die dem Zweck der Gesellschaft fremd sind, oder durch unverhältnismäßig hohe Vergütungen begünstigt werden.

§4 Mitgliedschaft

1. Die DGK umfasst:
 - persönliche Mitglieder (natürliche Personen),
 - unpersönliche Mitglieder,
 - Ehrenmitglieder.
2. Die persönliche Mitgliedschaft können erwerben: alle an der Kristallographie interessierten natürlichen Personen des In- und Auslandes ohne Rücksicht auf ihre Staatsangehörigkeit und ihren Wohnsitz.
3. Die unpersönliche Mitgliedschaft können erwerben: Wissenschaftliche Institute, Einrichtungen an Hochschulen, Firmen, Bibliotheken, Schulen, Behörden, Vereinigungen usw. mit Sitz im In- und Ausland.
4. Zur Aufnahme bedarf es für beide Kategorien des Vorschlages oder der Befürwortung durch zwei persönliche Mitglieder der DGK. Aufnahmeanträge sind an die Vorsitzende / den Vorsitzenden der DGK zu richten. Sie müssen schriftlich erfolgen.
5. Über die Aufnahme entscheidet der Vorstand der DGK. Die Entscheidung wird der Antragstellerin / dem Antragsteller mitgeteilt.
6. Ehrenmitglieder können Personen werden, die sich um die DGK hervorragende Verdienste erworben haben. Über die Ernennung entscheidet die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit in geheimer Abstimmung.
7. Die Mitgliedschaft erlischt durch Tod, Austritt, Streichung oder Ausschluss.
8. Die Austrittserklärung wird zum Ende des Geschäftsjahres, in dem die schriftliche Erklärung bei der Vorsitzenden / beim Vorsitzenden der DGK eingegangen ist, nur dann wirksam, wenn alle ausstehenden Beiträge beglichen sind.
9. Die Mitgliedschaft wird bei versäumter Beitragszahlung ein Jahr nach Fälligkeit gestrichen, sofern in dieser Zeit zweimal schriftlich ergebnislos gemahnt worden ist.
10. Den Ausschluss eines Mitgliedes kann der Vorstand auf begründeten Antrag beschließen, wenn es schuldhaft in grober Weise die Interessen der DGK verletzt. Vor dem Ausschluss ist dem betreffenden Mitglied Gelegenheit zur Äußerung zu geben. Der Ausschluss wird erst nach Bestätigung durch die Mitgliederversammlung wirksam.

§5 Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis

Die DGK verpflichtet ihre Mitglieder auf die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis. Hierzu gehört insbesondere, die grundlegenden Werte und Normen wissenschaftlicher Arbeit zu pflegen, im Handeln zu verwirklichen, für sie einzustehen und sie zu vermitteln, unter dem Gebot des wissenschaftlichen Kenntnisstandes zu arbeiten, alle Ergebnisse konsequent selbst anzuzweifeln und strikte Ehrlichkeit im Hinblick auf die Beiträge von Partnern, Konkurrenten und Vorgängern zu wahren. Mitglieder, die gegen gute wissenschaftliche Praxis verstoßen, handeln den Interessen der DGK entgegen.

§6 Rechte und Pflichten der Mitglieder

1. Alle persönlichen Mitglieder haben einfaches, gleiches, aktives und passives Wahl- und Stimmrecht. Das Gleiche gilt für Ehrenmitglieder.

2. Unpersönliche Mitglieder haben nur einfaches aktives Wahl- und Stimmrecht. Sie können dieses durch ein von ihnen benanntes persönliches Mitglied der DGK mit einer zusätzlichen Stimme als Vertreterin / Vertreter wahrnehmen lassen.
3. Die Mitglieder haben das Recht,
 - über die Tätigkeit der DGK, ihres Vorstandes sowie über wissenschaftliche Veranstaltungen informiert zu werden,
 - an den Veranstaltungen der DGK und der Arbeit ihrer Gremien teilzunehmen und mitzuwirken,
 - dem Vorstand Vorschläge zur Arbeit der DGK zu unterbreiten.
4. Die Mitglieder haben die Pflicht
 - das Statut der DGK anzuerkennen,
 - ihren Mitgliedsbeitrag termingerecht zu zahlen.
5. Die Rechte des Mitgliedes ruhen für das kommende Kalenderjahr, wenn das Mitglied zwei Jahre keinen Jahresbeitrag für die Gesellschaft entrichtet.

§7 Mitgliedsbeiträge und Finanzierung

1. Die DGK finanziert ihre Tätigkeit durch
 - Beiträge der Mitglieder,
 - Vermögen und dessen Erträge,
 - Zuschüsse und Spenden,
 - Einnahmen aus der Tätigkeit und dem Wirken der DGK.
2. Die Höhe des Jahresbeitrages wird von der Mitgliederversammlung festgesetzt. Eine Beitragsordnung regelt die Beitragszahlung.
3. Ehrenmitglieder sind von der Beitragspflicht befreit.
4. Studentische Mitglieder zahlen in der Regel einen reduzierten Beitrag.
5. Der Vorstand kann Beiträge ganz oder teilweise erlassen (z. B. bei Arbeitslosigkeit oder Erwerbsunfähigkeit).
6. Der Beitrag der unpersönlichen Mitglieder wird zwischen diesen und dem Vorstand frei vereinbart und kann auch nichtfinanzieller Art sein (z. B. Dienstleistungen).
7. Den Mitgliedern ist jährlich ein Kassenbericht vorzulegen.

§8 Organe der Gesellschaft

Die Organe der DGK sind

- die Mitgliederversammlung,
- der Vorstand,
- der engere Vorstand,
- das Nationalkomitee,
- der Beirat.

§9 Die Mitgliederversammlung

1. Die Mitgliederversammlung ist das höchste Organ der DGK und regelt alle für die Tätigkeit der DGK wesentlichen Fragen.
2. Ordentliche Mitgliederversammlungen finden einmal jährlich im Allgemeinen in Verbindung mit der Jahrestagung der DGK statt. Die Einladung erfolgt durch die Vorsitzende / den Vorsitzenden mindestens vier Wochen vorher unter Bekanntgabe der Tagesordnung.
3. Außerordentliche Mitgliederversammlungen finden statt
 - auf Beschluss der Mitgliederversammlung,
 - auf Beschluss des Vorstandes,
 - auf schriftlichen Antrag von mindestens 5 % der Mitglieder.
4. Eine außerordentliche Mitgliederversammlung ist nach dem Verfahren von Abs. (2) unter Angabe der Gründe zu einem Termin innerhalb von 3 Monaten nach dem Beschluss oder dem Eingang des Antrages einzuberufen, sofern kein späterer Termin beschlossen oder beantragt wurde.
5. Die Mitgliederversammlung hat folgende Rechte und Aufgaben:
 - Entgegennahme des Tätigkeitsberichtes des Vorstandes und des Kassenberichtes,
 - Entlastung des Vorstandes,
 - Wahl des Vorstandes und des Nationalkomitees,
 - Beschlussfassung über die Höhe der Mitgliedsbeiträge für das kommende Geschäftsjahr sowie über die Beitragsordnung,
 - Abstimmung über eingebrachte Änderungen des Statutes,
 - Entscheidung bei Beschwerden zur Aufnahme von Mitgliedern,
 - Bestätigung des Ausschlusses von Mitgliedern,
 - Ernennung von Ehrenmitgliedern,
 - Bestätigung der Bildung bzw. Auflösung von Arbeitskreisen sowie Beschlussfassung über die Arbeitskreisordnung,
 - Abstimmung über weitere Anträge, insbesondere über zukünftige Aufgaben und Aktivitäten der Gesellschaft,
 - Festsetzung von Ort und Termin der Jahrestagungen sowie Beschlussfassung über die Jahrestagungsordnung,
 - Wahl von zwei Kassenprüferinnen / Kassenprüfern für das folgende Geschäftsjahr.
6. Die Mitgliederversammlung ist beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so haben ihre Entschlüsse einen empfehlenden Charakter.

7. Die Mitgliederversammlung wird von der Vorsitzenden / vom Vorsitzenden, bei deren / dessen Verhinderung von der stellvertretenden Vorsitzenden / vom stellvertretenden Vorsitzenden, geleitet; sind beide verhindert, wählt die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit eine Versammlungsleiterin / einen Versammlungsleiter. Die Schriftführerin / der Schriftführer führt das Protokoll; bei ihrer / seiner Verhinderung wählt die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit eine Protokollführerin / einen Protokollführer.
8. Durch Beschluss der Mitgliederversammlung kann die vom Vorstand festgelegte Tagesordnung geändert und ergänzt werden.
9. Während der Behandlung eines Tagesordnungspunktes kann jedes Mitglied Anträge hierzu einbringen.
10. Abstimmungen erfolgen durch Handaufheben; wenn 10 % der erschienenen Mitglieder mit nicht ruhenden Rechten es verlangen, muss geheim abgestimmt werden. Ein Antrag gilt als angenommen, wenn mehr als 50 % der abgegebenen Stimmen dafür sind.
11. Beschlüsse sind unter Angabe des Ortes und der Zeit der Versammlung sowie der Abstimmungsergebnisse in einem Protokoll festzuhalten; das Protokoll wird von der Protokollführerin / vom Protokollführer und von der Versammlungsleiterin / dem Versammlungsleiter unterschrieben und allen Mitgliedern zugestellt.

§10 Der Vorstand

1. Der Vorstand der DGK führt die Geschäfte und regelt die Tätigkeit der DGK in der Zeit zwischen den Mitgliederversammlungen. Er ist an die Beschlüsse und Entschließungen der Mitgliederversammlung gebunden und dieser rechenschaftspflichtig.
2. Dem Vorstand der DGK gehören fünf stimmberechtigte Mitglieder an. Dies sind: die Vorsitzende / der Vorsitzende, die stellvertretende Vorsitzende / der stellvertretende Vorsitzende, die Schriftführerin / der Schriftführer, die Schatzmeisterin / der Schatzmeister und die Vorsitzende / der Vorsitzende des Nationalkomitees. Des Weiteren gehören dem Vorstand je eine Vertreterin / ein Vertreter der assoziierten Gesellschaften als nicht stimmberechtigte Mitglieder mit Rede- und Antragsrecht an.
3. Die Aufgaben des Vorstandes sind:
 - Erarbeitung von allgemeinen Grundsätzen,
 - Bestellung von Kommissionen der DGK,
 - Beschlüsse über Empfehlungen und Stellungnahmen zu Fragen, die die Kristallographinnen / Kristallographen in fachlicher, beruflicher und gesellschaftlicher Hinsicht betreffen,
 - Auswahl von Vertreterinnen / Vertretern der DGK für in- und ausländische sowie internationale Gremien,
 - Bestellung von Vertreterinnen / Vertretern der DGK bei den assoziierten Gesellschaften,
 - Vorschlag zur Beitragsordnung sowie zu anderen Ordnungen der DGK,
 - Einberufung des Beirates,
 - Vorbereitung der Jahrestagungen,
 - Vorbereitung der Mitgliederversammlungen.

4. Der Vorstand kann eine außerordentliche Mitgliederversammlung einberufen.
5. Der Vorstand hat ein Vorschlagsrecht für die neu zu wählenden Mitglieder des Vorstandes.
6. Beschlüssen des Vorstandes müssen mindestens drei seiner stimmberechtigten fünf Mitglieder zustimmen.
7. Der Vorstand benennt folgende Mitglieder des Beirates:
 - Wissenschaftskolleg Kristallographie,
 - Redakteurin / Redakteur der Mitteilungen der DGK,
 - Verantwortliche für die Öffentlichkeitsarbeit,
 - die / den Verantwortliche / Verantwortlichen für die Homepage der DGK,
 - die / den Redakteurin / Redakteur der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK.
8. Die Vorsitzende / der Vorsitzende bearbeitet die folgenden Aufgaben federführend:
 - Durchführung der Beschlüsse der Mitgliederversammlung der DGK,
 - Einberufung der Mitgliederversammlung unter Angabe der Tagesordnung und Einladung zu den wissenschaftlichen Tagungen im Einvernehmen mit der örtlichen Tagungsleiterin / dem örtlichen Tagungsleiter,
 - die Vorsitzende / der Vorsitzende kann unter Herbeiführung eines Vorstandsbeschlusses den Vorstandsmitgliedern Aufgaben übertragen.
9. Die Schriftführerin / der Schriftführer führt die Protokolle der Mitgliederversammlung und der Sitzungen des Vorstandes sowie das Mitgliederverzeichnis.
10. Die Schatzmeisterin / der Schatzmeister ist verantwortlich für die Vermögensverwaltung und den ordnungsgemäßen Zahlungsverkehr der DGK. Sie / er kontrolliert den Eingang der Mitgliedsbeiträge und ist zuständig für das Mahnwesen. Sie / er erstellt jährlich einen prüfungsfähigen Kassenbericht.

§11 Der engere Vorstand

1. Der engere Vorstand ist der Vorstand im Sinne des §26 BGB. Er vertritt die DGK gegenüber Dritten im rechtsgeschäftlichen Verkehr, gegenüber den Behörden, vor Gericht. Die Vorstandsmitglieder sind von den Beschränkungen des §181 BGB (Insichgeschäft) befreit.
2. Der engere Vorstand der DGK besteht aus der Vorsitzenden / dem Vorsitzenden und der stellvertretenden Vorsitzenden / dem stellvertretenden Vorsitzenden.
3. Die Vorsitzende / der Vorsitzende und die stellvertretende Vorsitzende / der stellvertretende Vorsitzende sind einzelvertretungsberechtigt. Im Falle einer Meinungsverschiedenheit entscheidet die Vorsitzende / der Vorsitzende.

§12 Wahlen zum Vorstand

1. Die Vorsitzende / der Vorsitzende, die stellvertretende Vorsitzende / der stellvertretende Vorsitzende, die Schriftführerin / der Schriftführer und die Schatzmeisterin / der Schatzmeister werden für eine Periode von 3 Jahren auf einer gemäß §9 Abs. (6) beschlussfähigen Mitgliederversammlung gewählt. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl gemäß Abs. (8) durchgeführt. Die Vorsitzende / der Vorsitzende des Nationalkomitees wird von den Mitgliedern des Nationalkomitees gemäß §13 Abs. (4) gewählt.
2. Die Wahlen erfolgen geheim und schriftlich für die einzelnen Funktionen gesondert in der in Abs. (1) genannten Reihenfolge und werden von der Leiterin / vom Leiter der Mitgliederversammlung geleitet.
3. Der Vorschlag des amtierenden Vorstandes für die Wahlen ist spätestens 24 Stunden vor der Wahl bekannt zu geben (z. B. durch Aushang bei der Jahrestagung). Weitere Wahlvorschläge aus dem Kreis der Mitglieder sind gleichfalls bekannt zu geben. Wahlvorschläge können auch noch während der Mitgliederversammlung eingebracht werden. Die Zustimmung der vorgeschlagenen Kandidatinnen / Kandidaten zu ihrer Kandidatur muss vor der Wahlhandlung gesichert sein.
4. Eine unmittelbare Wiederwahl der Vorsitzenden / des Vorsitzenden und der stellvertretenden Vorsitzenden / des stellvertretenden Vorsitzenden in ihre bisherige Funktion ist nicht zulässig.
5. Gewählt ist, wer die absolute Mehrheit der abgegebenen Stimmen erhält.
6. Erreicht keine Kandidatin / kein Kandidat die absolute Mehrheit, so findet in einem zweiten Wahlgang eine Stichwahl zwischen den beiden Kandidatinnen / Kandidaten mit der größten Stimmzahl statt. Gewählt ist, wer die größte Anzahl Stimmen erhält. Bei Stimmgleichheit wird die Stichwahl wiederholt. Im Fall nur einer Kandidatin / eines Kandidaten wird diese / dieser in einem zweiten Wahlgang erneut zur Abstimmung gestellt und ist mit der relativen Mehrheit der Ja-Stimmen (gegenüber den Nein-Stimmen) gewählt.
7. Führen die Wahlgänge zu keinem positiven Ergebnis, so kann die Wahl mit neuen Wahlvorschlägen aus dem Kreis der Mitgliederversammlung wiederholt werden. Die Mitgliederversammlung kann auch die Durchführung einer Briefwahl gemäß §12 Abs. (8) zur Besetzung der betreffenden Vorstandsfunktion beschließen. Zu dieser Briefwahl sollen auch Kandidatinnen / Kandidaten der bisherigen Wahlgänge erneut zur Wahl gestellt werden.
8. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl durchgeführt, für deren Durchführung die Vorsitzende / der Vorsitzende verantwortlich ist. Die Briefwahl ist geheim. Die Wahlunterlagen mit den Namen der auf der Mitgliederversammlung genannten und evtl. noch weiterer vorgeschlagener Kandidatinnen / Kandidaten werden den Mitgliedern brieflich innerhalb einer Frist von einem Monat zugesandt. Die Rückantworten mit der Stimmabgabe sind innerhalb einer Frist von 6 Wochen gerechnet vom Datum des Poststempels auf den Wahlunterlagen an die Vorsitzende / den Vorsitzenden zu schicken. Die Stimmen werden von zwei vom Vorstand beauftragten Mitgliedern innerhalb von 2 Wochen nach Einsendeschluss ausgezählt. Gewählt sind die Kandidatinnen / Kandidaten mit der relativen Mehrheit der Ja-Stimmen gegenüber den Nein-Stimmen. Bei Stimmgleichheit entscheiden die Auszählenden durch Los. Das Wahlergebnis wird allen Mitgliedern innerhalb von 4 Wochen nach der Auszählung brieflich bekannt gegeben.

9. Die Amtsperiode der neu gewählten Mitglieder des Vorstandes beginnt mit dem Ende der Mitgliederversammlung, auf der sie gewählt wurden. Sie treten ihr Amt unmittelbar danach an. Bei einer Briefwahl beginnt die Amtsperiode nach Abschluss des Wahlvorgangs.
10. Scheidet ein gewähltes Mitglied des Vorstandes vorzeitig aus, so sind zum frühestmöglichen Zeitpunkt Nachwahlen durchzuführen. Der Vorstand kann durch Beschluss bis zur nächsten Mitgliederversammlung eine kommissarische Vertreterin / einen kommissarischen Vertreter für die Ausgeschiedene / den Ausgeschiedenen benennen. Diese / dieser besitzt die gleichen Rechte wie das ausgeschiedene Vorstandsmitglied. Als kommissarische Vorsitzende / kommissarischer Vorsitzender kann nur ein gewähltes Mitglied des Vorstandes eingesetzt werden. Die Amtszeit der durch Nachwahlen bestimmten Vorstandsmitglieder erstreckt sich auf den Rest der Amtsperiode der Ausgeschiedenen / des Ausgeschiedenen. Für die durch Nachwahlen oder kommissarische Einsetzung neu bestimmten Vorstandsmitglieder ist eine einmalige unmittelbare Wiederwahl in ihre bisherige Funktion zulässig.

§13 Nationalkomitee für Kristallographie

1. Aufgabe des Nationalkomitees für Kristallographie (NK) ist es, die Beziehung der DGK zur International Union of Crystallography (IUCr) und zur European Crystallographic Association (ECA) zu pflegen.
2. Das Nationalkomitee besteht aus sechs gewählten Mitgliedern und der Vorsitzenden / dem Vorsitzenden der DGK.
3. Alle drei Jahre werden jeweils drei Mitglieder des NK für eine Periode von 6 Jahren auf einer gemäß §9 Abs. (6) beschlussfähigen Mitgliederversammlung zusammen mit den Wahlen zum Vorstand der DGK gewählt, wobei wie in §12 ausgeführt zu verfahren ist. Eine unmittelbare Wiederwahl ist nicht zulässig. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl zusammen mit der Briefwahl zum Vorstand gemäß §12 (8) durchgeführt. Im Falle von 4 oder mehr Kandidatinnen / Kandidaten erfolgt die Wahl aller 3 neuen NK-Mitglieder zusammen in einem Wahlgang durch geheime Abgabe von bis zu drei Namen. Gewählt sind die 3 Kandidatinnen / Kandidaten mit den meisten Stimmen. Bei Stimmengleichheit von 2 Kandidatinnen / Kandidaten mit den drittmeisten Stimmen erfolgt zwischen diesen beiden eine Stichwahl. Im Falle von nur 3 Kandidatinnen / Kandidaten wird jede Kandidatin / jeder Kandidat einzeln zur Abstimmung gestellt. Gewählt ist, wer die relative Mehrheit der Ja-Stimmen (gegenüber den Nein-Stimmen) erhält. Die Ausführungen des §12 Abs. (7), (8), (9), (10) gelten sinngemäß.
4. Das Nationalkomitee wählt seine Vorsitzende / seinen Vorsitzenden und die Vertreterin / den Vertreter in der ECA für eine Periode von 3 Jahren aus dem Kreis seiner Mitglieder auf der nach jeder Wahl stattfindenden konstituierenden Sitzung des Nationalkomitees mit einfacher Mehrheit. Bei Stimmengleichheit entscheidet die Stimme der Vorsitzenden / des Vorsitzenden der DGK.

§14 Der Beirat

1. Der Beirat ist ein beratendes Gremium für alle Angelegenheiten der DGK.
2. Dem Beirat gehören an:
 - die Mitglieder des Nationalkomitees,
 - die Sprecherinnen / Sprecher der Arbeitskreise,
 - die Mitglieder des Wissenschaftskollegs Kristallographie,
 - die Verantwortlichen für die aktuellen Jahrestagungen,
 - die Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit,
 - die / der Redakteurin / Redakteur der Mitteilungen der DGK,
 - die / der Verantwortliche für die Homepage der DGK,
 - die / der Redakteurin / Redakteur der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK.
3. Der Vorstand kann Mitgliedern des Beirates Aufgaben übertragen, für deren Durchführung die jeweiligen Mitglieder dem Vorstand rechenschaftspflichtig sind.
4. Der Beirat wird durch den Vorstand einberufen. Bei Bedarf kann die / der Vorsitzende entsprechende Mitglieder des Beirates zur Teilnahme an der Vorstandssitzung einladen.
5. Die Mitglieder des Beirates erhalten zu ihrer Information die Einladungen (nebst Tagesordnung) der Sitzungen des Vorstandes zugesandt. Sie können (mit beratender Stimme) zu den Sitzungen des Vorstandes erscheinen, um ihre Angelegenheiten zur Beratung zu stellen.
6. Das Wissenschaftskolleg berät den Vorstand in Fragen von grundsätzlicher Bedeutung, die das Gesamtgebiet der Kristallographie in Forschung, Lehre und Publikationen sowie alle Aspekte der Arbeit der Gesellschaft betreffen. Der Vorstand kann dem Wissenschaftskolleg dazu konkrete Aufgaben und Fragestellungen übertragen.
7. Der Redakteur der Mitteilungen gibt im Auftrag der DGK eigenverantwortlich die Mitteilungen heraus. Er wirbt durch Vergabe von Anzeigen in den Mitteilungen finanzielle Mittel ein, um damit anteilig die Eigenkosten derselben zu begleichen.
8. Die Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit informieren die Mitglieder der DGK sowie die fachnaher und assoziierter Gesellschaften, aber auch die allgemeine Öffentlichkeit aktuell über alle Veranstaltungen der DGK einschließlich die der Arbeitskreise sowie über allgemein interessierende Ereignisse aus Forschung und Lehre der Kristallographie, über Möglichkeiten der Vergabe von Preisen und Ehrungen der DGK und die Bekanntgabe der Preisträger. Diese Nachrichten werden über die Homepage, die Mitteilungen, die Publikationsorgane fachnaher und assoziierter Gesellschaften sowie gegebenenfalls auch Presse, Rundfunk und Fernsehen weitergegeben.
9. Die / der Verantwortliche der Homepage der DGK aktualisiert technisch und inhaltlich die Homepage.
10. Die / die Redakteurinnen / Redakteure der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK geben im Auftrag des Vorstandes der DGK die Berichte aus den Arbeitskreisen heraus. Eingereichte Manuskripte werden von ihnen hinsichtlich des Inhaltes und der Form geprüft und bei Eignung in einheitlicher Form zum Druck gegeben und zum Vertrieb bereitgestellt.

§15 Arbeitskreise und Kommissionen

1. In der DGK bestehen Arbeitskreise, die sich bestimmten Gebieten der Kristallographie widmen. Die Arbeitskreise sollen die wissenschaftliche Entwicklung auf ihrem Gebiet eigenverantwortlich vorantreiben. Eine Ordnung regelt die Aufgaben und Verantwortlichkeiten der Arbeitskreise.
2. Zur Bildung eines neuen Arbeitskreises ist ein formloser Antrag an den Vorstand notwendig, der von mindestens 20 Mitgliedern der Gesellschaft unterschrieben ist. Die Gründung eines Arbeitskreises bedarf der Zustimmung der Mitgliederversammlung auf Grund einer Empfehlung durch den Vorstand.
3. DGK-Mitglieder bekunden durch die formlose schriftliche Erklärung gegenüber der Sprecherin / dem Sprecher ihr Interesse an einer Mitarbeit im Arbeitskreis (AK) und gelten damit als Mitglieder des AKs. Mitgliedsbeiträge werden dafür nicht erhoben. Ein Mitglied kann mehreren Arbeitskreisen angehören.
4. Die Sprecherinnen / Sprecher der Arbeitskreise sind gegenüber den Organen der DGK berichtspflichtig. Auf Grund dieser Berichte empfiehlt der Vorstand der Mitgliederversammlung, Arbeitskreise weiter bestehen zu lassen oder aufzulösen. Die Auflösung bedarf der Zustimmung der Mitgliederversammlung.
5. Mit verwandten wissenschaftlichen Gesellschaften können gemeinsame Arbeitskreise gebildet werden. Einzelheiten, insbesondere hinsichtlich der Mitgliedschaft und der Wahlen der Sprecherinnen / Sprecher, werden in entsprechenden Vereinbarungen geregelt.
6. Für spezielle Aufgaben von begrenzter Dauer können vom Vorstand der DGK Kommissionen eingesetzt werden.

§16 Assoziierte Gesellschaften

1. Der Kontakt zu verwandten wissenschaftlichen Gesellschaften soll nach Möglichkeit in Form von Assoziierungsvereinbarungen hergestellt werden, die gegenseitige Vertretung in den Vorständen oder entsprechenden Gremien vorsehen.
2. Die Vertreterinnen / Vertreter der DGK bei den assoziierten Gesellschaften werden vom Vorstand für 3 Jahre benannt. Die Art und Weise, in der die assoziierten Gesellschaften ihre Vertreterin / ihren Vertreter für den Vorstand der DGK benennen, bleibt der jeweiligen Gesellschaft überlassen. Die Amtszeit der Vertreterinnen / Vertreter der assoziierten Gesellschaften wird durch Vereinbarung geregelt.

§17 Carl-Hermann-Medaille

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht an herausragende Forscherpersönlichkeiten die Carl-Hermann-Medaille. Einzelheiten werden durch eine Ordnung geregelt.

§18 Will-Kleber-Gedenkmünze

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht eine Gedenkmünze, die dem Andenken an Will Kleber gewidmet ist, mit der hervorragende wissenschaftliche Beiträge auf ausgewählten Gebieten der Kristallographie ausgezeichnet werden sollen. Einzelheiten werden durch eine Ordnung geregelt.

§19 Max-von-Laue-Preis

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht zur Förderung von Wissenschaft und Forschung in der Regel jährlich den Max-von-Laue-Preis an Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler, die sich durch hervorragende wissenschaftliche Arbeiten auf dem Gebiet der Kristallographie im weitesten Sinne auszeichnen. Einzelheiten dazu regelt die Ordnung für den Max-von-Laue-Preis.

§20 Änderung des Statutes und Auflösung der DGK

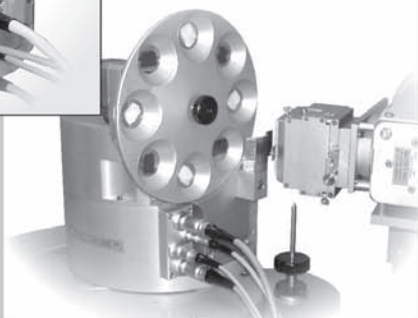
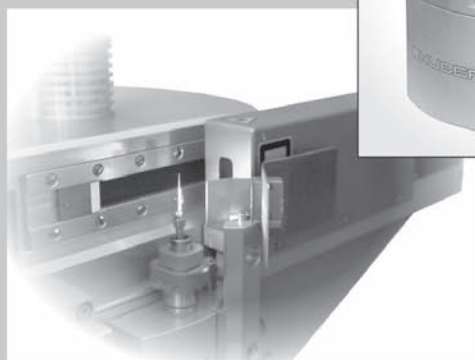
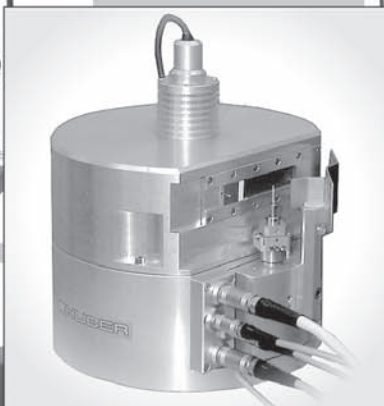
1. Änderungen des Statutes können nach vorhergehender Beratung im Vorstand auf der Mitgliederversammlung beschlossen werden, wenn dies in der Tagesordnung vermerkt und der Wortlaut der geplanten Änderungen mit der Einladung bekannt gegeben worden ist. Anträge auf Änderung des Statutes müssen den Mitgliedern mindestens 4 Wochen vor der entscheidenden Versammlung bekannt gegeben werden.
2. Für eine Änderung des Statutes ist das positive Votum von 2/3 der Anwesenden einer beschlussfähigen Mitgliederversammlung erforderlich.
3. Die Auflösung der DGK kann erfolgen, wenn sie vom Vorstand beraten und mit mindestens 2/3 der stimmberechtigten Mitglieder auf einer beschlussfähigen Mitgliederversammlung beschlossen wird. Der geplante Beschluss wird nur wirksam, wenn bei einer anschließenden schriftlichen Befragung entsprechend §12 Abs. (8) mehr als 50 % der persönlichen Mitglieder zustimmen.
4. Bei der Auflösung oder Aufhebung der Gesellschaft oder bei Wegfall ihres bisherigen Zweckes fällt das Vermögen der Gesellschaft nach Zustimmung des zuständigen Finanzamtes an eine Körperschaft des öffentlichen Rechts oder eine andere steuerbegünstigte Körperschaft zwecks Verwendung für die Förderung von Wissenschaft und Forschung.

§21 Haftung

1. Für Schäden, die Dritten durch das Handeln der Organe oder Vertreter der DGK in Ausübung ihrer Tätigkeit für die DGK entstehen, ist diese nach den Vorschriften des Zivilrechts verantwortlich. Ein Schadenersatzanspruch richtet sich gegen die DGK.
2. Die DGK haftet höchstens mit ihrem Vermögen. Die Mitglieder haften nicht mit ihrem persönlichen Vermögen für Ansprüche gegen die DGK.
3. Mitglieder des Vorstandes oder andere Bevollmächtigte, die ihre Befugnisse überschreiten, sind der DGK für einen dadurch entstandenen Schaden persönlich verantwortlich.

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° (asymmetric) transmission, 0° to 100° 2-theta
- ✓ Bulk samples in 17° (fixed grazing incidence) reflection, 50° to 150° 2-theta
- ✓ Plane foil or capillary samples. 8-fold sample changer for plane foil samples
- ✓ Vertical mount for liquids, 0° to 20° (adjustable grazing incidence) reflection
- ✓ Focussing monochromatic radiation, $K\alpha_1$ stripping not required
- ✓ Range of Bragg angles 100° 2-theta, 20001 steps @ 0.005°
- ✓ 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

Full line of components for science and industry

X-ray sources and beam modules

Leading With Innovation



MicroMax™-003 beam modules

Detectors for X-ray applications



Xsight™ Micron CCD
1 μ m resolution



Saturn A200
200 x 200 mm field of view



Xsight+ CCD
easy monitoring of X-ray beam



Triton
multiwire detector

Rotary vacuum feedthroughs

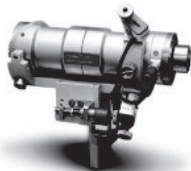


UHV ferrofluidic seal in 'Hot-Wall' design

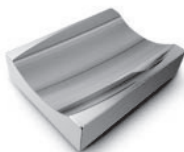


Superseal
the low-cost-optimized alternative

Multilayer and crystal optics 4 eV to 100 keV



Remote controlled optics



Multilayer flat or curved
for laboratory or synchrotron



Multilayer
Schwarzschild optics

Please come and challenge us!

Rigaku

Rigaku Innovative Technologies
phone: 248-232-6400 e-mail: info@rigaku.com

www.rigaku.com

ORDNUNG ZUR ORGANISATION UND DURCHFÜHRUNG DER JAHRESTAGUNGEN DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V. (DGK)

(Stand: 21.09.2011)

1. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie führt in der Regel jährlich eine Jahrestagung durch.
2. Die Jahrestagung dient dem wissenschaftlichen Erfahrungs- und Gedankenaustausch sowie der Weiterbildung und erfüllt die wissenschaftlichen und gemeinnützigen Zwecke nach §2 der Satzung im weitesten Sinne.
3. Der Vorstand beauftragt jeweils ein oder mehrere Mitglieder der DGK, die Jahrestagung eigenverantwortlichen zu veranstalten (im weiteren Veranstalter genannt).
4. Inhaltliche Schwerpunkte der Jahrestagung werden vom Veranstalter unter Berücksichtigung der internationalen wissenschaftlichen Tendenzen der Kristallographie und verwandter Fachgebiete in Abstimmung mit dem Vorstand festgelegt.
5. Der Veranstalter gibt Tagungsort und -datum rechtzeitig bekannt und ruft zum Einreichen wissenschaftlicher Beiträge auf.
6. Die Beiträge sollen vom Veranstalter oder fachlich kompetenten Vertretern bewertet sowie begutachtet und in die wissenschaftlichen Schwerpunkte der Tagung als Vorträge oder Poster eingeordnet werden.
7. Die wissenschaftlichen Beiträge der Teilnehmer sind vom Organisator in geeigneter und unmittelbar lesbarer Form zitierfähig zu publizieren (z. B. Supplement der Zeitschrift für Kristallographie) und allen Teilnehmern rechtzeitig zur Nutzung auf der Jahrestagung zur Verfügung zu stellen. Die Autoren sind aufgefordert, präsentierte Strukturen zeitnah in geeigneten Datenbanken zu hinterlegen.
8. Die Jahrestagung finanziert sich anhand optimaler Wirtschaftsführung selbst durch
 - Erhebung eines Unkostenbeitrags, den jeder Teilnehmer zu zahlen hat (Mitglieder der DGK mit vollen Rechten bezahlen einen um den jeweiligen Jahresbeitrag verminderten Unkostenbeitrag),
 - Einnahmen aus auf der Jahrestagung durchzuführenden fachnahen Ausstellungen, Werbung u. ä.,
 - Zuschüsse und Zuwendungen Dritter, zu denen der Veranstalter anregen soll.
9. Der Veranstalter kann Dritte – insbesondere unter dem Aspekt der Kostenminimierung – beauftragen, Aufgaben zur Organisation und Durchführung der Jahrestagung zu übernehmen. Vertragliche Vereinbarungen dazu bedürfen der Genehmigung des Vorstands.
10. Arbeitskreise der DGK können ihre Veranstaltungen – auf Antrag beim Veranstalter – während der Jahrestagung durchführen, wobei der Veranstalter ihnen je nach den Gegebenheiten Räumlichkeiten und Technik bereitstellt.

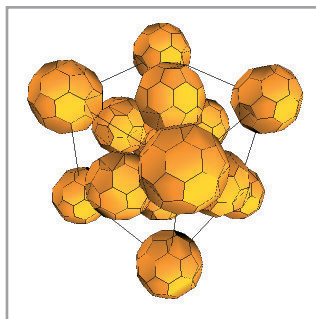
11. Der Veranstalter hält Räumlichkeiten entsprechend dem Zweck zur Durchführung der Mitgliederversammlung sowie für Ehrungen und Preisvergaben vor.
12. Der Gemeinschaftsabend ist ein Bestandteil der Jahrestagung und sollte der gesellschaftliche Höhepunkt sein.
13. Der Veranstalter ist dem Vorstand bezüglich wissenschaftlichen Inhalts, Organisation und Durchführung der Jahrestagung sowie hinsichtlich der finanziellen Mittel rechenschaftspflichtig.

TOTAL X-RAY POWDER PATTERN ANALYSIS

HighScore and HighScore Plus

Comprehensive powder diffraction analysis software

With HighScore and HighScore Plus the analysis of any X'ray powder diffractogram is easier than ever. Instead of a bunch of modules or individual plugins others provide, PANalytical completely integrated all tasks into a standard, MS-Office alike user interface.



- Supports all databases from different suppliers: from premium quality ICDD databases over the PAN=ICSD database to free alternatives downloadable from the internet.
- Fast and stable profile fitting with a BCPE solver. Supports pseudo-VOIGT, VOIGT and PEARSON-7 profile functions.
- Line profile analysis is now available for single peaks or multiple peaks (WILLIAMSON-HALL plot).



PANalytical GmbH
Nürnberger Straße 113
D-34123 Kassel
T +49 (0)561 5742 0
F +49 (0)561 5742 500
www.panalytical.de
info.de@panalytical.com

KURZBERICHTE DER REISESTIPENDIATEN ZUM XXII. IUCR-KONGRESS IN MADRID

KURZBERICHT VON JOHANNES BAUER (GOETHE-UNIVERSITÄT FRANKFURT AM MAIN)

Ich bin seit dem Abschluss meines Chemiestudiums als Doktorand in der Arbeitsgruppe Kristallographie bei Prof. Dr. B. Winkler an der Goethe-Universität in Frankfurt am Main beschäftigt. Ich befasse mich dort mit der Entwicklung eines Verfahrens zur Temperaturbestimmung in Diamantstempelzellen. Die Teilnahme an einer großen internationalen Konferenz, wie dem IUCr-Kongress, ermöglicht mir, die Ergebnisse meiner Arbeit zu präsentieren und mit anderen Wissenschaftlern aus aller Welt zu diskutieren. Mein Posterbeitrag beschäftigte sich mit der Messung der Lebenszeit einer Fluoreszenzlinie von Rubin bei hohen Drücken und Temperaturen und der Möglichkeit, die Fluoreszenzlebenszeit zur Bestimmung der Temperatur zu nutzen.

Der Besuch der Konferenz bot mir natürlich die Möglichkeit, interessante Vorträge über die Entwicklungen auf meinem Forschungsgebiet der Hochdruck-Kristallographie zu besuchen und interessante neue Kenntnisse zu erwerben. Doch mindestens genauso spannend und interessant waren für mich die Vorträge und Poster, die sich mit für mich teilweise vollkommen fremden Themen aus Materialwissenschaften, Biologie und neuen Strahlungsquellen aber auch dem Thema Lehre befassten. Das umfangreiche und sehr breit gefächerte Programm bietet einem jungen Wissenschaftler eine gute Möglichkeit zu einem „Blick über den eigenen Tellerrand hinaus“. Die Kristallographie stellte sich mir einmal mehr als ein Bindeglied aller unterschiedlichen Naturwissenschaften dar. Die großartigen Plenarvorträge und auch das nicht-wissenschaftliche Rahmenprogramm machten den Besuch zu einer eindrucksvollen Erfahrung.

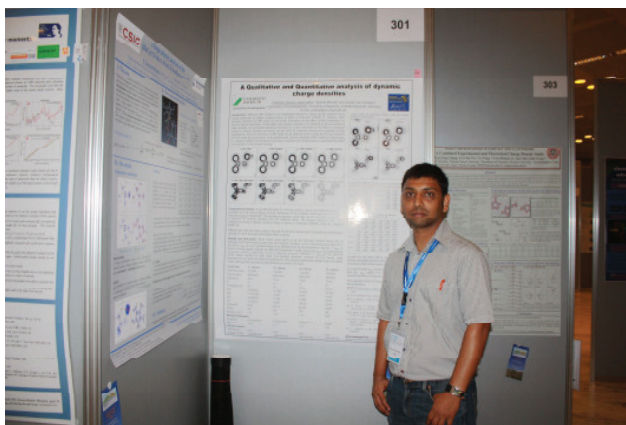
Für die großzügige finanzielle Unterstützung meiner Teilnahme an der IUCr-Tagung seitens der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie möchte ich mich an dieser Stelle noch einmal herzlich bedanken.

KURZBERICHT VON PRATHAPA SIRIYARA JAGANNATHA (UNIVERSITÄT BAYREUTH)

I very much appreciate the Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) for kindly providing me the bursary to attend the 22nd IUCr congress (2011, 22nd to 30th August) at Madrid, Spain. The congress has given me the opportunity to present my work in the form of a poster. The poster entitled “A Qualitative and Quantitative Analysis of Dynamic Charge Densities” describing the effect of finite temperature on the charge density distribution. The experimental electron densities are always dynamic in nature. Dynamic densities can be obtained by the convolution of static densities and probability distribution functions from an electron density model. Dynamic densities of multipole models have been computed by the inverse fast Fourier transform (FFT) of model structure factors. In the present work, dynamic densities of α -Glycine and D,L-Serine at different temperatures have been computed and characterized to understand the effect of temperature on charge density distribution. The effect of temperature on the densities and Laplacians at the bond critical points are analyzed and presented using tables and figures of electron density and dynamic deformation densities.

The congress was conducted in a very organized manner and it offered plenty of talks from the scientists across the world from different fields of crystallography. There were plenary lectures, keynote lectures, special sessions about all major fields of crystallography including the plenary lecture of Thomas A. Steitz, Venkatraman Ramakrishnan, Ada Yonath (Nobel laureates in 2009). Approximately 2800 participants from ~70 different countries have participated in the congress. There were approximately 600 talks and 1500 posters from 98 different micro symposiums. There was also a software fayre, which was very useful. The micro symposium on charge density, for example, descriptors of electronic structure and chemical bonding and advanced approaches in charge density analysis and derived properties were very interesting. The keynote lecture of Bo Brummerstedt Iversen on “charge densities and materials crystallography” and the talk by Philip Coppens on the time-resolved X-ray diffraction experiments were excellent.

By presenting the poster in the congress, I had the opportunity to discuss about my work with many eminent personalities across the globe from the charge density community. Many suggestions and ideas for future prospective work have been exchanged. The congress gave the platform to all international researchers to meet, discuss and present their work.



KURZBERICHT VON KEVIN KELLER (TU BERGAKADEMIE FREIBERG)

Vom 22. bis 30. August 2011 fand in Spaniens Hauptstadt Madrid der 22. Kongress und die Hauptversammlung der IUCr statt. Die Teilnehmer reisten aus aller Welt an, um an diesem großen und wichtigen Kongress teilzunehmen. Besonders bemerkenswert war der hohe Anteil an jungen Wissenschaftlern, denen die Gelegenheit gegeben wurde, ihre Ergebnisse und Erfahrungen mit anderen Wissenschaftlern zu teilen.

Bereits am ersten Abend wurde zur Eröffnungsveranstaltung der Ewald-Preis für besondere Leistungen im Bereich der Kristallographie an Carmelo Giacobbo, Eleanor Dodson und George M. Sheldrick verliehen. Danach bestand die Möglichkeit des Austauschs mit Kollegen beim Willkommens-Cocktail. Die wissenschaftlichen Präsentationen an den sieben folgenden Tagen waren breit gefächert in allen Bereichen der Kristallographie und zeigten neben den hervorragenden Forschungsarbeiten auch neuste Trends und Methoden der Strukturanalyse, sowie die Vielfalt der Kristallographie. Drei Posterpräsentationen an jeweils zwei Tagen, gaben weitere Möglichkeiten der Darstellung von Arbeitsergebnissen und boten oftmals Gelegenheit zum direkten Austausch mit anderen Wissenschaftlern. Zum Abschluss des Kongresses wurden die besten Poster mit verschiedenen Preisen geehrt. Um sich weiterzubilden bzw. zum fachlichen Austausch wurden Workshops und tägliche Software-Foren durchgeführt, bei denen man direkt mit den Programmentwicklern ins Gespräch kommen konnte. Im Ausstellungsbereich konnte man sich über Geräte und neuste Produktentwicklungen der Hersteller, Großforschungseinrichtungen, kristallographische Vereinigungen, sowie kommende Tagungen informieren.

Neben dem wissenschaftlichen Programm sorgte das kulturelle Programm für eine zusätzliche Bereicherung. Neben Folklore & Ballett und einem Konferenzdinner im botanischen Garten, gab es eine Vielzahl von Exkursionen in Madrid und im Umland.

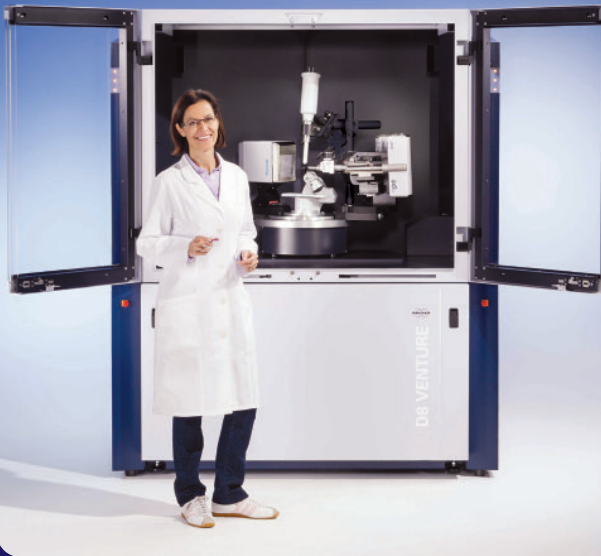
Die hervorragende Organisation der spanischen Kollegen, die exzellenten und vielseitigen wissenschaftlichen Beiträgen, sowie das besondere Flair von Madrid und Spanien machten diesen Kongress zu einem gelungenen Ereignis. Mit diesem Rückblick kann man schon freudig das 23. Treffen 2014 in Montreal (Kanada) erwarten.



Municipal Conference Centre



Three Wishes Granted...



The new D8 VENTURE with PHOTON 100

- High Performance
- Low Maintenance
- Brightest Microfocus

The D8 VENTURE is the perfect answer to all your questions in single crystal X-ray structure determination. The D8 VENTURE features excellent sample access and visibility. The patented doors either can be opened in a sliding-door-mode or as swinging doors. In addition to single source configurations the D8 VENTURE accommodates dual wavelength configurations. Based on the principles of DAVINCI.DESIGN it is engineered with high modularity from best-in-class components.

www.bruker.com

SC-XRD

Innovation with Integrity

KURZBERICHT VON MARCO KLOOS (UNIVERSITÄT LEIPZIG)

The 2011 IUCr Congress took place in the capital of Spain, Madrid, from 22 to 30 August. Meeting location was the Municipal Conference Centre, an avant-garde design building with technology and services that absorb all demands of such a gathering, especially air condition was an incentive appreciated during continental Mediterranean climate of Madrid. About 2600 participants from 73 countries from all over the world were populating the meeting. There were three poster sessions with 1550 poster presentations, 20 of which were awarded. Poster sessions were an excellent opportunity to discuss my own work with scientist from all over the world as well as meeting friends. The scientific program was accompanied by a congress dinner that took place in the beautiful Botanical Garden of the “Universidad Complutense de Madrid”. The three-course menu was very delicious whereas the daily lunch packages reminded me rather of youth hostel cuisine. A dinner under starry sky provided a perfect ambiance. Participants with jacket or weakness for wine and dancing felt quite comfortable at the first coolish night in August.

During the opening ceremony, first the Ewald Award Lecture was given by Carmelo Giacovazzo. It was about a new type of Difference Fourier Synthesis providing information on the ideal difference map, in particular when the model is uncorrelated to the target structure. Thereby a new method for solution of the phase problem called “Vive la difference” (VLD) was created. Afterwards Eleanor Dobson gave a personal historical survey of macromolecular crystallography during the last five decades. In the last Ewald Award Lecture George Sheldrick presented an overview of the history of his SHELX suite software. The keynote lectures covered macromolecular crystallography from very large macromolecular assemblies, ribosome complexes, membrane proteins, structural aspects of bacterial pathogenicity, structural basis of cell regulatory processes, structural genomics and validation and error aspects in protein structures.

Three impressive plenary lectures were presented by the 2009 Chemistry Nobel Laureates Thomas Steitz, Venki Ramakrishnan and Ada Yonath. It was a real pleasure to listen to their presentations filled with stunning results but entertainment as well. On Tuesday morning, Thomas Steitz’ talk “From the Structure and Function of the Ribosome to New Antibiotics” shed light on the crystal structures of the 70S ribosome. He presented the structures of 70S ribosome bound to two compounds that are effective against tuberculosis, which were recently solved in his lab. In the meantime he revealed himself as good dancer demonstrating movement of macromolecules. This reminded me to optimize my own performance for my next progress report. Four days later, Venki Ramakrishnan described the structure of the ribosome 30S subunit and its complexes. In addition he presented high-resolution structures of functional complexes of the entire ribosome which illustrated the structural basis of the high accuracy of the translation process. On Monday afternoon Ada Yonath showed us the elaborate architecture of the ribosome in particular the semi-symmetrical region for peptide bond formation regarding stereochemistry, catalysis and substrate translocation. The high conservation of the symmetrical region implies that it may represent a prebiotic RNA bonding machine. During these talks it became clear that good results are not enough. It is even as important to sell them to the scientific community.

The stay in a hotel near the city center gave me the opportunity to use one of the most innovative metro systems in the world. The “Metro de Madrid” was the best choice to get fast and comfortable from the hotel to the conference and to every place of the metropolis Madrid. I really enjoyed my stay in Madrid and I am looking forward to the next Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography in Montreal.

KURZBERICHT VON JACOBO MARTINEZ (FU BERLIN)

Über 2500 Teilnehmer aus der ganzen Welt trafen sich in Madrid (Spanien) vom 22. bis 30. August zum XXII. „Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography“. Die Veranstaltung fand im „Palacio Municipal de Congresos de Madrid“ statt, einer modernen Einrichtung ausgestattet mit zwei großen Auditorien und mehreren Hörsälen, die den passenden Rahmen für einen solchen Kongress bot.

Nach der Eröffnungszeremonie am Montagabend, wo neben einem Vorwort von den Veranstaltern auch ein Einblick in die historischen Beziehungen Spaniens zur Mineralogie und Kristallographie präsentiert wurde, konnte man verschiedene spanische kulinarische Spezialitäten auf dem Begrüßungsempfang genießen.

Die Tagung bot hochkarätige Seminare, Workshops, kommerzielle Präsentationen und Poster-Sessions, welche der Vielfältigkeit der modernen Kristallographie Rechnung trugen. So wurden Seminare zu diversen Schwerpunkten wie makromolekulare Kristallographie, SAXS, Pulverdiffraktometrie, Neutronenstreuung, Kristallbildung und Morphologie, Strukturvalidierung oder Strahlenschäden durchgeführt, um nur einige davon zu erwähnen.

Die Seminare wurden in drei verschiedenen Kategorien organisiert: „Plenary Lectures“, „Keynote Lectures“ und „Microsymposia“. Die Länge der Plenarvorträge (vier insgesamt) betrug je 50 Minuten. Zeitgleich fand keine andere Veranstaltung statt. Die Hauptvorträge (36) umfassten ebenfalls je 50 Minuten und wurden maximal von zwei Parallelveranstaltungen begleitet. Die Mikrosymposien (98) bestanden aus 5 Präsentationen à 30 Minuten und wurden in 7 parallelen Sessions präsentiert.

Die IUCR-Tagung in Madrid war eine gute Gelegenheit, um sich intensiv mit dem neuesten Stand der Kristallographie zu befassen, neue unbekannte Gebiete zu entdecken und alte Kollegen wiederzusehen. Alles bei warmem, sommerlichem Wetter und in einer Stadt, die kulturell vieles zu bieten hat. Der nächste Kongress wird 2014 in Montreal stattfinden.

What's new in Crystallography?

LEXSY in Structural Biology

- Structure determination of the new P2₁2₁2₁ crystal form of recombinant human Cu/Zn superoxide dismutase (SOD1) expressed in LEXSY¹

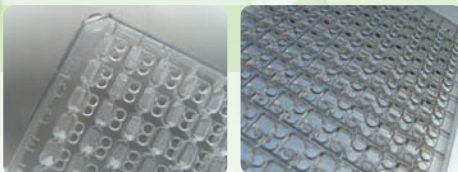


Screens

- Pi-minimal/Pi-PEG Screen²
- Memb-PASS Detergent Screen³

Plates

- 20% Price Cut on MRC Plates
- Lipidic Cubic Phase Screening Kit



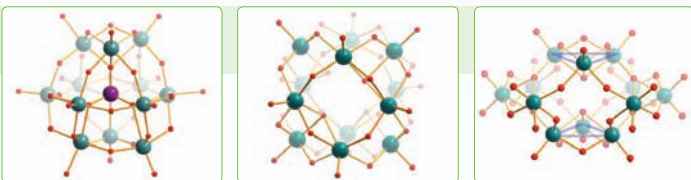
Data collection

- Barcoded goniometer bases
- Reusable goniometer bases
- B5 base - a magnetic SPINE standard base
- Dual thickness MicroMounts™



Phasing

- JBS Tungsten Cluster Derivatization Kits



¹Gazdag *et al.* (2010) Purification and crystallization of human Cu/Zn superoxide dismutase recombinantly produced in the protozoan *Leishmania tarentolae*. *Acta Cryst.* **F66**:871.

²Gorrec *et al.* (2011) Pi sampling: a methodical and flexible approach to initial macromolecular crystallization screening. *Acta Cryst.* **D67**:463.

³Vergis *et al.* (2010) A high-throughput differential filtration assay to screen and select detergents for membrane proteins. *Anal. Biochem.* **407**:1.



BUCHBESPRECHUNG:

WILL KLEBER, HANS-JOACHIM BAUTSCH, JOACHIM BOHM, DETLEF KLIMM

„EINFÜHRUNG IN DIE
KRISTALLOGRAPHIE“

BEARBEITET VON JOACHIM BOHM UND DETLEF KLIMM

19., VERBESSERTER AUFLAGE 2010, 470 SEITEN, 3 BEILAGEN, BROSCHIERT

OLDENBOURG WISSENSCHAFTSVERLAG GMBH, MÜNCHEN

ISBN 978-3-486-59075-3, PREIS: 69,80 €

Es erhebt sich sicher bei vielen Lesern die Frage, warum das deutschsprachige Standardlehrwerk der Kristallographie – „Einführung in die Kristallographie“ – von Will Kleber (1906–1970), kurz von Studierenden und Lehrenden als der *Kleber* bezeichnet, nach seiner 19. Auflage besprochen werden sollte. Einige dieser Gründe werden im Folgenden zum Verständnis dafür aufgeführt werden.

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie fühlt sich dem Wirken von Will Kleber¹ für die Kristallographie, welches nicht nur durch den *Kleber* bis heute ausstrahlt, verpflichtet. Deshalb verleiht die DGK unter anderem eine Gedenkmünze, die dem Andenken an Will Kleber gewidmet ist, mit der hervorragende wissenschaftliche Beiträge auf ausgewählten Gebieten der Kristallographie ausgezeichnet werden sollen. So ist der seit der 12. Auflage zusammen mit Prof. Hans-Joachim Bautsch (1929–2005) federführende Bearbeiter des *Kleber* – Prof. Joachim Bohm (*1935), auch ein Schüler von Will Kleber – als erster mit dieser Gedenkmünze geehrt worden². In beiden in den Fußnoten genannten Beiträgen wurde auch einiges zum *Kleber* und seiner Bedeutung mitgeteilt. Dr. habil. Detlef Klimm (*1957) ist Mitarbeiter am IKZ Berlin.

Die neueste Auflage des *Kleber* liegt in Paperback mit einem nicht gerade werbewirksamen Umschlagbild – Elektronenmikroskopisches Abbild der (201)-Ebene eines monoklinen β -Ga₂O₃-Kristalls in atomarer Auflösung – vor, welches wohl wissenschaftlich sehr wertvoll, aber offensichtlich nicht sehr ansprechend ist. Um die Veränderungen des *Kleber* bis zur 19. Auflage beschreiben zu können, habe ich mir die 1. Auflage von 1956 aus der Bibliothek des Physikalischen Instituts der Universität Jena beschafft. Zu meinem Erstaunen konnte ich am Ausleihzettel feststellen, dass dieses Exemplar der 1. Auflage jährlich noch etwa viermal ausgeliehen wird, obwohl neuere Auflagen auch vorhanden sind. Das zeugt meiner Meinung nach davon, dass die „Einführung in die Kristallographie“ von Will Kleber so verfasst wurde, dass sie auch noch heute einer Einführung in dieses Fachgebiet für Physiker und andere weitestgehend genügt.

Will Kleber betonte in der 1. Auflage das Wesen der Interdisziplinarität der Kristallographie und die damit verbundene Problematik der Eigenständigkeit als wissenschaftliche Disziplin. So bestimmte er die Kristallographie als Disziplin, welche als Objekt den Kristall insgesamt

¹ Eine ausführliche Biographie wurde anlässlich seines 100. Geburtstages am 15.12.2006 von einer seiner Schülerinnen, Frau Prof. Ursel Steinike, verfasst und ist im Heft 32 der Mitteilungen der DGK veröffentlicht.

² Die Laudatio dazu von Prof. Peter Paufler ist im Heft 36 der Mitteilungen der DGK nachzulesen, mit einer Abbildung des Umschlages der 1. Auflage des *Kleber*.

beinhaltet mit all seinen Eigenschaften, Veränderungen und Vorgängen, und ordnete dieses im *Kleber* in die Kapitel Kristallstrukturlehre und Kristallmorphologie, Kristallchemie und Kristallphysik ein. In der 19. Auflage finden sich außerdem noch die Kapitel Physikalisch-chemische Kristallographie, welches die Realstrukturen, die Kristallisation und Vorgänge in Kristallen behandelt, sowie Strukturanalyse von Kristallen, welches aus der Kristallphysik herausgenommen ist und insbesondere die Beugungsmethoden zur Kristallstrukturbestimmung enthält.

Wie Will Kleber eindeutig den Gegenstand der Kristallographie festlegte, so definierte er auch weitsichtig und allgemein Kristalle als homogene, anisotrope Körper. Er hebt desweiteren insbesondere hervor, dass es *nicht mehr angebracht* ist, den Kristall als *drei-dimensional periodische Anordnung* aufzufassen, und formuliert deshalb damals schon die heute aktuelle Definition des Kristalls: Materie befindet sich dann im *Kristallzustand*, wenn sie Einkristall-Röntgeninterferenzen erzeugt. Diese Auffassungen des Kristalls und somit auch der Kristallographie durchziehen alle Kapitel des *Kleber* und geben ihm den Charakter, der ihn stets modern erscheinen lässt. Unter diesen Vorgaben Will Klebers ist es auch heute noch zukunftsfruchtig, die Kristallographie als diejenige Wissenschaftsdisziplin zu betreiben, welche sich mit dem strukturellen Aspekt der kondensierten Materie auseinandersetzt und den Zusammenhang zwischen Struktur und Eigenschaften von Kristallen umfassend analysiert und beschreibt. Der *Kleber* stellt in seinen genannten Kapiteln einfach, klar und gut nachvollziehbar das dar, was Kristallographie umfasst, insbesondere die Bedeutung der Struktur hervorhebend.

Die Bearbeiter haben unter behutsamer Wahrung der Ideen und didaktischen Vorstellungen von Will Kleber zur Einführung in die Kristallographie Neues eingearbeitet – wie wichtige Verfahren der Kristallzüchtung, die Realstrukturen der Kristalle oder die Nichtlineare Optik – und auch Vorhandenes überarbeitet – wie den Begriff der Gitterstruktur, der in den der Kristallstruktur überführt, manchmal auch etwas überzogen, wie bei der Darlegung der Kugelpackungen zu Beginn der Kristallchemie. So ist der reine Seitenumfang von der 1. zur 19. Auflage von 312 Seiten auf 468 Seiten gestiegen. Dennoch, das soll betont werden, ist der *Kleber* kein Kompendium der Kristallographie geworden, sondern bleibt nach wie vor eine gelungene Einführung in diese.

Ein Problem des *Kleber* als Lehrwerk der Kristallographie besteht auch darin, dass Kristallographie an deutschen Universitäten und Hochschulen nicht als selbständige Studienrichtung mit entsprechendem Abschluss existiert. Studenten der Mineralogie werden insbesondere von der Kristallstrukturlehre und Kristallmorphologie sowie der Kristallchemie profitieren, Studenten der Physik von der Kristallstrukturlehre, der Kristallphysik und der Strukturanalyse, Studenten der Chemie ebenso von der Kristallstrukturlehre, der Kristallchemie und der Strukturanalyse, Studenten der Werkstoffwissenschaften werden den gesamten *Kleber* studieren usw. Ob die jetzigen Studenten im modularen System der Bologna-Reformen an den Universitäten noch Zeit und Muße haben, universitär im Humboldt'schen Sinne zu studieren, d. h. nebenbei sich auch noch mit dem *Kleber* fachübergreifend zu beschäftigen und auseinanderzusetzen, sei dahingestellt. Es bleibt jedoch in der Verantwortung der Lehrenden, die Studierenden auf die Verwendung von begleitenden Lehrwerken aufmerksam zu machen. So weist schon Will Kleber darauf hin, um die Problematik und den Aspekt der Struktur in der Kristallographie grundlegend erfassen zu können, den *Kleber* hauptsächlich neben der Vorlesung zu benutzen. Aber es gibt auch eine große Anzahl von Anwendern der Kristallographie in Forschung und Industrie – wovon die Mitgliedschaft von etwa 1000 Interessenten in der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie und die Anwesenheit von

etwa 400 aktiven Teilnehmern an deren Jahrestagungen zeugt – die sich bei kristallographischen Problemen und Fragestellungen im *Kleber* informieren können und sollten.

Wegen dieses breiten Anwenderkreises ist es auch weiterhin angebracht, dass der *Kleber* die klassischen Darlegungen der Kristallographie wie die Kristallprojektionen und das Kristallzeichnen, die Darstellungen der Symmetrien, die Korrespondenz von Habitus und Kristallstruktur, die Grundgesetze der Kristallchemie, die mikroskopischen Methoden, die kristallphysikalischen Wirkungen der Kristallklassen sowie die Grundlagen der Kristallstrukturanalyse beibehält. Es muss dem Empfinden und der Verantwortung der Bearbeiter zukünftiger Auflagen überlassen werden, wie in eine Einführung in die Kristallographie zum Beispiel Aspekte aperiodischer Kristalle, Anwendungen des reziproken Gitters in den Brillouin'schen Zonen, biologische und metallorganische Strukturen in der Kristallchemie, Rietveld-Methoden und Elektronenmikroskopie in der Strukturanalyse oder Gruppen-Untergruppen-Relationen bei den Phasenübergängen eingearbeitet werden können. Jedoch ist dem *Kleber* auch eine umfangreiche Bibliographie zugefügt, so dass die Lösungen weitergehender, detaillierter Fragestellungen in speziellen Monographien usw. gesucht werden können.

Der *Kleber* hat sich seit seiner 1. Auflage dynamisch entwickelt und wird auch weiterhin wegen seiner Prägnanz der Darlegungen zur Struktur und ihres Zusammenhanges mit den morphologischen, physikalischen und chemischen Eigenschaften des Kristalls ein Standardlehrwerk der Kristallographie bleiben – für Studierende aller Fachrichtungen, welche das Objekt Kristall inhaltlich tangieren, für alle, die sich beruflich oder hobbymäßig mit dem Kristall beschäftigen, ob theoretisch, experimentell oder auch technologisch.

Bernd Müller, Jena

The Dream Machine for Structure Analysis

The image is a composite. On the left, a Bruker VARIO1 XRD diffractometer is shown in a dark blue environment, with its goniometer arm and detectors visible. On the right, there is a close-up of a white, porous powder sample. Below the powder, a horizontal strip displays several XRD diffraction patterns with peaks and troughs. The word "VARIO1" is overlaid in a white box on the right side of the image.

VARIO1

- Pure $K\alpha_1$ radiation
- Three predefined geometries
- LYNXEYE or VÅNTEC-1 detector
- Various sample stages and holders

One system – unlimited versatility. The unique VARIO1 primary monochromator system provides three predefined geometries for measurements in both reflection and transmission, using high-resolution and high-intensity setups. This makes the D8 DISCOVER the dream machine for structure determination and refinement of organic, metal-organic and inorganic materials. Geometries can be switched within minutes without the need of any monochromator alignment.

www.bruker.com

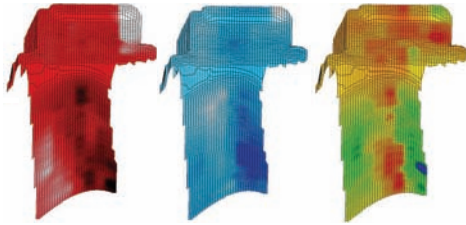
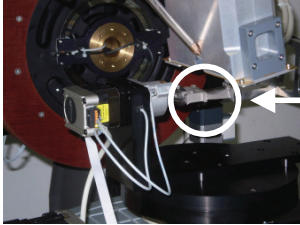
XRD

EFG Berlin

50 years experience in the X-ray field

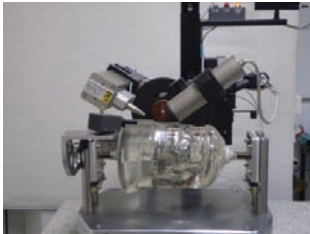
Worldwide service and technical support

X-ray surface orientation mapping of turbine blades:

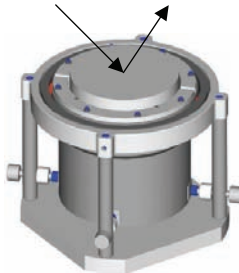


Substrates for the cold light -

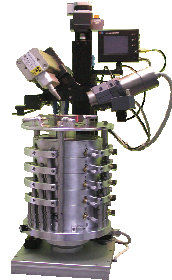
X-ray orientation measurements from boule to wafer:



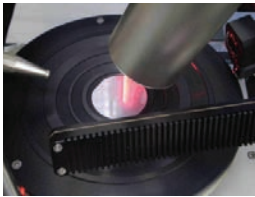
Boule orientation



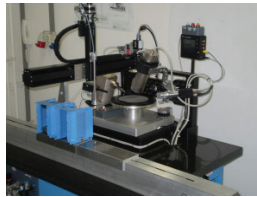
Ingot orientation



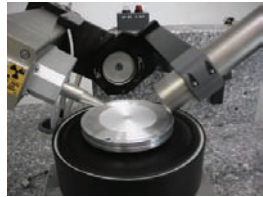
Ingot stacking



Optical warp and bow test



Automatic wafer sorting



Wafer surface mapping

EFG GmbH

Beeskowdamm 6, 14167 Berlin, Tel.: 809 74 00

E-mail: efg@efg-berlin.de / www.efg-berlin.de

Rigaku agency Germany

VIII REGIONAL SCHOOL ON CRYSTALLOGRAPHY AND DIFFRACTION

HAVANNA (KUBA), 21.-25. NOVEMBER 2011

Es war die achte in der Reihe von Schulen, die – wiederum als Weiterbildungsmaßnahme im lateinamerikanischen Raum von der IUCr gefördert – diesmal den experimentellen Möglichkeiten der Synchrotronstrahlung gewidmet war. Den 25 Teilnehmern aus Kuba, Venezuela, Ecuador und Vietnam wurde ein 5-tägiges Programm aus Vorträgen und Übungen geboten, das sich schwerpunktmäßig mit der Pulverdiffraktometrie und deren Anwendungen befasste.

Themen (Vortragende in Klammern) waren folgende: Introduction to X-Ray Crystallography (P. Paufler, TU Dresden), Principles of Synchrotron Radiation (J. Plaisier, ELETTRA Trieste, Italien), XRD Beam Lines at ELETTRA (J. Plaisier), XRD Beam Lines at LNLS (E. Granado, National Lab. of Synchrotron Radiation LNLS und Univ. Campinas, Brasilien), XRD and EXAFS Experiments applied for Characterization of Magnetic Materials (E. Granado), Introduction to FullProf (J. Rodriguez-Carvajal, ILL, Diffraction Group, Grenoble, Frankreich), Lab Session using FullProf (J. Rodriguez-Carvajal), XRD Experiments applied for Characterization of Materials (J. Plaisier), Beamlines at ESRF (G. Martinez-Criado, ESRF Synchrotron, Grenoble, Frankreich), Novel Synchrotron Radiation Application in Nanoscience at ESRF (G. Martinez-Criado), Line Profile Analysis using High-Resolution XRD Experiments (E. Estevez-Rams, IMRE, University of Havana, Cuba), Nobel Prize in Chemistry 2011 (E. Estevez-Rams).

Vorträge und Diskussion erfolgten in Spanisch oder Englisch. Der überschaubare Kreis von Vortragenden und Studenten fand bald engen Kontakt zueinander, was auch außerhalb der Vorträge Früchte trug. Am Schluss wurde der geistige Motor und Leiter des Organisationskomitees Dr. Arbelio Penton Madrigal zu Recht mit viel Beifall für seinen wirkungsvollen Einsatz bedankt.

Dem Ziel der Gewinnung neuer Nutzer von Synchrotronstrahlung aus Kuba und den angrenzenden Staaten der Karibik dürfte die Veranstaltung durchaus Vorschub geleistet haben, zumal Arbelio Penton Madrigal erst selbst kürzlich eigene Messungen an den Synchrotrons in Campinas und Triest durchführen konnte und im Übrigen eine Lockerung des bisher restriktiven Reiseverkehrs für Wissenschaftler durch die kubanische Regierung erkennbar ist. Gegenwärtig scheint Brasilien für kubanische Nachwuchswissenschaftler ein besonders attraktives Partnerland zu sein. Die wirtschaftlichen Schwierigkeiten Kubas bestehen indessen leider fort und dem Leiter der Schule gebührt hohe Anerkennung für die Schaffung einer fruchtbaren Arbeitsatmosphäre allen Widrigkeiten zum Trotz. Auch hier gibt es viele Analogien zur Lage in der DDR vor 1989.

Bedauerlicherweise bleiben die offiziellen Beziehungen zur Bundesrepublik noch hinter früheren Möglichkeiten zurück. Die Embargo-Bestimmungen der USA tun ihr Übriges die Lage der Kristallographen auf der Zuckerinsel zu komplizieren. Wenn eine Firma im Westen gegen diese Bestimmungen verstößt, hat sie mit Sanktionen zu rechnen. Beispielsweise wird gegenwärtig ein neues Pulverdiffraktometer benötigt. Damit diesen Bestimmungen

entsprochen wird, soll es aus China bezogen werden, mit allen Unwägbarkeiten eines derartigen Geschäfts.

An dieser Stelle darf der Berichterstatter eine Bitte der beiden führenden Vertreter der Kristallographie auf Kuba, Ernesto Estevez Rams und Arbelio Penton Madrigal an die Leser der „Mitteilungen“ weiterleiten, ein nicht mehr benötigtes gebrauchtes Diffraktometer kostenlos an diese Gruppe abzugeben (Ansprechpartner: Bereichsleiter Dr. Arbelio Penton Madrigal, E-Mail: arbelio@fisica.uh.cu). Warum sollte internationale Hilfe auf humanitäre Felder beschränkt bleiben?

Natürlich sind die Erwartungen im In- und Ausland an eine „Perestroika“ auf Kuba groß. Die Wege dahin müssen – wie einst in der DDR – erst schrittweise im Wechselspiel zwischen dem Einfluss der bisher Privilegierten und Wünschen der bis dato unterprivilegierten Mehrheit geebnet werden.

Die Anzeichen für eine neue Bewertung des traditionell von Kommunisten verteuftelten Privateigentums waren in Havanna allenthalben mit Händen zu greifen. Auch hier steigt der inländische Auswanderungsdruck und zwingt zuerst zum Öffnen der zugehörigen Ventile. Was dann folgt, ist schwer voraussagbar. Auch hier ist die Überwindung von wirklichkeitsfremden und über Jahrzehnte durch permanente Wiederholung gefestigten Klischees in den Köpfen das Haupthindernis. Denn wer beispielsweise kostenlose medizinische Versorgung als unverzichtbares Attribut eines gesellschaftlichen Systems fordert, wird sich bald zum Einführungslehrgang in Volkswirtschaftslehre anmelden müssen. Dass ein Angestellter eines Hotels zuerst um das Wohl der Gäste besorgt sein sollte, lässt sich offenbar nicht durch Regierungsbeschluss erzwingen usw.

Die Schule wurde in einem neuen Lehrgebäude der Universität (Colegio Universitario San Gerónimo, Habana Vieja) in der einst prunkvollen Altstadt von Havanna durchgeführt, von deren erfreulichen Restaurierungsfortschritten aus Mitteln der UNESCO (Weltkulturerbe) sich die Teilnehmer so ein unmittelbares Bild machen konnten. Die sommerlichen Temperaturen der Trockenzeit schärfen überdies den Blick für den realen Zustand der Stadt. Auch in Havanna war – ähnlich wie in anderen Entwicklungsländern – allenthalben die Dominanz der jungen Generation zu spüren. Die farbenfrohen Schuluniformen markierten im Straßenbild eine disziplinierte und dennoch temperamentvolle, sportbegeisterte Jugend. Nun kommt es darauf an, die besten Köpfe für die Kristallographie zu gewinnen. Das ist keineswegs einfach, da deren berufliche Perspektive im Lande gegenwärtig nicht erkennbar ist. Auch hierfür könnte die Schule PR-Arbeit geleistet haben. Das Internationale Jahr der Kristallographie gibt hoffentlich neuen Anlass zur globalen Begegnung der Kristallographen über Grenzen unterschiedlicher Gesellschaftssysteme hinweg.

Peter Paufler, Dresden

DIE ARBEITSKREISE (AK) DER DGK
BERICHTEN:

BERICHT DES AK 4 „NICHTKRISTALLINE, PARTIELLKRISTALLINE UND NANOKRISTALLINE STRUKTUREN“

Der Arbeitskreis *Nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen* kann auf eine sehr erfolgreiche zwanzigjährige Tätigkeit in der DGK verweisen. Denn er stand und steht zum einen allen Interessenten offen, die sich mit

- der Problematik der Strukturbeschreibung, -simulation und -theorie,
- der experimentellen und instrumentellen Charakterisierung unter besonderer Berücksichtigung der Beugungsmethoden,
- der Generierung, Relaxation, Vorordnung, Keimbildung und Kinetik,
- den Relationen von Struktur-Eigenschaften-Herstellungsbedingungen,
- den Problemen der Selbststrukturierung im intermediären Strukturbereich

nichtkristalliner, partiellkristalliner und nanokristalliner Materialien beschäftigen. So verzeichneten die jährlich stattfindenden Arbeitskreistagungen zwischen siebzig und zwanzig Teilnehmer mit einer entsprechenden Anzahl von Vorträgen zu aktuellen Problemen und Aufgaben, da der Arbeitskreis als ein Forum dient, das allen Interessierten an der Problematik nichtkristalliner und nanokristalliner Materialien die Möglichkeit gibt, sich kennenzulernen und sich fachlich auszutauschen. Die Vorträge waren und sind meist so abgefasst, dass sie auch zur Weiterbildung geeignet sind. Die Kurzfassungen der Vorträge können auf der Seite des Arbeitskreises (www.chemie.uni-jena.de/DGK-AK4) gelesen und von dieser als PDF-Dateien zur Verwendung heruntergeladen werden.

Im Jahre 2000 hatte der Arbeitskreis zum anderen sogar aufgrund seiner Fachkompetenz einen Antrag bei der DFG zur Förderung eines Forschungsprojektes *Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien* gestellt, an welchem sich achtundzwanzig Forschergruppen beteiligen wollten. Leider wurde dieses Projekt nicht gefördert, da die DFG zu jener Zeit ihren Fokus zu den Lebenswissenschaften verschoben hatte.

Ein Vorzug des Arbeitskreises liegt zum weiteren in der Interdisziplinarität der Themen, der Stoffsysteme und der Methoden und des damit verbundenen Synergieeffektes, insbesondere für junge Wissenschaftler. Die Palette der behandelten Stoffe reicht von den organischen Polymeren und weichen Gläsern hin bis zu den oxidischen und metallenen Gläsern sowie auch zu den Nanokompositen, die der instrumentellen Methoden von der NMR-Spektroskopie über die thermischen Verfahren bis zu den Beugungsmethoden, die der Auswerteverfahren von den Fouriertransformationen und radialen Verteilungsfunktionen bis zu den verschiedenen Struktur-Simulationsverfahren zur Anpassung an die Intensitätsfunktionen der Beugungsverfahren, von der Generierung nichtkristalliner Strukturmodelle mittels molekuldynamischer und Monte-Carlo-Verfahren bis zu theoretischen Ansätzen topologischer und stochastisch-geometrischer Algorithmen zur Modellierung der Nah- und Mittelbereichsstruktur, aber auch thermodynamischer und kinetischer Ansätze zur nichtkristallinen und nanokristallinen Strukturbildung sowie zur Keimbildung und von Wachstumsprozessen.

Strukturbildungsprozesse und Strukturen nichtkristalliner Materialien stellen immer noch ungelöste Probleme der Physik und Chemie dar. Deshalb ist die Beschäftigung mit diesem Problemkreis weiterhin aufregend und sehr abwechslungsreich, so dass der Arbeitskreis eine

seiner wesentlichen Aufgaben dazu in der Gewinnung und Weiterbildung von jungen Wissenschaftlern sah und sieht.

Somit ruft der Arbeitskreis alle Interessenten an der Problematik von Strukturen und von Strukturbildungsprozessen in nichtkristallinen und nanokristallinen Materialien zur Mitarbeit auf, um an der Lösung der spannenden Probleme mitzuwirken. Insbesondere hat sich der Arbeitskreis folgende Problemkreise für seine nächsten Arbeitskreistagungen vorgenommen:

- Methoden der Datenanalyse der Intensitätsfunktionen aus Beugungsverfahren und ihrer Transformationen (Fouriertransformation) zu radialen Verteilungsfunktionen,
- Generierungen nichtkristalliner Strukturmodelle mittels stochastisch geometrischer, moleküldynamischer, Monte-Carlo- und kristallchemischer Methoden,
- strukturelle, kinetische und thermodynamische Theorien und Modelle zur Bildung nichtkristalliner Materialien
- nanokristalline Strukturen, Charakterisierung, Stabilitätsbereiche und Erzeugung.

Im Jahre 2012 steht die Wahl des Arbeitskreissprechers an, für die das langjährige Mitglied des Arbeitskreises, Herr Prof. Dr. Jürgen Horbach, Düsseldorf, kandidieren wird. Bei seiner Wahl werden sich die Örtlichkeiten der Arbeitskreistreffen vom Thüringer Holzland in das Rheinland verschieben, so dass auf diese Weise viele neue Interessenten auf unseren Arbeitskreis und die Mitarbeit in ihm aufmerksam gemacht werden können.

Bernd Müller, Jena

JAHRESBERICHT DES AK 6 „MOLEKÜLVERBINDUNGEN“

Der Arbeitskreis „Molekülverbindungen“ hat 2010 den Schwerpunkt seiner Tätigkeit erneut auf die Durchführung der mittlerweile traditionellen Sommerschule zur Einkristallstrukturanalyse gelegt. Bereits zum 6. Mal versammelten sich vom 6. bis 10. September 2010, 36 Teilnehmer und sechs Dozenten im ehemaligen Zisterzienserkloster Hardehausen in der Nähe von Warburg, um die Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse mit Papier und Bleistift in Vorlesungen und begleitenden Übungen zu erarbeiten. Auf dem Programm der ausgebuchten Sommerschule – es gab leider eine längere Warteliste – standen zunächst die Themen Symmetrie und Strukturfaktoren, denen ein Abschnitt über Diffraktometrie folgte. Mit den Kapiteln Fouriertransformation, Strukturlösung mit Patterson und direkten Methoden, sowie Strukturverfeinerungen schlossen sich die konzeptionell und mathematisch weniger anschaulichen, für die Einkristallstrukturanalyse aber zentralen, Themen an. Anschaulicher und in Zeiten der zunehmenden Automatisierung der Strukturbestimmung von vielen Teilnehmern als praxisrelevanter empfunden, waren dann die Abschnitte Fehlordnung, Verzwilligung und die richtige Behandlung von Wasserstoffatomen. Den Abschluss bildeten Fallbeispiele zur (Fehl-)Interpretation von Kristallstrukturen.

Die klösterliche Abgeschiedenheit bietet zwar den Rahmen zu konzentriertem Arbeiten, dennoch ist der gesellige Teil nicht zu kurz gekommen. Das hauseigene Hallenbad bietet insbesondere den Frühaufstehern eine gerne genutzte Gelegenheit zur sportlichen Betätigung. Mit einer abendlichen Wanderung über die Höhenzüge des unmittelbar angrenzenden Eggegebirges wurde für weitere Abwechslung gesorgt. Das traditionelle Volleyballturnier fiel diesmal verletzungsbedingt allerdings aus, dafür fand sich Zeit das sehr beeindruckende Wisentgehege zu besuchen. Die anonyme Fragebogenaktion am Ende der Tagung ergab eine durchweg positive Resonanz und ermutigte die Dozenten auch 2012 erneut in den Ring zu steigen. Der Termin steht bereits fest, die Sommerschule findet vom 10. bis 14. September 2012 im Kloster Hardehausen statt. Weitere Information über www.gdch.de/chemkrist.

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.

Im Jahr 2011 beteiligt sich der Arbeitskreis am wissenschaftlichen Programm der gemeinsamen Jahrestagung von DGK, DMG und ÖMG mit einem Mikrosymposium. Außerdem findet während der Jahrestagung unter Beteiligung des AK 6 ein Workshop zur neuen „Chemical Crystallography Beamline“ bei PETRA III statt. Gemeinsam mit dem langjährigen Kooperationspartner ChemKrist, angesiedelt in der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh ist zum Jahresende noch ein weiterer Workshop zur Beamline am HASYLAB geplant.

Christian W. Lehmann, Mülheim

NEW

The I μ S^{High Brilliance}



- for Cu, Mo & Ag
- up to 60% more intensity
- component recognition
- improved safety features
- fully compliant with Machinery Directive 2006/42/EC

WORKSHOP „NEUTRONENSTREUUNG FÜR KRISTALLOGRAPHEN“ DES AK7 „NEUTRONENSTREUUNG“

Anlässlich der gemeinsamen Jahrestagung der DGK, DMG und ÖMG vom 20. bis 24. September 2011 in Salzburg führte der Arbeitskreis „Neutronenstreuung“ vom 19. bis 20. September am Tagungsort einen Satelliten-Workshop durch. Ziel der Veranstaltung, die sich an Studenten und Wissenschaftler der verschiedenen Natur- und Materialwissenschaften richtete, war eine Einführung in die Grundlagen und Methoden sowie die vielfältigen Anwendungen und Methoden mit Neutronen.



Die insgesamt 15 Teilnehmer aus zehn verschiedenen Universitäten hörten am 19. September zunächst Vorträge von Dr. Ralph Gilles (TUM), Dr. Astrid Schneidewind (HZB), Prof. Dr. Markus Braden (Uni Köln), Prof. Dr. Fritz Frey (LMU), Prof. Dr. Regine Willumeit (HZG) und Dr. Martin Meven (TUM). Die Bandbreite der vorgestellten Methoden umfasste Pulver- und Einkristalldiffraktion, Magnetismus, Spektroskopie und Kleinwinkelstreuung, deren Vielseitigkeit unter anderem auch mit Beispielen aus den Materialwissenschaften und der Biologie demonstriert wurde. Am nächsten Tag stand eine Führung durch die Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) in Garching bei München auf dem Programm, um den Teilnehmern die zu den verschiedenen Methoden gehörigen Instrumente zu präsentieren.

Sowohl das breite Spektrum der Teilnehmer vom Doktoranden bis zum Universitätsprofessor als auch die zahlreichen Fragen und Diskussionen im Anschluss an die Vorträge und während der Führung zeigten das große Interesse an den vorgestellten Themen.

Der Arbeitskreis bedankt sich bei den Vortragenden, der DGK, den Mitarbeitern der Universität Salzburg und dem FRM II, die durch ihre Unterstützung ganz wesentlich zum Zustandekommen des Workshops beigetragen haben.

In 2012 beteiligt sich der Arbeitskreis an der Jahrestagung im Laue-Jahr in München mit einem Workshop am 16.03.2012. Gleichzeitig bemüht er sich in Gesprächen mit dem FRM II, möglichst vielen Teilnehmern der Konferenz während selbiger die Möglichkeit einer Führung durch die Forschungsneutronenquelle zu ermöglichen. Weitere Informationen finden sich auf der Homepage des Arbeitskreises: www.frm2.tum.de/extra/ak7-neutronenstreuung.

Martin Meven, München

BERICHT DES AK 11 „HOCHAUFLÖSENDE RÖNTGENSTREUUNG UND SYNCHROTRONSTRAHLUNG“

Zur „Chemical Crystallography Beamline“ an der PetraIII-Erweiterung (PIII.14) fanden zwei Workshops des BMBF-Verbunds und der DGK-Arbeitskreise 6 und 11 in Salzburg (September 2011) und in Hamburg (November 2011) statt.

Mit dem endgültigen Shutdown des DORISIII-Speicherrings bei DESY/Hamburg Ende 2012 wird auch eine Reihe erfolgreicher Beamlines abgeschaltet, die experimentelle Techniken zur Verfügung stellen, welche nicht an der derzeit in Nutzerbetrieb gehenden Hochbrillanzquelle PETRAIII vorhanden sind. Aus diesem Grunde ist geplant, zwei zusätzliche Hallen zu bauen, um ergänzende Beamlines und Instrumentierungen für weitere experimentelle Techniken zur Verfügung zu stellen. Eine dieser Beamlines (P24) wird sich auf Forschungsaktivitäten konzentrieren, die zur Zeit z. B. an den Beamlines F1, D3 oder BW1 durchgeführt werden. Die Forschungsbereiche der Nutzergruppen reichen von chemisch-kristallographischen, über material- bis hin zu geowissenschaftlichen Fragestellungen und beinhalten z. B. Studien diffuser Streuung, von Elektronendichten, Phasenübergängen, modulierter und fehlgeordneter Strukturen bei hohen/tiefen Temperaturen, hohen Drücken oder unter externen Feldern. Als Ergebnis mehrerer Nutzer-Workshops wurde ein BMBF-Verbundprojekt der Universitäten Hamburg, München, Freiberg, Bayreuth sowie der Max-Planck-Institute Mülheim und Göttingen zum Aufbau der neuen Beamline an der PetraIII-Erweiterung genehmigt.

Im Laufe des letzten Jahres sind die Planungen für PIII.14 in die detaillierte Phase übergegangen. Aus diesem Grunde wurden vom BMBF-Verbund in enger Kooperation mit den Arbeitskreisen 6 und 11 zwei Workshops organisiert, um Details der Beamline zu diskutieren. Während des Workshops in Salzburg mit 20 Teilnehmern wurden vor allem die technischen Spezifikationen behandelt. Als Quelle wird ein kurzer Undulator ($N \leq 20$) zum Einsatz kommen, der Energien im Bereich von 8 bis 35 keV liefern wird. Für die Monochromatisierung wird ein wassergekühlter Monochromator des CEMO-Typs (Si111 und Si311) verwendet. Die Optik der Beamline sieht fokussierende Spiegel- und Linsensysteme mit einem homogenen

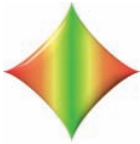


Strahl von $0,3 \text{ mm}^2$ vor, der bei Bedarf durch Fokussierung oder Blendensysteme verkleinert werden kann. In einer Experimentierhütte von ca. $9 \times 4 \text{ m}^2$ werden zwei unabhängige Diffraktometer installiert, von denen ein Kappa-Diffraktometer im Rahmen des BMBF-Verbundes neu beschafft werden wird. Als zweites Gerät ist ein neu überholtes Euler-Diffraktometer mit zusätzlicher horizontaler Streuebene vorgesehen.

Der zweite Workshop in Hamburg mit 43 Teilnehmern konzentrierte sich, neben weiteren technischen Spezifikationen, vor allem auf die Erfordernisse der einzelnen Arbeitsgruppen hinsichtlich Probenumgebungen und Detektoren. Im Hinblick auf eine hohe experimentelle Variabilität wird das Kappa-Diffraktometer mit einem motorisierten xyz-Tisch für maximale Probengewichte von 10 kg ausgerüstet sein. Für Probengewichte bis 5 kg ist eine maximale Fehlerkugel von $\leq 25 \mu\text{m}$ spezifiziert. Zwei unabhängige Detektorarme mit einer maximalen Belastbarkeit von 30 kg in Kombination mit einem modularen Aufbausystem werden einfachen Austausch und Kombination verschiedener Detektorsysteme, Probenumgebungen (Kryostaten, Heizungen), Laser-Systeme für „Pump and Probe“-Experimente oder hochauflösende, digitale Probenmikroskope gewährleisten.

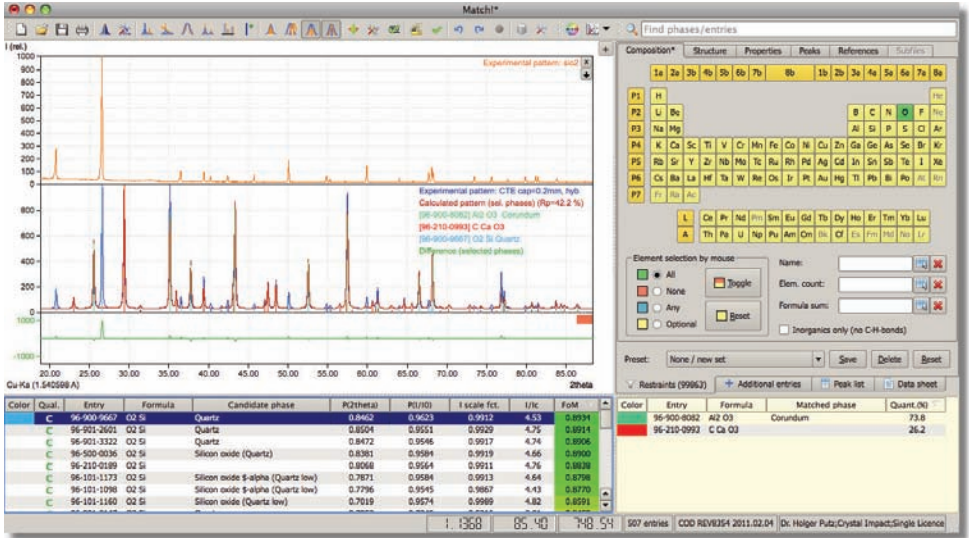
Schwerpunkt im zweiten Teil des Workshops waren Erfordernisse und technische Möglichkeiten für Arbeitsgruppen mit Forschungsgebieten im Bereich der Anorganischen Chemie, Molekülchemie, Elektronendichten u. a. Auf der Grundlage von Vorträgen verschiedener Nutzergruppen und der Vorstellung dedizierter Beamlines (Diamond, UK) wurde die Notwendigkeit eines chemischen Labors in direkter Umgebung der Diffraktometer betont. Weiterhin ergab sich eine umfassende Diskussion über mögliche Verfahren wie „Rapid Access“- und „Mail-In“-Services.

Carsten Paulmann und Ulrich Bismayer, Hamburg



MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction - Version 2



Neue Version 2 verfügbar ab März!

Auch wenn Sie ein anderes Betriebssystem als Windows verwenden, können Sie in Zukunft unsere Software nutzen: Die neue Version 2 von Match! läuft neben Windows auch auf Mac OS X und Linux-Plattformen.

Wie Sie im obigen Screenshot sehen können, wurde außerdem die Benutzeroberfläche vollständig überarbeitet: Sie bietet nun die Möglichkeit, Restriants und zusätzliche Informationen sehr einfach und schnell auf der oberen rechten Seite auszuwählen. Desweiteren gibt es nun eine separate Tabelle für selektierte Phasen unten rechts. Schließlich ist es möglich, in der Grafik links mehrere Pulverdiffraktogramme übereinander darzustellen.

Versuchen Sie es! Eine voll funktionsfähige Testversion kann von der Crystal Impact Webseite **kostenlos** heruntergeladen werden.

Die wichtigsten Neuerungen sind:

- Lauffähig auf Windows, Mac OS X und Linux
- Gestapelte Darstellung mehrerer Pulverdiffraktogramme, z.B. zum besseren Vergleich
- Direkte Suche nach bekannten Phasen
- Schnelle Nutzung zusätzlicher Informationen und Selektionskriterien ohne Umweg über den "Restrains"-Dialog
- Einfache Speicherung von Selektionskriterien unter benutzerdefinierten Namen
- Komfortable manuelle Festlegung des Untergrunds (alternativ zu Automatik)
- Stark verbesserte Zoom-Funktionen
- Benutzerdefinierbare Automatikfunktionen
- **Kostenlose Testversion** sowie weitere Infos: <http://www.crystalimpact.com/match>



**CRYSTAL
IMPACT**

CRYSTAL IMPACT GbR
Rathausgasse 30
53111 Bonn
Germany

Tel.: +49 (228) 981 36 43
Fax: +49 (228) 981 36 44
E-mail: info@crystalimpact.com
<http://www.crystalimpact.com>

BERICHT ZU DEN AKTIVITÄTEN DES AK 12 „SPEKTROSKOPIE“ IM JAHR 2011

Zwischen dem 14. und 17. Juni fand erneut der DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ an der Ruhr-Universität Bochum in der elften Auflage statt. Das Programm bot gemessen an der zur Verfügung stehenden Zeit umfangreiche Einblicke in die Materie und ermöglichte den 16 Teilnehmern trotz unterschiedlicher Vorkenntnisse und Fachrichtungen einen maximalen Wissensgewinn. Die morgendlichen Theoriestunden wurden durch mittags durchgeführte Messungen aufgearbeitet. Dabei konnten einerseits die zu Grunde liegenden Konzepte nochmals kurz wiederholt werden. Andererseits war für die meisten Teilnehmer die Bedienung eines NMR-Spektrometers spannendes Neuland. Die anschließende Auswertung der Spektren erfolgte in Kleingruppen.

Somit konnte im Rahmen des Workshops der komplette Weg von der Vorbereitung der Probe bis hin zum ausgewerteten Spektrum nachvollzogen werden. Dabei deckte die Auswahl der zur Verfügung gestellten Proben einen großen Bereich der theoretisch erklärten Phänomene ab.

Insgesamt bot der Workshop eine ausgewogene Mischung an Theorie und Praxis und schuf zahlreiche Anreize sich mit der anspruchsvollen Methode der MAS-NMR-Spektroskopie intensiver zu befassen.

Der nächste Shortcourse wird, vorbehalten der Genehmigung durch den DMG/DGK-Vorstand, vom 29.05. bis 01.06.2012 stattfinden.

Auf der diesjährigen AK-Sitzung finden wieder die Wahlen für AK-Sprecher und Stellvertreter statt. Wir hoffen auf ein zahlreiches Erscheinen der Mitglieder.

Der Arbeitskreis 12 plant weiterhin für die nächste DGK Tagung in München wieder ein Mikrosymposium „Spektroskopie“.

Michael Fechtelkord, Bochum

BERICHT ZUM DOKTORANDEN-SHORTCOURSE
„ANWENDUNGEN DER
FESTKÖRPER-NMR-SPEKTROSKOPIE
IN DER MINERALOGISCHEN UND
GEOWISSENSCHAFTLICHEN
FORSCHUNG“

VOM 14. BIS 17. JUNI 2011

IN BOCHUM

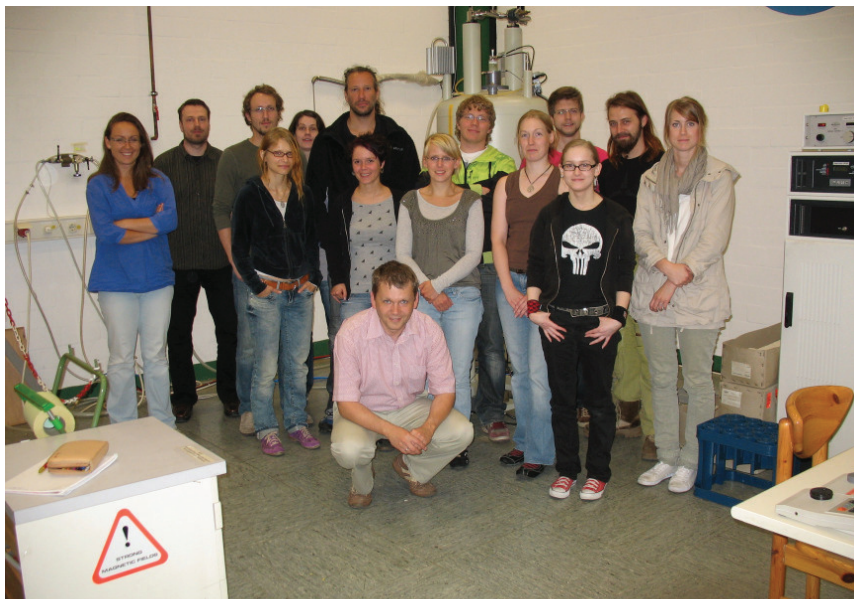
Zwischen dem 14. und 17. Juni fand erneut der DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ an der Ruhr-Universität Bochum statt. Die Leitung des Workshops hatte Herr Priv.-Doz. Dr. Michael Fechtelkord inne, der auch bei der elften Auflage motiviert die Grundlagen der MAS-NMR-Spektroskopie vermittelte. Ein merklich über die Jahre perfektioniertes Programm bot gemessen an der zur Verfügung stehenden Zeit umfangreiche Einblicke in die Materie und ermöglichte den 16 Teilnehmern trotz unterschiedlicher Vorkenntnisse und Fachrichtungen einen maximalen Wissensgewinn. Die morgendlichen Theoriestunden wurden durch mittags durchgeführte Messungen aufgearbeitet. Dabei konnten einerseits die zu Grunde liegenden Konzepte nochmals kurz wiederholt werden. Andererseits war für die meisten Teilnehmer die Bedienung eines NMR-Spektrometers spannendes Neuland. Die anschließende Auswertung der Spektren erfolgte in Kleingruppen.

Somit konnte im Rahmen des Workshops der komplette Weg von der Vorbereitung der Probe bis hin zum ausgewerteten Spektrum nachvollzogen werden. Dabei deckte die Auswahl der zur Verfügung gestellten Proben einen großen Bereich der theoretisch erklärten Phänomene ab.

Nachdem am Vormittag des ersten Kurstages die Grundlagen und Funktionsweisen der NMR-Spektroskopie erläutert wurden, bestand die Aufgabe für den Nachmittag aus der Aufnahme temperaturabhängiger Spektren von Tetramethylammoniumiodid. Deren Auswertung lieferte u. a. die Aktivierungsenergien der unterschiedlichen dynamischen Prozesse.

Ab dem zweiten Theorieblock am folgenden Vormittag wurde der Schwerpunkt zunehmend auf MAS-NMR-spektroskopische Problemstellungen verschoben. So wurden am Nachmittag des zweiten Kurstags NMR-Spektren der unterschiedlichen Spin-1/2-Kerne von Phlogopit (^1H , ^{19}F , ^{29}Si) ausgewertet. Des Weiteren wurden einfache Spektren mittels Fitprogramm (Dmfit) ausgewertet.

Am vorletzten Kurstag wurden Möglichkeiten vorgestellt, wie mittels Multipulstechniken (z. B. CPMAS, INADEQUATE) eine Ausmittlung im Spinraum erreicht werden kann. In der Nachmittagssession wurde dann aus einem CPMAS-Experiment der durchschnittliche H-Si-Abstand in Kaolinit bestimmt. Außerdem wurden zunehmend komplexe Spektren mittels Fitprogramm ausgewertet.



Der letzte Workshoptag stand unter dem Motto der Quadrupolkerne. Einer Einführung in die Thematik folgte die Vorstellung unterschiedlicher Messverfahren wie DOR, MQMAS oder SATRAS. Im Anschluss wurden ^{23}Na -MAS- und ^{27}Al -SATRAS-NMR-Messungen durchgeführt, die im letzten Block des Workshops ausgewertet wurden.

Insgesamt bot der Workshop eine ausgewogene Mischung aus Theorie und Praxis und schuf zahlreiche Anreize sich mit der anspruchsvollen Methode der MAS-NMR-Spektroskopie intensiver zu befassen.

Im Namen aller Teilnehmer möchten wir uns daher nochmals bei Herrn Fechtelkord für den gelungenen Shortcourse bedanken, nicht zuletzt aber auch für die Organisation abendlicher Aktivitäten wie „Icebreakerparty“ und Kegelabend, die Gelegenheit zum Kennenlernen boten und die Atmosphäre noch angenehmer gestalteten.

Anna Hauschild, Kiel und Michael Jehle, Freiburg i. Br.



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 für die Praxis“ / 2x im Jahr

Ansprechpartner und Vertrieb der Programme



crystallographica search/match
OxfordCryosystems



OxfordCryosystems

Oxford, United Kingdom

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

Sietronics Pty Ltd.



Canberra, Australia

SiroQuant® V3.0- Rietveld

Das Werkzeug zur quantitativen Phasenanalyse mit der Rietveldmethode.

Bestimmung des amorphen Anteils.

Alle Datenformate.

Si- Phase

Einbindung von CIF- Daten

in die Rietveld- Datenbank.

BERICHT AUS DEM AK 18 „ OBERFLÄCHEN UND GRENZFLÄCHEN “

Die letzte Arbeitskreissitzung des AK Grenzflächen wurde im Rahmen der ECM 26 am Montag, dem 30. August 2010 in Darmstadt abgehalten. Da die dreijährige Amtsperiode des Arbeitskreissprechers 2010 endete, musste auf der Arbeitskreissitzung die Wahl eines neuen Sprechers durchgeführt werden. Einstimmig wiedergewählt wurde der alte Arbeitskreissprecher, dessen neue Amtsperiode bis 2013 läuft.

Das diesjährige Treffen des Arbeitskreises „Oberflächen und Grenzflächen“ fand im Rahmen der Gemeinschaftstagung der DGK mit den mineralogischen Fachgesellschaften aus Deutschland und Österreich im September in Salzburg statt.

Auf der DGK-DMG-ÖMG-Gemeinschaftstagung fand am Nachmittag des 22. September 2011 auch ein Mikrosymposium zum Thema „Mineral- und Kristalloberflächen“ statt. Der Arbeitskreis „Oberflächen und Grenzflächen“ war maßgeblich an der Gestaltung des Mikrosymposiums beteiligt und konnte zum Beispiel Prof. Dr. Martin Dietzel aus Graz als Referent des Key-Note-Vortrages gewinnen.

Guntram Jordan, München

PERSONALIA:

LAUDATION ZUR VERLEIHUNG DES MAX-VON-LAUE-PREISES 2011 AN FRAU ALEXANDRA FRIEDRICH



Am 20. September 2011 wurde der Max-von-Laue Preis von der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie im Zuge der Eröffnung der gemeinsamen Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft und der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft in Salzburg (Österreich) an die Nachwuchswissenschaftlerin Dr. Alexandra Friedrich (Frankfurt) verliehen.

Frau Friedrich hat bei Prof. E. Tillmanns an der Universität Wien mit Auszeichnung diplomiert und wurde danach an der ETH Zürich bei Prof. M. Kunz promoviert. Der Schwerpunkt ihrer Doktorarbeit lag im Bereich Hochdruckkristallographie und befasste sich mit OH-haltigen Mineralien als mögliche Transport- und Speichermedien für Wasser im Erdmantel. Daraufhin folgten kürzere Postdoktorandentätigkeiten an der ETH Zürich und am Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay, Frankreich, wo sich Dr. Friedrich zusätzlich zu ihren experimentellen Arbeiten in die Grundlagen der quantenmechanischen Modellierung von Kristallstrukturen einarbeitete. Von 2002 bis 2009 war sie als Postdoktorandin in der Arbeitsgruppe Winkler an der Goethe-Universität Frankfurt am Main tätig und hat dort die Arbeitsrichtung „Experimentelle Kristallographie bei extremen Druck- und Temperaturbedingungen“ mit aufgebaut. Ihre zahlreichen nationalen und internationalen Kollaborationen haben u. a. zu einem Gastaufenthalt bei Prof. G. A. Lager an der University of Louisville (Kentucky, USA) geführt. Trotz zweifacher Mutterschaft hat sie ihre wissenschaftliche Karriere beinahe uneingeschränkt fortgesetzt. Seit Juni 2009 ist Dr. Friedrich unabhängig in einem eigenständig eingeworbenen DFG-Projekt innerhalb des Schwerpunktprogramms 1236 in Frankfurt tätig und beschäftigt sich zur Zeit mit Hochdruck- und Hochtemperatursynthesen von neuen, inkompressiblen Übergangsmetallkarbiden und -nitriden und deren Charakterisierung. Eine ihrer herausragenden Arbeiten wurde in „Physical Review Letters“ publiziert – dort hat sie gezeigt, dass bei extremen Bedingungen Rhenium mit Stickstoff reagiert. Diese Arbeit wurde als „Highlight“ von der ALS (Berkeley, USA) ausgewählt und damit auch

einem größeren Publikum vorgestellt. In dieser Arbeit wurde zum ersten Mal sehr erfolgreich Laue-Mikrodiffraction (mit μm Ortsauflösung) an Hochdruckproben aus DAC-Versuchen beschrieben. Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt von Frau Friedrich dient dem Verständnis von nichtbindenden Elektronenpaaren bei hohen Drücken. Sie hat nachgewiesen, dass in einigen Verbindungen stereochemisch aktive einsame Elektronenpaare bis zu sehr hohen Drücken existieren können

Frau Friedrichs Arbeiten sind bereits mehrfach gewürdigt worden. Als Studentin hat sie mehrere Preise für ihre Studienleistungen bekommen. Sie hat ein Christiane-Nüsslein-Volhard-Stipendium erhalten und die Goethe-Universität hat sie vorletztes Jahr als herausragende Nachwuchswissenschaftlerin ausgezeichnet.

Mit der Verleihung des Preises an Frau Friedrich hat die DGK eine Nachwuchswissenschaftlerin geehrt, die zweifellos auch in Zukunft mit herausragender Forschung unser Verständnis von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen erheblich vertiefen wird.

Bjoern Winkler, Frankfurt

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER
VERLEIHUNG DER
CARL-HERMANN-MEDAILLE 2011
AN HERRN GERNOT HEGER



Gernot Heger wird für seine herausragenden Arbeiten auf dem Gebiet der Phasenumwandlungen und Realstruktur sowie für seine prägende Rolle in der Instrumentierung für die Neutronenstreuung ausgezeichnet.

Gernot Heger fand den Einstieg in die Kristallographie über die Festkörperphysik: Nach seinem Physikstudium in Tübingen und der Diplomarbeit bei Gottfried Möllenstedt, einem der Pioniere der Elektronenoptik, promovierte er am Institut für Kristallographie der Universität Tübingen bei Professor Dachs – mit Arbeitsplatz am Forschungsreaktor FR 2 des Kernforschungszentrums Karlsruhe – zu Struktur und Magnetismus von KFeF_4 und RbFeF_4 . Das Interesse an der Kristallstruktur, den Phasenübergängen und dem niedrigdimensionalen Magnetismus von Übergangsmetall-Halogeniden und -Oxiden sowie deren Untersuchung insbesondere mittels Einkristall-Neutronenbeugung zieht sich als einer der Hauptstränge durch Gernot Hegers gesamtes wissenschaftliches Werk. Zu nennen sind etwa Arbeiten zu Fluoriden vom Weberit-Typ ($\text{Na}_2\text{NiFeF}_7$, $\text{Na}_2\text{NiCoF}_7$), zu den schichtförmigen Perowskit-Verwandten vom K_2NiF_4 -Strukturtyp wie K_2MnF_4 und $\text{Rb}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Cl}_4$ (Jahn-Teller-Effekt) und insbesondere auch zu solchen mit organischen Kationen wie $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$ – Gegenstand seiner Habilitationsschrift an der Universität Marburg – $(\text{CH}_3\text{ND}_3)_2\text{MnCl}_4$, $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{FeCl}_4$ und $(\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3)_2\text{MnCl}_4$. Hier stand, neben der Ermittlung hochpräziser Strukturdaten aus Einkristall-Beugungsexperimenten, immer auch die systematische Symmetriebeschreibung von Phasenübergängen und das Verständnis der resultierenden Realstrukturen im Zentrum seines Interesses.

Mit der Entdeckung der Kupfer-Sauerstoff-basierten Hochtemperatur-Supraleiter verschob sich der Fokus zu den oxidischen Schicht-Perowskiten. Zu Gernot Hegers meistzitierten Arbeiten aus diesem Bereich gehören Untersuchungen zu Struktur, Phasenübergängen, Verzwilligung und Domänenstrukturen in $(\text{La,Sr})_2\text{CuO}_4$, Nd_2CuO_4 , Gd_2CuO_4 und $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ sowie deren teilweise (z. B. $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{O}_7$) oder vollständig (z. B. $\text{RESr}_2\text{GaCu}_2\text{O}_7$) substituierten Derivaten. Ein weiterer wichtiger Beitrag im Bereich der Supraleiter beschäftigt sich mit der quantitativen Interpretation von dynamischen und statischen Anteilen der anisotropen atomaren Auslenkungsparameter durch einen Vergleich der Ergebnisse aus inelastischer und

elastischer Neutronenstreuung an $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Einkristallen. Nicht unerwähnt bleiben sollen auch Beiträge zum niedrigdimensionalen Magnetismus, zum Beispiel zum Spin-Peierls-Übergang in CuGeO_3 und zu strukturellen Instabilitäten in der Spin-Dimer-Verbindung $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$.

Ein ebenso zentrales Forschungsgebiet, zu dem Gernot Heger über viele Jahre wichtige Beiträge geliefert hat, stellt die Untersuchung struktureller Phasenübergänge in Wasserstoff-Brücken-gebundenen Kristallen dar, ein Bereich, in dem die Anwendung der Einkristall-Neutronenbeugung – ebenso wie bei der Untersuchung der Magnetstrukturen – praktisch ohne Alternative ist. Ein prominentes Beispiel für solche Fragestellungen aus Gernot Hegers wissenschaftlichem Werk bilden Kristalle des Formeltyps AH_2PO_4 (AD_2PO_4) mit $A = \text{K}, \text{Rb}, \text{Tl}, \text{Li}$, darunter auch das technisch wichtige Ferroelektrikum KH_2PO_4 (KDP). Durch systematische Untersuchungen an den reinen Substanzen sowie an Mischkristallen und deuterierten Proben (Isotopeneffekt) konnte die zentrale Bedeutung der statischen und dynamischen Ordnungs-Unordnungs-Effekte der Wasserstoffbrücken für die Struktur, Phasenübergänge und Eigenschaften dieser Verbindungen herausgearbeitet werden. Komplementär zu den Einkristall-Neutronenbeugungsexperimenten konnte durch hochauflösende Einkristall-Röntgenbeugungsuntersuchungen bei variabler Temperatur und im elektrischen Feld am KDP-analogen RbH_2PO_4 die Domänenstruktur genauer charakterisiert werden, die für das ferroelektrische Schaltverhalten von entscheidender Bedeutung ist. Neuere Arbeiten zu Wasserstoff-Brücken-gebundenen Phasen beschäftigen sich mit den zahlreichen Phasenübergängen im Super-Protonenleiter $(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SO}_4)_2$ und der Bedeutung der molekularen Fehlordnung und der Protonen-Verteilung für die Transporteigenschaften dieser Substanz. Weitere Arbeiten Gernot Hegers zum Themenfeld Phasenübergänge und Fehlordnung behandeln u. a. Sulfate (z. B. K_2SO_4 , CsLiSO_4), Selenate (NH_4HSeO_4 , ND_4DSeO_4), Vanadate und Phosphate ($\text{Pb}_3(\text{P}_x\text{V}_{1-x})_2\text{O}_8$) u. v. a. Auch zur Orientierungs-Fehlordnung in Rotatorphasen (z. B. C_{60} , Nickelhexamin-Salze, KClO_4) hat Gernot Heger eine Reihe von bedeutenden experimentellen Beiträgen geliefert.

Als drittes Leitmotiv steht über der wissenschaftlichen Arbeit von Gernot Heger die Ermittlung hoch präziser Einkristall-Neutronen-Beugungsdaten in Anwendungen, die die Charakteristika der Neutronen als strukturelle Sonde optimal ausnutzen. Zu diesen Arbeiten gehören Untersuchungen zur genauen Lokalisierung von leichten Atomen (insbesondere Wasserstoff, s. o.), zur Unterscheidung im Periodensystem benachbarter Elemente (z. B. im System $\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$) aber auch die Bestimmung von präzisen Besetzungszahlen z. B. von Sauerstoffpositionen in Hochtemperatur-Supraleitern. Sehr hohe Anforderungen an die Genauigkeit der Einkristall-Beugungsdaten stellen auch Untersuchungen zu photo-induzierten Strukturänderungen in Nitrosyl-Prussiten ($\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]2\text{D}_2\text{O}$, $\text{Ba}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]3\text{H}_2\text{O}$) oder zum Neutral-zu-ionisch-Übergang in Tetrathiafulvalen-p-Chloranil. Ähnlich hohe Anforderungen an die Präzision stellt die Bestimmung von Elektronen- und Spindichten in Kristallen durch Kombination von Einkristall-Röntgen- und Neutronen-Beugungsexperimenten. Auch zu diesem Themenbereich hat Gernot Heger bereits sehr früh und kontinuierlich bis heute Beiträge geliefert (Harnstoff 1980, 4-Methyl-Pyridine 1985 bis zum Cobalt-Olivin Co_2SiO_4 2010).

Nicht unerwähnt bleiben sollte schließlich, dass sich unter den meistzitierten Arbeiten Gernot Hegers solche zur Einkristall-Neutronen- und Röntgen-Strukturanalyse von ikosaedrischen Quasikristallen (Al-Pd-Mn, Al-Cu-Fe) sowie erste inelastische Neutronenstreu-Experimente an Al-Cu-Fe befinden.

Die Weiterentwicklung des wichtigsten Werkzeugs seiner Forschung, der Neutronenstreuung, war und ist ein zentrales Anliegen seiner wissenschaftlichen Aktivitäten aber auch seines vielfältigen organisatorisch-gestaltenden Engagements. Die Auszeichnung des wissenschaftlichen Lebenswerks Gernot Hegers durch die Carl-Hermann-Medaille schließt deshalb als weitere wesentliche Komponente seine Verdienste um die kristallographische Festkörperforschung mittels Neutronen in Deutschland und darüber hinaus ein.

Seit den ersten Kontakten mit der Neutronenstreuung im Rahmen seiner Doktorarbeit an zweidimensionalen Antiferromagneten hat Gernot Heger kontinuierlich Neutronenstreuexperimente durchgeführt und erheblich dazu beigetragen, Instrumente zur Diffraktion mit Neutronenstrahlung in Deutschland und in Europa für die Kristallographie auszubauen. Mit seiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Kernforschungszentrum Karlsruhe (heute Karlsruher Institut für Technologie, KIT) wurde Gernot Heger erstmalig zum Vermittler zwischen der Kristallographie und der damals noch im Aufbau befindlichen Neutronenstreuung. In diesen Jahren wurden sehr viele kristallographisch arbeitende Gruppen durch Gernot Heger zur Neutronenbeugung geführt. Manche Gruppen erkannten erst über Gernot Heger die Bedeutung, die die Neutronenbeugung in der Kristallographie haben kann. Mit Ende des Karlsruher Forschungsreaktors wurden zwei Instrumente an den Orphée-Reaktor in Saclay ausgelagert, darunter ein Vierkreisdiffraktometer, das Gernot Heger zunächst von Saclay und später von Aachen aus betreute. Über dieses langjährige Engagement konnten deutsche Gruppen an dem Vierkreisdiffraktometer sowie an allen anderen Instrumenten des Orphée-Reaktors experimentieren, lange bevor dies im größeren Rahmen durch die Förderung der Europäischen Gemeinschaft ermöglicht wurde. Mit der Berufung von Gernot Heger an die RWTH Aachen wurde er unmittelbar in Experimente am Dido-Reaktor im Forschungszentrum Jülich eingebunden.

Gleichzeitig galt es, die Weichen für die Nutzung der kommenden deutschen Neutronenquelle, der Forschungs-Neutronenquelle Heinz-Maier-Leibnitz (FRM II) in Garching, zu stellen. Gernot Heger wurde Vorsitzender des Instrumentierungs-Ausschusses des FRM II in der wesentlichen Anfangsphase, in der fast alle Strahlplätze vergeben wurden und konnte die Anliegen der Kristallographie in der Instrumentierung des FRM II geltend machen. Seit Beginn des FRM II stehen zwei Einkristall-, ein Pulverdiffraktometer sowie ein Instrument zur Untersuchung von Eigenspannungen für kristallographische Untersuchungen zur Verfügung. Das Einkristalldiffraktometer HEiDi an der heißen Quelle des FRM II wurde vollständig von der Gruppe von Gernot Heger aufgebaut. In den letzten Jahren wurde HEiDi für die Messung mit polarisierten Neutronen und dreidimensionaler Polarisationsanalyse weiterentwickelt (POLI-HEiDi), derzeit wird dieses Zusatzgerät zu einem eigenständigen Einkristalldiffraktometer mit polarisierten Neutronen (POLI) ausgebaut. Auch dies geht auf die Initiative von Gernot Heger zurück. Direkt in Anschluss an seine Tätigkeit im Instrumentierungsausschuss wurde Gernot Heger zum Vorsitzenden des Strategierats des FRM II. Hierbei und als Mitglied des Komitees Forschung mit Neutronen (KFN) hat sich Gernot Heger sehr für die Belange der Nutzer von Neutronenquellen eingesetzt. Es war Gernot Heger immer ein wichtiges Anliegen, dass der FRM II eine stabile politische und finanzielle Grundlage besitzt, ein Ziel, das heute erreicht zu sein scheint.

Heute stehen der Kristallographie in Deutschland sehr viele Möglichkeiten im Bereich der Neutronenstreuung offen, und die Weichen sind so gestellt, dass wir sehr optimistisch in die Zukunft schauen können. Zu dieser positiven Zukunftsperspektive hat das kontinuierliche Wirken von Gernot Heger sehr viel beigetragen.

Georg Roth, Aachen

HANS GEORG VON SCHNERING

1931 – 2010



Ziel der folgenden Zeilen ist es, die Arbeiten von Hans Georg von Schnering zu würdigen. Natürlich sind solche Würdigungen immer sehr subjektiv gefärbt, zumal der Autor 28 Jahre als Diplomand, Doktorand und wissenschaftlicher Mitarbeiter unter seiner Anleitung arbeiten durfte.

Als ich im Jahre 1972 meine Diplomarbeit beginnen wollte, war das Anorganisch-Chemische Institut der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster durch namhafte Professoren ein Mekka der Festkörperchemie, insbesondere durch Wilhelm Klemm und Harald Schäfer. Meine akademischen Lehrer in der anorganischen Chemie waren u. a. Klemm, Schäfer, von Schnering, Becher, Umland und weitere. Die Auswahl für eine Diplomarbeit und nachfolgende Promotion war groß und so wählte ich, mehr aus einem Bauchgefühl heraus, HGvS zu meinem Betreuer. Seine angebotenen Themen waren bereits damals sehr breit gestreut und in den sogenannten Strukturseminaren, die bei ihm direkt im Zimmer stattfanden, wurden einem die ersten Schritte beigebracht. Daneben hörte man in der benachbarten Mineralogie die systematischen Vorlesungen und Übungen von W. Hoffmann über Kristallstrukturbestimmung.

Über seine Lebensdaten und seinen Werdegang wurde bereits an anderer Stelle mehrfach berichtet [1,2]. Sein wissenschaftliches Werk ist in ca. 1000 Publikationen veröffentlicht, leider wurde er durch seinen zu frühen Tod daran gehindert, in seinen Augen wichtige Werke fertig zu stellen. So finden sich in seinem Nachlass zahlreiche Veröffentlichungsskizzen, bei denen, wie er manchmal scherzhaft auf die Frage nach dem Bearbeitungsstand der von den Mitarbeitern abgelieferten Entwürfe anmerkte, „nur noch die letzten beiden Sätze fehlen“. Dieses war bereits ein großes Lob, bedeutete es doch, dass der abgelieferte Entwurf nicht ganz schlecht sein konnte.

Das Studium der Chemie und seine Ausbildung schloss er 1964 mit der „Venia legendi“ ab. Bereits in seiner Diplomarbeit, in der Dissertation und der Habilitation [3–5] wurde ein erstes Gebiet erfolgreich erforscht. Die daraus entstandenen Veröffentlichungen zählen heute zu den „Klassikern“. Aus dieser Kenntnis heraus sammelte sich bei ihm ein breites, stetig anwachsendes Wissen an Strukturen verschiedenster Art an, das jederzeit abrufbar war und es ihm während vieler Diskussionen im Mitarbeiterkreis, bei Vorträgen und auch auf den Chemiedozententagungen erlaubte, Schwachstellen, Ungereimtheiten und besonders Essentielles von Strukturen zu erkennen. Das notwendige Werkzeug der modernen Röntgenstrukturanalyse erlernte er unter Zemann im Jahre 1959 in Göttingen, bei der Diplomarbeit und Dissertation waren Klemm und Hoppe seine Betreuer.

In den Jahren 1960–1963 untersuchte er komplexe Hydroxide, ternäre Fluoride und Metall-Cluster-Verbindungen. Seine Untersuchungen zur Gitterenergie und zur Systematik von Festkörperstrukturen und die zusammen mit den Mathematikern des Institutes für Physik und des Rechenzentrums der Universität Münster entwickelten Programme für die Rechenanlage ZUSE Z-22/Z-23 erlaubten ihm, schneller als mit einer Handrechenmaschine, die Fourier summationen und auch Potentialberechnungen durchzuführen [6]. In diesen Zeitraum fallen auch erste Strukturanalysen an Molekülverbindungen und Komplexen, geprägt durch Hilfsbereitschaft für andere Kollegen und Neugierde an interessanten Molekülen. Da über seinen bisherigen Weg von Münster nach Stuttgart bereits berichtet worden ist, wenden wir uns nun direkt seinen weitgespannten, wissenschaftlichen Arbeiten zu, die sich, einer von ihm selbst verfassten groben Einteilung folgend, in folgende Hauptgebiete einteilen lassen:

- Metall-Cluster-Verbindungen,
- Zintl-Phasen mit Polyanionen,
- quantenchemische Berechnungen und Visualisierungen,
- Clathrate und Ag_6 -Cluster-Verbindungen,
- Carbosilane, Polysilane, Siloxane, Silthiane etc.,
- elektrostatische Potential-Rechnungen,
- Organisation kristalliner Materie,
- physikalische Eigenschaften,
- binäre und ternäre Oxide, Hydroxide, Sulfide, Fluoride inkl. supraleitender Verbindungen,
- analytische Chemie,
- Komplexverbindungen in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen,
- organische Moleküle aus besonderem Interesse in Zusammenarbeit mit anderen Gruppen,
- Daten neuer Kristallstrukturen.

Noch in Münster übersetzte er gemeinsam mit B. Kolloch das Buch von Greenwood [8a] und erweiterte so frühe Kenntnisse über Gitterdefekte und nichtstöchiometrische Verbindungen.

Im Jahre 1978 wurde von der Akademischen Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, nach dem Tode von Fritz Laves ihm gemeinsam mit S. Haussühl (Köln), die Haupt-Herausgeberschaft der Zeitschrift für Kristallographie angetragen, einer Aufgabe, der er sich im Hinblick auf die lange Tradition dieser Zeitschrift und unter Berücksichtigung des starken Einflusses der „Acta Crystallographica“ (auch als Folge des 2. Weltkrieges) nicht versagen konnte. Rund 20 Jahre diente er als Editor, in seine Zeit fallen die Herausgabe der Supplements und auch die Gründung der „New Crystal Structures“, an deren Grundlagen auch Kollegen wie Bergerhoff, Parthé, Brown, Burzlaff, Allmann und später Grin Anteil hatten. Er hat die Aufgabe eines Editors gerne übernommen, war aber dann nach 20 Jahren und auch nach ausgedehnten Diskussionen bereit, diese in jüngere Hände zu geben. Seiner Auffassung, eine wissenschaft-

liche Zeitschrift hätte primär den Wissenschaftlern zu dienen und Verlagsinteressen hätten nur eine nachrangige Bedeutung, ist er jedenfalls treu geblieben.

Strukturbestimmungen erfolgten bei ihm in den Anfangsjahren zuerst klassisch nach Patterson- und Fourier-Methoden, später jedoch mit direkten Methoden, die durch seinen Schüler K. F. Tebbe im Arbeitskreis etabliert worden sind. Er verfügte über ein sehr ausgeprägtes Vorstellungsvermögen im dreidimensionalen Raum, was ihm gerade zu Beginn einer Strukturlösung sehr hilfreich war und zusammen mit den Biltz'schen Volumeninkrementen gute Abschätzungen erlaubten. Eine chemische Plausibilitätsprüfung ergab sehr häufig dann z. B. das Auffinden eines Sauerstoffatoms oder auch die Präsenz eines Ammoniak-solvatmoleküls, welches sich in der Struktur verborgen hielt.

Im Mittelpunkt seiner Arbeiten steht der große Zusammenhang zwischen Stöchiometrie (Zusammensetzung), Struktur und Eigenschaften von Festkörpern mit Metall-Cluster-Verbindungen, Polyanionen enthaltenden Verbindungen sowie die generelle Beschreibung der Organisation von Strukturen.

Eine der wichtigsten Arbeiten zu den Metall-Cluster-Verbindungen ist der gemeinsam mit H. Schäfer verfasste Artikel über Metall-Metall-Bindungen [7]. Leider gab es von diesem Artikel keine Fassung in englischer Sprache, sonst wäre dieser Arbeit sicherlich eine größere Verbreitung im angelsächsischen Raum zugekommen. Gemeinsam mit Wilhelm Klemm und Welf Bronger veröffentlichte er einen Übersichtsartikel [8], in dem auch über Metall-Metall-Bindungen diskutiert wurde.

Als Chemiker mit stark ausgeprägten mathematischen Interessen, eine Vorliebe, die er bereits im Gymnasium pflegte, versuchte er stets, seine Formalismen zu verallgemeinern, wie es im Fall der höheren Phosphane auf der Grundlage der ersten bestimmten Kristallstrukturen von Metall-Polyphosphiden realisiert wurde [9]. Später wurden diese Partial-Strukturen der Polyanionen von ihm und anderen Gruppen als richtig nachgewiesen. Der Artikel „Catenation of Phosphorus Atoms“, der sogenannte „Plattsburgh-Artikel“, war dann ein Nachschlagewerk in jedem Bereich seines Arbeitskreises in Stuttgart [10]. Die homonukleären Bindungen bei Hauptgruppenelementen wurden dann als Übersichtsartikel in der „Angewandten Chemie“ publiziert [11].

Zusammen mit „Altmeister“ Klemm wurde auch die Raumchemie der Phosphide umfassend abgehandelt [12]. Die Erstellung dieser Abhandlung erfolgte im Verlauf mehrerer Jahre, von Schnering begann bereits 1973 nach den Strukturbestimmungen der ersten Metallphosphide mit Polyanionen mit den Überlegungen dazu. Wilhelm Klemm schreibt darüber in einem handschriftlichen Brief am 05.01.1982: „Lieber Herr von Schnering! Ich freue mich sehr, dass wir nun zum Ende kommen; ich bin mit Ihnen der Meinung, dass wir ein gutes Stück Arbeit geleistet haben! Freilich ...“ [es folgen wichtige Korrekturen]. Die zahlreichen Strukturelemente in den Phosphiden verleiteten natürlich zu der reizvollen und später im wesentlichen gelösten Aufgabe, diese Strukturelemente auch durch Solvolyse in Lösung zu bringen und dadurch einen „unabhängigen“ Beweis für den Aufbau und die Stabilität zu erbringen. Eine Zusammenfassung darüber findet sich in [13]. Diese „Mobilisierungen“ aus dem festen Zustand in die „molekulare“ Form waren für ihn dann auch ein sehr wichtiger und schlagender Beweis für die Richtigkeit seiner Vorstellungen über den Aufbau der Zintl-Phasen.

Struktursystematiken waren sein Steckenpferd. So verwundert es nicht, dass er zusammen mit R. Nesper [14] die Defektvarianten allgemeiner Strukturtypen zur Beschreibung von Strukturen mit Polyanionen heranzog.

Wieder war es die Rheinisch-Westfälische Akademie der Wissenschaften, vor der er zusammenfassend über die Struktur und Eigenschaften von Verbindungen mit Clusteranionen berichtete [15].

Der erste Artikel in einer langen Reihe von Publikationen über die Krümmung chemischer Strukturen und daraus abgeleitet war der Artikel gemeinsam mit Sten und Stephen, dem ersteren als langjährigen wissenschaftlichen und auch persönlichen Freund, schon aus den Anfangszeiten des Hemdsärmelkolloquiums in Münster [15]. Diese Arbeit in der Zeitschrift für Kristallographie war gewissermaßen die Sternstunde für die späteren Arbeiten über POPS, PEPS und PNS [16–18].

Zur Darstellung der Flächen wurden in der ersten Zeit Drahtmodelle gelötet und dann lackiert, zahlreiche Lacke zur Ausbildung der Flächen wurden getestet. Später stellten andere Arbeitsgruppen die Flächen sogar mit Hilfe von Nylonstrümpfen dar. [18a]. Schon sehr früh präsentierte Sten Andersson bei einem seiner Besuche in Stuttgart die ersten Formen aus rot/blauem Kunststoff, die dann zusammengesetzt die Flächen ergaben. Auch die von Seifenblasen gebildeten Flächen in festem Rahmen waren gute Anschauungsmodelle. Dieser Modellbau wurde alsbald durch die ersten Rechner mit einer „schnellen Graphikkarte“ ersetzt.

Neben den neuen Entwicklungen zur Beschreibung von Krümmungen von Strukturen, den periodischen Potentialflächen und der Adaption chemischer Strukturen an Potentialflächen kamen die Beziehungen zwischen Strukturen und Eigenschaften als zentrales Thema aber nicht zu kurz [19–21]. Hier wurden immer wieder Fragen, die sich aus der stringenten Anwendung des Zintl-Klemm-Busmann-Konzepts ergaben, aufgegriffen und auch beantwortet.

Die Elektronenlokalisierungsfunktion ELF, ihre Definition und auch die ästhetische Darstellung der berechneten Werte stellt ein ausgezeichnetes Werkzeug zur Beschreibung der chemischen Bindung sowohl in Molekülen als auch im Festkörper dar. In der Rückschau scheinen wohl die wesentlichen Veröffentlichungen zu ELF die gemeinsamen Arbeiten mit Andreas Savin zu sein [29–33]. Ein besonders schönes Beispiel der Kombination mit ELF ist in [34] gegeben. Für die eine Augenweide darstellenden ästhetischen Bilder sei auf die entsprechenden zitierten Arbeiten verwiesen.

Polypniktide, insbesondere die Phosphide, aber auch Arsenide und Antimonide, waren ein Schwerpunkt der Arbeiten im Schnering'schen Arbeitskreis. So verwundert es nicht, wenn er auch zu der Enzyklopädie der Anorganischen Chemie seinen Beitrag leisten konnte [35], der dann vor einigen Jahren nochmals aktualisiert worden ist [36]. Käfig-Anionen wie P_7^{3-} , As_7^{3-} , P_{11}^{3-} , As_{11}^{3-} , P_{16}^{2-} , P_{10}^{6-} , P_{21}^{3-} , P_3^4 , P_6^4 , As_6^4 , $[BP_2]^{3-}$, As_8^{8-} , Si_5^{6-} und Si_{10}^{4-} sind einige schöne Beispiele für die in seinem Arbeitskreis erkannten Zintl-Anionen [Zitate siehe die diversen Übersichtsartikel]. Die Valenztautomerie der Anionen Y_7^{3-} ($Y = P, As$) zeigt in eindrucksvoller Weise die Tragweite dieser entwickelten Vorstellungen vom Aufbau der Zintl-Phasen generell [37].

Ein wesentliches Ziel seines Bestrebens war stets der nachvollziehbare Zusammenhang zwischen Struktur, kristallchemischen und physikalischen Eigenschaften, nicht nur bei den Zintl-Phasen. Darüber berichtete er bereits (zusammen mit W. Klemm) als eine seiner ersten

Arbeiten über den Patronit [7a]. Auch in den letzten Jahren seines Werkes standen Fragen nach spektroskopischen, quantenchemischen und physikalischen Eigenschaften wie Leitfähigkeit und Supraleitung oder der Zusammenhang zwischen Kristallstrukturen und Diffusionspfaden weiterhin im Mittelpunkt seines Interesses.

Relativ unbemerkt, da länger zurückliegend und in den Augen anderer vielleicht nicht so spektakulär, sind seine Arbeiten zu den elektrostatischen Gitterenergieberechnungen, denen er sich bereits in seiner Habilitation widmete. Diese Überlegungen waren auch die Grundlage von Nespers Programm zur Berechnung von periodischen Flächen. Erweiterungen dazu waren die Möglichkeit, Wasserstoff-Positionen im Hydroxiden und auch Potentialwerte für nicht besetzte Positionen zu berechnen. Die partiellen und reduzierten partiellen Madelung-Konstanten wurden von ihm definiert [38, 12, 15–17, 19, 22–24].

Arbeiten auf analytischem Gebiet sind nicht so häufig bei von Schnering. Dennoch wurden von ihm sehr früh Arbeitsverfahren z. B. zum Aufschluss der sehr luftempfindlichen Phosphide und Arsenide sowie der Silicide und Germanide eingeführt [39]. Die „kleine“ analytische Abteilung war notwendig, und sehr hilfreich, um die präparierten Stoffe schnell auch durch ihre analytische Zusammensetzung zu charakterisieren.

Es ist interessant, ob die in dieser Würdigung zitierten Arbeiten nicht nur aus subjektiver Sicht des Autors, sondern sich auch in der Rezeption durch die Fachkollegen wiederfinden lassen [40]. Zu den ersten fünf meistzitierten Arbeiten gehören die folgenden. Dabei ist zu berücksichtigen, dass Buchartikel nicht im „Science Citation Index“ ausgewertet werden. Zwischen der Arbeit Nr. 5 und der nachfolgenden Arbeit ergibt sich eine Lücke in der Häufigkeit der Zitate von 233 zu 159, also etwa 30 %.

Zitate / Autoren / Titel / Zeitschrift (nur die Int. Ed. der Angew. Chem. ist hier zitiert):

- **275** – H. G. von Schnering: Homoatomic Bonding of Main Group Elements. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 20 (1981) 33–51.
- **263** – A. Savin, A. D. Becke, J. Flad, R. Nesper, H. Preuss, H. G. von Schnering: A New Look at Electron Localisation, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 30 (1991) 409–412.
- **253** – A. Savin, O. Jepsen, J. Flad, O. K. Andersen, H. Preuss, H. G. von Schnering: Electron Localisation in Solid-State Structures of the Elements: I. The Diamond Structure, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 31 (1992) 187–188.
- **235** – H. Schäfer, H. G. von Schnering, J. Tillack, F. Kuhn, H. Wöhrle, H. Baumann: Neue Untersuchungen über die Chloride des Molybdäns, *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 353 (1967) 281–310.
- **233** – H. G. von Schnering, W. Hönle: Bridging Chasms with Polyphosphides, *Chem. Rev.* 88 (1988) 243–273.

(Datum der Recherche: 7. März 2011)

Auch von Schnering selbst hat vier dieser fünf Arbeiten als wichtig eingestuft, lediglich bei den Metall-Cluster-Verbindungen favorisierte er die Arbeit [7] als besonders wichtig. Diese andere Einschätzung aus seiner Sicht liegt wohl im Wesentlichen an der nur in deutscher Sprache vorhandenen Version dieses Artikel, da es in den Anfangsjahren der „International Edition“ der „Angewandten Chemie“ nicht immer zu einer 1:1-Übersetzung kam. Er selbst hat diesen Umstand stets bedauert. Eine detaillierte Analyse seiner Veröffentlichungen ist in Vorbereitung [40].

Vor einigen Jahren verfasste P. Göllitz ein Editorial in der „Angewandten Chemie“ [41]. Für den Zeitraum 1962–2003 findet sich von Schnering mit 77 Arbeiten in der „Angewandten

Chemie“ unter den ersten 20 führenden Autoren. Auch dieses Bild deckt sich mit seiner eigenen Einschätzung. Er zögerte aber auch nicht, sehr gute Arbeiten bei in seinen Augen ungerechtfertigter Kritik mit der gehörigen Portion Selbstvertrauen dann nicht in der „Angewandten Chemie“ zu platzieren. Neben der „Angewandten Chemie“ waren Veröffentlichungen in der „Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie“, auch aus Gründen der Aufrechterhaltung des Kontaktes zu den Kollegen in der DDR, für ihn stets auch die Erfüllung einer Pflicht im gesamtdeutschen Sinne. Dieses tiefere Verständnis, sowohl für die Nöte der Chemikerkollegen in der DDR – immerhin war er in Thüringen zur Welt gekommen – als auch für die Förderung der darniederliegenden Chemie im Baltikum – seine Familie stammte aus dem Baltikum – führte dazu, dass er sich nach der Wende stark für die Förderung der Chemie im „Beitrittsgebiet“ engagierte und sich auch in die Fördermaßnahmen diverser Organisationen mit voller Kraft einbrachte. Anlässlich seiner Emeritierung stiftete er große Teile seiner Bibliothek nach Dorpat (Tallin).

Schlussbemerkungen: Auf Grund des zur Verfügung stehenden limitierten Platzes wurde bewusst auf die Hervorhebung der zahlreichen Arbeiten im Zusammenhang mit der Strukturbestimmung an organischen Molekülen und komplexen Verbindungen für andere Arbeitskreise verzichtet. Diese Arbeiten repräsentieren etwa 35 % seiner gesamten Veröffentlichungen, dazu kommen die ca. 200 Veröffentlichungen in Form der „New Crystal Structures“ (NCS). Diese beiden, auch in der Anzahl, gewichtigen Anteile an seinen Veröffentlichungen werden oftmals von Außenstehenden als scheinbar geringwertig eingeschätzt, aber es sind gerade auch diese Arbeiten, in denen H. G. von Schnering seine Qualität als „Kristallchemiker“ eindrucksvoll unter Beweis stellte und so Stein für Stein eines „Mosaiks“ des Verständnisses für die Organisation von Strukturen und deren Aufbau sowie den Eigenschaften gelegt hat. Moleküle und Festkörper, seien sie 1-, 2- oder 3-dimensional aufgebaut, waren für von Schnering generell „Gleichberechtigte“, wie er es auch treffend mit dem Titel zahlreicher Vorträge „Molekulares im Kollektiven“ ausgedrückt hat. Es war gerade diese „Amtshilfe“ für die Kollegen, besonders auch für solche aus der organischen Chemie, die ihm am Herzen lag, natürlich getrieben von einem gewissen „sportlichen“ Ehrgeiz. Die Trennung zwischen organischer und anorganischer Chemie war ihm sowieso ein Greuel, zumal sich „die Struktur gegen ihre Beschreibung nicht wehren könne“, was er in vielen Fällen als Bemerkung bei vorgestellten Strukturbeschreibungen, die eine Struktur anders beschrieben, als er es tun würde, fallen ließ.

Die Nichterwähnung einzelner Arbeiten stellt keinesfalls ein qualitätsminderndes Merkmal oder Urteil dar, daher wurde auch hier auf Abbildungen bewusst verzichtet. Ebenso wurde darauf verzichtet, einzelne Mitarbeiter und Kollegen namentlich im Text zu erwähnen (bis auf wenige Ausnahmen), hierzu sei auf das geplante Schriftenverzeichnis [42] verwiesen. Diejenigen, die das Glück hatten, H. G. von Schnering persönlich zu kennen und mit ihm, teilweise auch für viele Jahre, in Münster und Stuttgart zusammen forschen und arbeiten konnten, wissen ohnehin am besten um den Anteil der Einzelnen am Gesamten.

Der Autor dankt dem Max-Planck-Institut für Festkörperforschung Stuttgart für Unterstützung bei der Nachlassaufbereitung.

Wolfgang Höhle, Ettlingen

Literatur

- [1] A. Simon: Wer ist's?, *Nachr. Chem. Tech. Lab.* 29 (1981) 326. A. Simon: Hans Georg von Schnering (1931–2010), *Angew. Chem.* 122 (2010) 7541–7542, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 49 (2010) 7383–7384.
- [2] R. Nesper: Hans Georg von Schnering Memorial, *Z. Kristallogr.* 226 (2011) III–V. M. Jansen: Hans Georg von Schnering 1931–2010, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 637 (2011) 783–784. A. Simon: Hans Georg von Schnering, in *Jahrbuch der MPG 2010*, April 2011, *Personalia* 21–22.
- [3] H. G. von Schnering: Untersuchungen an Bariumdioxozinkat und einigen verwandten Verbindungen, Diplomarbeit Universität Münster, 1958.
- [4] H. G. von Schnering: Ternäre Chalkogenide vom Typ ABC₂: Untersuchungen an BaZnO₂, SrZnO₂, BaZnS₂, SrZnS₂ und BaCdO₂, Dissertation Universität Münster, 27. Februar 1960.
- [5] H. G. von Schnering: Beiträge zur Chemie binärer und ternärer Halogeno- und Oxoverbindungen der Metalle, Habilitationsschrift Münster, 1964.
- [6] H. G. von Schnering: Als Chemiker am Elektronenrechner, *Zuse Forum* 2 (1963) 17–18, siehe auch: *Münstersche Zeitung* 16. Juli 1961, *Münster Tag für Tag*.
- [7] H. Schäfer, H. G. von Schnering: Metall-Metall-Bindungen bei niederen Halogeniden, Oxyden und Oxydhalogeniden schwerer Übergangsmetalle, *Angew. Chemie* 76 (1964) 833–849.
- [7a] W. Klemm, H. G. von Schnering: Magnetisches Verhalten und Kristallstruktur des Patronits, *Naturwissenschaften* 52 (1965) 12.
- [8] W. Klemm, W. Bronger, H. G. von Schnering: Die neuere Entwicklung der Anorganischen Chemie mit einigen Beispielen aus der Chemie der Übergangselemente, *Jahrbuch 1966*, S. 451–473, Landesamt für Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen, Westdeutscher Verlag Köln/Opladen.
- [8a] N. N. Greenwood: Ionenkristalle, Gitterdefekte und nichtstöchiometrische Verbindungen, übersetzt von H. G. von Schnering und B. Kolloch, Verlag Chemie, GmbH, Weinheim, 1973, 185 S., 60 Abb., 26 Tab.
- [9] H. G. von Schnering: Strukturelemente in Polyphosphiden, *Nachr. Chem. Techn.* 21 (1973) 440–442.
- [10] H. G. von Schnering: Catenation of Phosphorus Atoms, Chap. 14, 317–348, in A. L. Rheingold (Ed.): „Homoatomic Rings, Chains and Macromolecules of Main-Group Elements“, Elsevier, New York, 1977.
- [11] W. Klemm, H. G. von Schnering: Die molaren Volumina von Metall-Phosphiden, ein Beitrag zur Raumchemie der festen Stoffe, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 491 (1982) 9–26.
- [12] H. G. von Schnering: Homonucleare Bindungen bei Hauptgruppenelementen, *Angew. Chem.* 93 (1981) 44–63, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 20 (1981) 33–51.
- [13] H. G. von Schnering: Polyanionic Clusters in Solids and Their Chemical Reactions, *Amer. Chem. Soc. Symposium Series* 232 „Rings, Clusters and Polymers of the Main Group Elements“, A. H. Cowley (Ed.), S. 69–90 (1983).
- [14] R. Nesper, H. G. von Schnering: Strukturen mit Polyanionen als Defektvarianten allgemeiner Strukturtypen, *Petr. Mitt.* 32 (1983) 195–208.
- [15] S. Andersson, S. T. Hyde, H. G. von Schnering: The intrinsic curvature of solids, *Z. Kristallogr.* 168 (1984) 1–17.
- [16] R. Nesper, H. G. von Schnering: Periodische Equi-Potentialflächen (PEPS), *Z. Kristallogr.* 170 (1985) 138–140.
- [17] H. G. von Schnering: Die Krümmung in chemischen Strukturen, *Jahrbuch Heidelberger Akademie der Wissenschaften* 1985, S. 90–92.

- [18] R. Nesper, H. G. von Schnering: Periodische Potentialflächen in Kristallstrukturen, *Angew. Chem.* 98 (1986) 111–113, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 25 (1986) 110–112.
- [18a] W. Fischer, E. Koch: Persönliche Mitteilung (vom 28.06.2011) über den Einsatz von Nylonstrümpfen zur Visualisierung von Flächen, Diskussionstagung der AGKr, Gießen, 1986.
- [19] H. G. von Schnering: Clusteranionen: Struktur und Eigenschaften, Rheinisch-Westfälische Akademie der Wissenschaften, Vorträge N 325, 7-30, Westdeutscher Verlag, Opladen, 1984.
- [20] H. G. von Schnering: Zintl-Phasen: Prinzipien von Struktur und Bindung, *Nova Acta Leopoldina Halle (Saale)* 59, Nr. 264 (1985) 165–182.
- [21] H. G. von Schnering, W. Hönle: Bridging Chasms with Polyphosphides, *Chem. Rev.* 88 (1988) 243–273.
- [22] H. G. von Schnering: Äquipotentialflächen in Kristallen, *Z. Kristallogr.* 174 (1986) 182–183.
- [23] A. C. Eliasson, K. Larson, S. Andersson, S. T. Hyde, R. Nesper, H. G. von Schnering: On the Structure of Native Starch – An Analogue to the Quartz Structure, *Starch-Stärke* 39 (1987) 147–152.
- [24] H. G. von Schnering, R. Nesper: Die natürliche Anpassung von chemischen Strukturen an gekrümmte Flächen, *Angew. Chem.* 99 (1987) 1097–1119, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 26 (1987) 1059–1080.
- [25] H. G. von Schnering: Die Krümmung chemischer Strukturen, *Nova Acta Leopoldina Halle (Saale)* NF 65, Nr. 277 (1991) 89–103.
- [26] H. G. von Schnering, R. Nesper: The Curvature of Chemical Structures, *J. Physique Colloq.* C7 (1990) 383–396.
- [27] H. G. von Schnering, R. Nesper: Nodal Surfaces of Fourier Series: Fundamental invariants of structured matter, *Z. Phys. B – Condensed Matter* 83 (1991) 407–412.
- [28] H. G. von Schnering, M. Oehme, G. Rudolf: Three-dimensional Periodic Nodal Surfaces which envelope the Threefold and Fourfold Cubic Rod Packings, *Acta Chem. Scand.* 45 (1991) 873–876.
- [29] A. Savin, A. D. Becke, J. Flad, R. Nesper, H. Preuss, H. G. von Schnering: Ein neuer Blick auf die Elektronenlokalisierung, *Angew. Chem.* 103 (1991) 421–424.; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 30 (1991) 409–412.
- [30] A. Savin, H. J. Flad, J. Flad, H. Preuss, H. G. von Schnering: Zur Bindung in Carbosilanen, *Angew. Chem.* 104 (1992) 185–186, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 31 (1992) 185–186.
- [31] A. Savin, O. Jepsen, J. Flad, O. K. Andersen, H. Preuss, H. G. von Schnering: Die Elektronenlokalisierung in den Strukturen der Elemente – I. Die Diamantstruktur, *Angew. Chem.* 104 (1992) 186–188, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 31 (1992) 187–188.
- [32] M. Kohout, A. Savin, J. Flad, H. Preuss, H. G. von Schnering: Bond Polarity in Solids as shown by the electron localisation function, *Computer aided Innovation of New Materials II*, M. Doyama et al. (Ed.), Elsevier Science Publ. (1993) 201–203.
- [33] A. Burkhardt, U. Wedig, H. G. von Schnering, A. Savin: Die Elektronen-Lokalisierungs-Funktion in closo-Bor Clustern, *Z. Anorg. Allg. Chem.* 619 (1993) 437–441.
- [34] H. G. von Schnering, R. H. C. Gil, W. Hönle, A. Burkhardt, G. Krier, O. K. Andersen: Die Stabilisierung des Rb^- -Ions in $\text{Na}_{16}\text{Rb}_7\text{Sb}_7 = \text{Na}_{16}(\text{RbRb}_6)\text{Sb}_{17}$, *Angew. Chem.* 107 (1995) 81–83, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 34 (1995) 103–105.
- [35] H. G. von Schnering, W. Hönle: Phosphides: Solid State Chemistry, in: *Encyclopedia of Inorg. Chem.*, R. B. King (Ed.), Wiley & Sons, New York (1994) 3106–3143.

- [36] R. Pöttgen, W. Höhle, H. G. von Schnering: Phosphides: Solid State Chemistry Vol. VII, in: R. B. King (Ed.) *Encyclopedia of Inorganic Chemistry*, Second Edition, Wiley & Sons, Chichester (2005) 4255–4308.
- [37] W. Höhle, H. G. von Schnering: Valenztautomerie der Heptaheteronortricyclane $[P_{7-x}As_x]^{3-}$, *Angew. Chem.* 98 (1986) 370–372, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 25 (1986) 352–353.
- [38] H. G. von Schnering: Zusammenhänge zwischen Coulomb-Potentialen und Protonenlagen bei kristallinen Hydroxoverbindungen. *Angew. Chem.* 78 (1966) 113, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 5 (1966) 133.
- [39] O. Buresch, H. G. von Schnering: Ein neuer Teflon-Einsatz zum Säureaufschluss kleiner Proben im Druckaufschluß-System Berghof DA-1, *Fresenius' Z. Anal. Chem.* 319 (1984) 418–420. O. Buresch, W. Höhle, H. G. von Schnering: Quantitative Bestimmung von Iod mittels AES-ICP in anorganischer und organischer Matrix, *Fresenius' Z. Anal. Chem.* 325 (1986) 607–610.
- [40] W. Höhle, W. Marx: Hans Georg von Schnering – from the Viewpoint of Bibliometrics (in Vorbereitung, 2011).
- [41] P. Göllitz: Die Zukunft der Chemie (Editorial), *Angew. Chem.* 116 (2004) 3702–3704.
- [42] W. Höhle: Hans Georg von Schnering – Schriftenverzeichnis (in Vorbereitung, 2011).

ANKÜNDIGUNGEN:

DGK 2012

100 Years of X-Ray Diffraction

Laue Day and 20th Annual Meeting of the German Crystallographic Society (DGK)



12–15 March 2012

MUNICH

Topics

- Frontiers in Crystallographic Techniques and Instrumentation
- Frontiers in Structural Analyses – Electron Density and other Precision Studies
- Frontiers of Structural Biology Methods
- Hot New Biomolecular Structures
- Structure of Biological Macromolecular Complexes
- Biocrystallography and Medicine
- Pressure-, Field-, & Temperature-Induced Processes
- Crystallography in Engineering and Technology
- Structure & Function – New and Smart Materials
- Structure & Function – Biomaterials
- Theory & Simulation
- Electron Microscopy & Diffraction
- Spectroscopy
- Aperiodic Crystals
- Structural Chemistry & Mineralogy
- Advanced Synthesis Methods for Inorganic Materials

www.dgk-conference.de



21st Annual Conference of the German Crystallographic Society



19–22 **March** 2013
Freiberg (Sachsen)



www.dgk-conference.de



TAGUNGEN UND TERMINE

Februar 2012

- 06.02. – 08.02.2012 **4th Winter School on Soft X-rays in Macromolecular Crystallography** in Grenoble (Frankreich)
 Kontakt: www.esrf.eu/events/conferences/users-meeting-2012-workshops/mx-school
- 25.02. – 29.02.2012 **Biophysical Society 56th Annual Meeting** in San Diego (USA)
 Kontakt: www.biophysics.org/2012meeting
- 27.02. – 29.02.2012 **Polymorphism and Crystallisation** in Amsterdam (Niederlande)
 Kontakt: www.iqpc.com/Event.aspx?id=621498

März 2012

- 04.03. – 07.03.2012 **14th EMPG Meeting** in Kiel
 Kontakt: www.empg2012.uni-kiel.de
 Abstracts: 22.12.2011
- 04.03. – 09.03.2012 **International Collaboration on Advanced Neutron Sources XX** in Bariloche (Argentinien)
 Kontakt: www.icansxx.com.ar
 Abstracts: 28.10.2011
- 05.03. – 09.03.2012 **International ICFA Workshop on Future Light Sources** in Newport News (USA)
 Kontakt: www.jlab.org/conferences/FLS2012
 Abstracts: 01.02.2012
- 05.03. – 16.03.2012 **43rd IFF Spring School** in Jülich
 Kontakt: www.fz-juelich.de/pgi/EN/Leistungen/SchoolsAndCourses/SpringSchool/_node.html
 Registrierung: 31.12.2011
- 07.03. – 09.03.2012 **Deutsche Kristallzüchtungstagung 2012** in Freiberg
 Kontakt: www.dgkk.de/DKT-2012
 Abstracts: 15.01.2012
- 08.03. – 16.03.2012 **32. Berlin School on Neutron Scattering** in Berlin
 Kontakt: www.helmholtz-berlin.de/events/neutronschool
 Registrierung: 15.10.2011

- 12.03. – 15.03.2012 **20. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie** in München
Kontakt: www.dgk-conference.de
Abstracts: 08.12.2011
- 14.03. – 16.03.2012 **7th International Workshop on X-ray Radiation Damage to Biological Crystalline Samples** in Oxfordshire (Großbritannien)
Kontakt: www.diamond.ac.uk/Home/Events/RD7---2012.html
Abstracts: 20.02.2012
- 25.03. – 29.03.2012 **PCG-SCMP Powder Diffraction and Rietveld Refinement School** in Durham (Großbritannien)
Kontakt: www.dur.ac.uk/john.evans/webpages/pcg_rietveld_school_2012.htm
Registrierung: 13.01.2012
- 25.03. – 30.03.2012 **76. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung** in Berlin
Kontakt: <http://berlin12.dpg-tagungen.de>
Abstracts: 01.12.2011
- 26.03. – 27.03.2012 **International Symposium Small Molecules in Interactions** in Bochum
Kontakt: www.ruhr-uni-bochum.de/smi
Abstracts: 31.12.2011
- 27.03. – 30.03.2012 **MDANSE School 2012: Molecular Dynamics to Analyse Neutron Scattering Experiments** in Grenoble (Frankreich)
Kontakt: www.ill.eu/MDANSE
Registrierung: 20.01.2012
- 30.03. – 02.04.2012 **Synchrotron Radiation in Polymer Science** in San Francisco (USA)
Kontakt: www.srps5.org

April 2012

- 09.04. – 13.04.2012 **MaThCryst School on Fundamental Crystallography** in Mahdia (Tunesien)
Kontakt: www.tunicrystal.org/VerAn
Registrierung: 05.03.2012
- 09.04. – 13.04.2012 **2012 MRS Spring Meeting** in San Francisco (USA)
Kontakt: www.mrs.org/spring2012
Abstracts: 01.11.2011

- 10.04. – 13.04.2012 **Free-Electron Lasers: From Fundamentals to Applications**
in Bad Honnef
Kontakt: www.hzdr.de/heraeus503
Registrierung: 31.01.2012
- 16.04. – 19.04.2012 **BCA Spring Meeting 2012** in Warwick (Großbritannien)
Kontakt: <http://crystallography.org.uk/spring-meeting-2012>
Abstracts: 16.01.2012
- 19.04. – 20.04.2012 **Science & Scientists @ ESS 2012** in Berlin
Kontakt: http://esss.se/ess_conferences/?page_id=54
Registrierung: 08.03.2012
- 22.04. – 27.04.2012 **RapiData 2012 – Data Collection & Structure Solving at the NSLS: A Practical Course in Macromolecular X-Ray Diffraction Measurement** in Upton (USA)
Kontakt: www.bnl.gov/rapidata
Registrierung: 31.01.2012

Mai 2012

- 10.05. – 11.05.2012 **Seminar: Röntgendiffraktometrie für die Praxis** in Wuppertal
Kontakt: www.taw.de/Roentgendiffraktometrie_fuer_die_Praxis/werkstoffe-und-oberflaechentechnik/51034101W2.html
- 14.05. – 18.05.2012 **E-MRS 2012 Spring Meeting** in Straßburg (Frankreich)
Kontakt: www.emrs-strasbourg.com
Abstracts: 12.01.2012
- 20.05. – 25.05.2012 **International Particle Accelerator Conference (IPAC 12)**
in New Orleans (USA)
Kontakt: <http://www.ipac12.org>
Abstracts: 07.12.2011
- 31.05. – 10.06.2012 **Present and Future Methods for Biomolecular Crystallography**
in Erice (Italien)
Kontakt: www.crystalleric.org/Erice2012/2012.htm
Registrierung: 30.11.2011

Juni 2012

- 04.06. – 08.06.2012 **Third Course on Neutron Scattering Applications in Structural Biology** in Oak Ridge (USA)
Kontakt: <http://neutrons.ornl.gov/conf/gcnb2012>
Registrierung: 19.03.2012

- 17.06. – 20.06.2012 **European Conference of Crystal Growth 2012**
in Glasgow (Großbritannien)
Kontakt: <http://eccg4.org>
Abstracts: 16.03.2012
- 19.06. – 23.06.2012 **Insubria International Summer School on Crystallography for Health and Biosciences** in Como (Italien)
Kontakt: <http://scienze-como.uninsubria.it/iiss2012/IISS2012.htm>
Registrierung: 15.04.2012

Juli 2012

- 02.07. – 05.07.2012 **9th International Workshop on Polarised Neutrons in Condensed Matter Investigations (PNCMI 2012)** in Paris (Frankreich)
Kontakt: <http://iramis.cea.fr/meetings/2012PNCMI>
Abstracts: 31.03.2012
- 09.07. – 13.07.2012 **11th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI 2012)** in Lyon (Frankreich)
Kontakt: <http://sri2012.org>
Abstracts: 15.01.2012
- 15.07. – 18.07.2012 **Science at FELs 2012 – SRI 2012 Satellite Meeting** in Hamburg
Kontakt: <http://science-at-fels-2012.desy.de>
Abstracts: 30.01.2012
- 22.07. – 28.07.2012 **15th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure**
in Peking (China)
Kontakt: www.xafs15.org
Abstracts: 30.03.2012
- 28.07. – 01.08.2012 **ACA Meeting 2012** in Boston (USA)
Kontakt: www.amerystalassn.org/2012-meeting-homepage
Abstracts: 31.03.2012

August 2012

- 07.08. – 11.08.2012 **27th Meeting of the European Crystallographic Association**
in Bergen (Norwegen)
Kontakt: <http://ecm27.ecanews.org>

September 2012

- 02.09 – 06.09.2012 **7th International Conference on Aperiodic Crystals**
in Cairns (Australien)
Kontakt: <http://rsc.anu.edu.au/~perri/Aperiodic>

- 02.09 – 06.09.2012 **22nd Conference on Applied Crystallography**
in Targanice/Andrychów (Polen)
Kontakt: www.cac.us.edu.pl
Abstracts: 31.03.2012
- 02.09 – 06.09.2012 **1st European Mineralogical Conference (EMC 2012)** in Frankfurt
Kontakt: <http://emc2012.uni-frankfurt.de>
Abstracts: 15.05.2012
- 13.09 – 14.09.2012 **Satellite Workshop – Synchrotron-Based High Resolution X-ray Diffraction (XTOP 2012)** in Moskau (Russland)
Kontakt: www.xtop12.org/pages/workshop-satellite-6.html
- 15.09 – 20.09.2012 **11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP 2012)** in Sankt Petersburg (Russland)
Kontakt: www.xtop12.org
Abstracts: 01.04.2012
- 15.09 – 20.09.2012 **6th European Charge Density Meeting** in Štrbské Pleso (Slowakei)
Kontakt: <http://ecdm6.stuba.sk>
Abstracts: 01.07.2012
- 16.09 – 21.09.2012 **12th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure** in Saint-Malo (Frankreich)
Kontakt: www.synchrotron-soleil.fr/Workshops/2012/ICESS2012
Abstracts: 15.06.2012
- 17.09 – 20.09.2012 **7th International Sample Environment Workshop**
in Sydney (Australien)
Kontakt: [www.ansto.gov.au/research/bragg_institute/
current_research/conferences_and_workshops/
sample_environment_at_neutron_scattering_facilities](http://www.ansto.gov.au/research/bragg_institute/current_research/conferences_and_workshops/sample_environment_at_neutron_scattering_facilities)
Abstracts: 20.06.2012
- 23.09. – 28.09.2012 **14th International Conference on the Crystallization of Biological Macromolecules (ICCBM 14)** in Huntsville (USA)
Kontakt: <http://iccbm14.org>
Abstracts: 23.06.2012
- 25.09 – 27.09.2012 **Materials Science & Engineering Meeting MSE 2012** in Darmstadt
Kontakt: www.dgm.de/dgm/mse-congress
Abstracts: 17.02.2012

November 2012

18.11. – 23.11.2012 **International Small-Angle Scattering Conference (SAS2012)** in Sydney (Australien)

Kontakt: www.sas2012.com

Abstracts: 26.05.2012

26.11. – 30.11.2012 **2012 MRS Fall Meeting** in Boston (USA)

Kontakt: www.mrs.org/fall2012

Dezember 2012

06.12. – 07.12.2012 **Seminar: Röntgendiffraktometrie für die Praxis** in Altdorf (bei Nürnberg)

Kontakt: [www.taw.de/Roentgendiffraktometrie fuer die Praxis/
werkstoffe-und-oberflaechentechnik](http://www.taw.de/Roentgendiffraktometrie_fuer_die_Praxis/werkstoffe-und-oberflaechentechnik)

März 2013

10.03. – 15.03.2013 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie** in Regensburg

Kontakt: www.dpg-physik.de/veranstaltungen

19.03. – 22.03.2013 **21. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie** in Freiberg

Kontakt: www.dgk-conference.de

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@dgkristall2.de)

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)

Antrag auf Aufnahme in die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.

An den Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
Herrn Prof. Dr. Udo Heinemann, Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin,
Postfach 74 02 38, 13092 Berlin, Germany (Fax: 030 9406 2548).

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

Ich bin Student und/oder Doktorand [], Pensionär [], arbeitslos [].

[] Frau [] Herr, Titel/Akad. Grad: Beruf (z. B. Dipl.-Min.):

Name: Vorname(n):

Dienstschrift: **Geburtsdatum:**

Universität/Firma:

Institut/Abteilung:

Straße: Ort: PLZ: Land (falls≠D):

Telefon: Fax:

Privatanschrift: **E-Mail:**

Straße: Telefon :

Ort: PLZ: Land (falls≠D):

Die Post soll an die [] Dienstschrift [] Privatanschrift geschickt werden.

(Wenn keine schwerwiegenden Gründe dagegensprechen, sollte der Versand an die Dienstadresse erfolgen, weil durch Sammelzustellung von Rundschreiben Portokosten gespart werden können.)

Jahresbeitrag:

Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung (siehe Anhang).

Bankverbindung der DGK: Sparda-Bank Hamburg, Konto-Nr. 608 599, BLZ 206 905 00

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

Ort, Datum: Unterschrift:

Der Antrag wird befürwortet von folgenden DGK-Mitgliedern

Name Ort Unterschrift

1.

2.

Bevorzugt sollte die Beitragszahlung über Bankeinzug erfolgen, füllen Sie dazu bitte den folgenden Abschnitt aus.

Hiermit ermächtige ich die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. bis auf Widerruf, meine Mitgliedsbeiträge ab Jahresbeitrag 20..... von dem nachfolgenden Konto einzuziehen:

Kontoinhaber: Name: Vorname:
(wie bei der Bank angegeben)

Bankinstitut:

Konto-Nummer: [] Bankleitzahl: []

Ort, Datum: Unterschrift: b.w.

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, partiellkristalline und nanokristalline 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

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

Der Jahresbeitrag ist für das laufende Jahr bis jeweils zum 31. Januar zu entrichten. Er wird in der Regel mittels Bankeinzugsverfahren eingezogen.

Der Jahresmitgliedsbeitrag beträgt 30 € und für studentische Mitglieder 10 €. Auf Antrag kann der Vorstand einem Mitglied einen reduzierten Beitragssatz entsprechend der folgenden Beitragstabelle genehmigen:

A	Ordentliche Mitglieder	30 €
B	Studentische Mitglieder	10 €
D	Doktoranden (bis maximal zum 31. Lebensjahr)	10 € auf Antrag
E	Stellungslose Mitglieder	10 € auf Antrag
F	Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand	10 € auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand

Ein Ruhestandsmitglied kann ab Vollendung des 65. Lebensjahres auf Antrag eine lebenslange Mitgliedschaft durch Entrichten eines nicht zeitnah zu verwendenden Einmalbetrages (ohne weitere zukünftige Beitragszahlungen) von 120 € erwerben.

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 21. September 2011 in Salzburg beschlossen.

Einzugsermächtigung

Hiermit ermächtige ich die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. bis auf Widerruf, meine Mitgliedsbeiträge ab Jahresbeitrag 20__ von dem nachfolgenden Konto einzuziehen:

Kontoinhaber: Name: Vorname:

Bankinstitut:

Konto-Nummer: |_|_|_|_|_|_|_|_|_|_| Bankleitzahl: |_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|

Ort, Datum: Unterschrift: