D
G
K

Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). Sie erscheinen zur Zeit jährlich im Sommer. 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 GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Impact GbR, Dectris Ltd., Excillum AB, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Jena Bioscience GmbH, PANalytical GmbH, Rigaku Corp., Röntgenlabor Dr. M. Ermrich, STOE & Cie GmbH.

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:
Prof. Dr. Dirk C. Meyer oder Dr. Hartmut Stöcker
Technische Universität Bergakademie Freiberg
Institut für Experimentelle Physik
Leipziger Straße 23, 09596 Freiberg
Tel.: 03731-39-2773, Fax: 03731-39-4314
E-Mail: *dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de* oder *hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de*

Redaktionsbereiche:
Anzeigen und Werbung: Dr. Tilmann Leisegang, *tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.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, Inh. Dipl.-Kfm. (FH) Bert Buschmann
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351-3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

Vorsitzende: Prof. Dr. Susan Schorr
Freie Universität Berlin, Institut für Geologische Wissenschaften und
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Abteilung Kristallographie
Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin
Tel.: 030-8062-42317, Fax: 030-8062-43094
E-Mail: *susan.schorr@helmholtz-berlin.de*

Stellvertretender Vorsitzender: Prof. Dr. Wolfgang Schmahl
Ludwig-Maximilians-Universität München, Department für Geo- und Umweltwissenschaften
Theresienstraße 41, 80333 München
Tel.: 089-2180-4313, Fax: 089-2180-4334
E-Mail: *wolfgang.schmahl@lrz.uni-muenchen.de*

Schriftführer: Dr. Daniel M. Többens
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Abteilung Kristallographie
Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin
Tel.: 030-8062-42161, Fax: 030-8062-43094
E-Mail: *daniel.toebbens@helmholtz-berlin.de*

Schatzmeister: Prof. Dr. Christian W. Lehmann
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Kaiser-Wilhelm-Platz 1, 45470 Mülheim an der Ruhr
Tel.: 0208-306-2174, Fax: 0208-306-2989
E-Mail: *lehmann@kofo.mpg.de*

Vorsitzende des Nationalkomitees: Dr. Ute Kolb
Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Physikalische Chemie
Welderweg 11, 55099 Mainz
Tel.: 06131-3924154
E-Mail: *kolb@uni-mainz.de*

Vertreter der DMG: Prof. Dr. Ulrich Bismayer
Universität Hamburg, Mineralogisch-Petrographisches Institut
Grindelallee 48, 20146 Hamburg
Tel: 040-42838-2050, Fax: 040-42838-2422
E-Mail: *ubis@uni-hamburg.de*

Vertreterin der DPG: PD Dr. Leonore Wiehl
Universität Frankfurt, Inst. f. Geowissenschaften, Facheinheit Mineralogie/Kristallographie
Altenhöferallee 1, 60438 Frankfurt am Main
Tel.: 069-798-40110, Fax: 069-798-40109
E-Mail: *L.Wiehl@kristall.uni-frankfurt.de*

Homepage: *http://dgk-home.de*

Liebe Mitglieder der DGK,

als neue Vorsitzende der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie darf ich Sie ganz herzlich als Leser der 45. Mitteilungen unserer Gesellschaft begrüßen. Im Zuge meiner neuen Funktion habe ich nun die angenehme Aufgabe, Sie in dieses und die nächsten Hefte einführen zu dürfen.

Das *International Year of Crystallography 2014* ist mit einer internationalen Konferenz unter dem Motto *„Crystallography for the next generation: the legacy of IYCr"* im April diesen Jahres in Rabat/Marokko zu Ende gegangen. Hier wurde eindrucksvoll Bilanz zu den verschiedensten Aktivitäten gezogen, insbesondere den 16 *OpenLabs*, den drei *IUCr Summit Meetings „bringing nations together"* und der internationalen *Crystal Growing Competition* für Schüler. Unter dem Titel *„Crystallography matters ... more!"* wird z. B. letztere fortgeführt, die Ausschreibung der *„Crystal Growing Competition for Schools 2015"* ist erfolgt.

Die Preisverleihung für den DGKK/DGK-Schülerwettbewerb „Wer züchtet den schönsten Kristall" fand im Rahmen des 5. Kongresses des Förderkreises Ingenieurstudium e. V. in Nürnberg statt. Etwa 350 Schülergruppen mit ca. 2000 Schülern hatten sich daran beteiligt, 100 Kristalle sind zur Begutachtung eingegangen.

Im März fand unsere 23. Jahrestagung an der Georg-August-Universität Göttingen statt. Die 18 Mikrosymposien deckten weitestgehend die Gebiete unserer interdisziplinären Wissenschaftsdisziplin ab, wobei ein besonderer Fokus auf die *computational* und theoretische Kristallographie gelegt wurde. Ein besonderer Dank geht an Prof. Dr. Ralf Ficner und sein Team für die gelungene Organisation.

Auch die Arbeitskreise der DGK sind in diesem Jahr wieder mit Kursangeboten bzw. Workshops aktiv. Das Themenspektrum ist breit aufgestellt, u. a. analytische Methoden, z. B. Festkörper-NMR-Spektroskopie (in bewährter Form in Bochum) oder Rietveld-Analyse (Stuttgart) bzw. der „ChemKrist-Workshop" in Frankfurt. Der noch junge Arbeitskreis „materialwissenschaftliche Kristallographie" wird sich auch dieses Jahr wieder treffen, geplant sind drei Tage im Oktober in Berlin.

Die ECM 29 wird im August in Rovinj/Kroatien stattfinden. Hier führt Deutschland mit 107 eingereichten Abstracts erfreulicherweise die „Länderwertung" an, gefolgt von Großbritannien (96) und Russland (63). Für die Teilnahme an der ECM 29 hat die DGK wieder Reisestipendien für Studierende ausgelobt, die dort substantielle kristallographische Forschungsergebnisse aus ihrer Doktor- bzw. Masterarbeit vorstellen. Dazu sind zahlreiche sehr gut fundierte Anträge eingegangen. Ich bin sicher, dass uns in Rovinj ein interessantes wissenschaftliches Programm erwartet sowie viele neue Eindrücke von Stadt und Land.

Ich wünsche Ihnen schöne Sommerferien und danach einen schwungvollen Start ins Wintersemester 2015/16!

Herzliche Grüße,

Ihre

Susan Schorr

Susan Schorr, DGK-Vorsitzende, Berlin

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 17.03.2015 in Göttingen 9

Anlage zu TOP 5.6: Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand der DGK 21

Anlage zu TOP 5.7: Bericht der Vertreterin der DPG im Vorstand der DGK 23

Anlage zu TOP 5.8: Bericht des Vertreters der DGK im Vorstandsrat der DPG 25

Ordnung für den Max-von-Laue-Preis 27

Ordnung zur Vergabe von Reisestipendien der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 29

Rückblick zur 23. Jahrestagung der DGK in Göttingen 31

Bericht des Stipendiaten zum IUCr-Kongress in Montréal 35

Symmetrie traditioneller javanischer Batikmuster 36

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“ 41

Bericht vom „1st Meeting of the DGK’s Young Crystallographers“ 44

AK 6 „Molekülverbindungen“ 48

Bericht zum 15. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ 50

Report on the 8th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals 53

Protokoll des 2. Arbeitskreistreffens des AK 20 in Bad Schandau 56

Personalia:

Jubilare 2015 61

Laudatio anlässlich der Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2015
an Julia Dshemuchadse 63

Laudatio anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2015
an Reinhard Neder 65

Laudatio anlässlich der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2015
an Peter Luger 69

Hans Wondratschek 73

Erich F. Paulus 75

Ankündigungen:

KRIMI – Die faszinierende Welt der Kristalle, Minerale, Materialien
und historischen Instrumente 81

Texture School @ CZM 83

ECM-30 in Basel 85

Zeit-, Temperatur- und Ortsaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie (XII) 86

Max-von-Laue-Preis 2016 87

Aufruf zu Nominierungen für Carl-Hermann-Medaille und
Will-Kleber-Gedenkmünze 2016 88

Tagungen und Termine 90

Homepages von DGK, DMG und DGKK 96

Aufnahmeformular 97

Arbeitskreise der DGK 98

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 99

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 17.03.2015 IN GÖTTINGEN

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der Jahrestagung 2015 der DGK um 18:45 Uhr, am Dienstag, dem 17. März 2015, im Hörsaal C des Instituts für Geowissenschaften, Goldschmidtstraße 1–3, 37077 Göttingen statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

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

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Es sind 60 DGK-Mitglieder anwesend. Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 18.03.2014 in Berlin

Das Protokoll wird – wie in Heft 44 der DGK-Mitteilungen auf Seite 9 veröffentlicht – mit folgender Korrektur angenommen. Unter Tagesordnungspunkt 7.2 (Wahl von Mitgliedern des Komitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze) ist der Text „Herr Paufler wurde 2012 für drei Jahre gewählt“ zu ersetzen durch „Herr Paufler wurde 2013 für drei Jahre gewählt“.

5 Berichte

5.1 Bericht des Vorsitzenden

Herr Schmahl berichtet über die folgenden Entwicklungen seit der letzten Mitgliederversammlung.

Im vergangenen Jahr wurden zahlreiche Veranstaltungen zum Internationalen Jahr der Kristallographie (IYCr) durchgeführt. Von Dezember 2013 bis Mai 2014 fand die Sonderausstellung „Symmetrie ist überall“ zum *International Year of Crystallography* im Museum „Reich der Kristalle“ in München statt. Dazu gab es ebenfalls in München von Januar bis November 2014 im „Museum Mensch und Natur“ eine Vortragsreihe unter dem Motto „Internationales Jahr der Kristallographie“ mit insgesamt sieben

Vorträgen (Vortrag des DGK-Vorsitzenden am 13.02.2014). Der letzte Vortrag wurde am 20.11.2014 von Christian Chopin aus Paris gestaltet. Weitere eigene Vorträge anlässlich des Festjahres hielt der Vorsitzende zu folgenden Anlässen:

- in Wien am 28.04.2014 zu einer Vortragsreihe der ÖMG,
- auf der Analytica in München am 02.04.2014 im Mikrosymposium „International Year of Crystallography – Current Topics in Industry and Academia“ (organisiert von Christian Lehmann),
- an der Universität Leipzig am 05.06.2014,
- in Freiberg in Sachsen am 11.06.2014 anlässlich des Berg- und Hüttenmännischen Tages (Symposium zum IYCr),
- zu einem Vortrag am 17.07.2014 im Geophysikalischen Observatorium Wettzell (Bayrischer Wald) wurde Herr Schmahl wegen Krankheit durch Dr. R. Hochleitner vertreten,
- Grußwort an der Universität Freiburg (Breisgau) am 31.10.2014 im Festkolloquium „50 Jahre Kristallographie“,
- an der Universität Jena am 18.11.2014.

Im März 2014 wurde die Bewerbung der Universität Wien zur Ausrichtung der ECM-32 (2019) durch ein Schreiben des Vorsitzenden der DGK unterstützt.

Zwei Bilder vom Laue-Festakt am 11.04.2014 in Poznań.
Links: Mariusz Jaskolski (Polnische Akademie der Wissenschaften) bei seiner Eröffnungsrede. Rechts: Die enthüllte Laue-Gedenktafel an der Fassade des „III Liceum Ogólnokształcące im. św. Jana Kantego w Poznaniu“ in Poznań.

Das IYCr diente zum Anlass für ein internationales Festkolloquium zu Ehren Max von Laues am 11.04.2014 in Poznań unter Leitung von Prof. Dr. Mariusz Jaskolski von der Polnischen Akademie der Wissenschaften (im Bild links am Rednerpult). Im historischen Gebäude des Gymnasiums, des heutigen „III Liceum Ogólnokształcące im. św. Jana Kantego w Poznaniu“, in dem Max Laue 1887–1891 zur Schule ging, wurde mit Vorträgen und Grußworten zahlreicher Honoratioren aus Schulwesen, Politik und Wissenschaft der Person Max von Laues und seines Wirkens gedacht und die

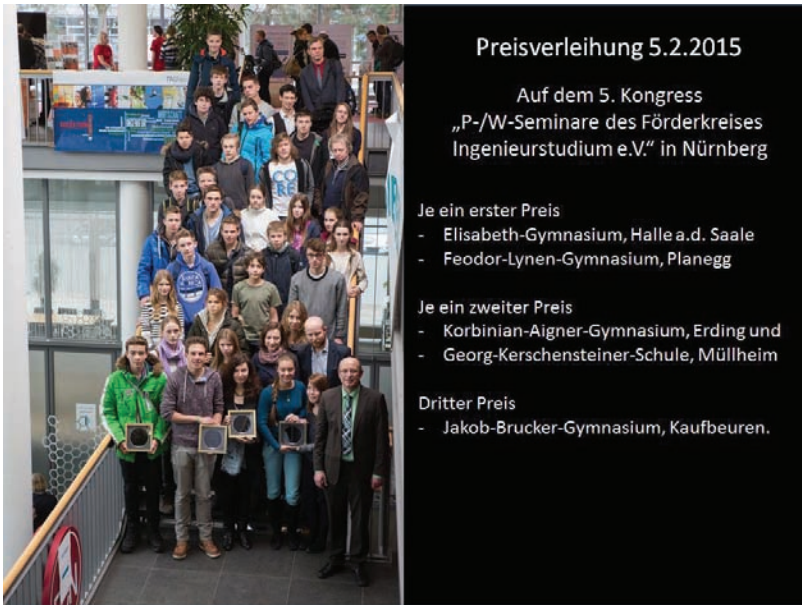
Entwicklung der Kristallographie bis zum heutigen Tage aus verschiedensten Blickwinkeln beleuchtet. Höhepunkt war die Enthüllung einer Gedenktafel (Bild rechts) für den späteren Nobelpreisträger und Begründer der Röntgenkristallographie an der Fassade des Lyzeums. Die Laue-Tafel befindet sich wenige Schritte von der Gedenktafel entfernt, die an einen polnischen Widerstandskämpfer erinnert, welcher sich vor 70 Jahren gegen den NS-Terror wendete. Wie durch einen Zufall thematisiert dies auch das politische Wirken von Laues gegen das NS-Regime in Deutschland und mahnt uns – aus der verflochtenen Vergangenheit beider Länder – an das Streben nach der gemeinsamen Zukunft in einem pluralistischen und demokratisch geeinten Europa. Eine beeindruckende Ausstellung von Erinnerungsstücken aus der Schulzeit Laues begleitete das Festkolloquium. In den ausgestellten, noch immer vorhandenen Schuldokumenten dieser Zeit findet sich keine Spur einer Differenzierung der Schüler nach Muttersprache oder Glaubensrichtung. Die Klassenliste führt Schüler mit Namen wie Mosche, Mateusz und Max bunt nebeneinander, woraus sich der kulturelle Pluralismus des späten 19. Jahrhunderts erkennen lässt. Am Rande bemerkt: Jener Max erhielt nur mittelmäßige Noten von seinen Lehrern. Besonders eindrucksvoll ist der Enthusiasmus, mit dem sich die heutigen Oberstufenschülerinnen und -schüler des Lyzeums am Festakt beteiligten, u. a. mit wissenschaftlichen Postern zum Thema Kristallographie und molekulare Struktur. Vertreten war unter anderem die UNESCO durch Jean-Paul Ngome-Abiaga, sowie die IUCr durch Prof. Gautam Desiraju und die ECA durch Prof. Andre Roodt. Die offizielle Delegation aus Deutschland bestand aus Prof. Wulf Depmeier (*Exec. Committee* IUCr), Prof. Udo Heinemann (stellvertretender Vorsitzender der DGK), Dr. Dieter Hofmann (Laue-Biograph) und Prof. Wolfgang Schmahl (DGK-Vorsitzender und Vertreter der LMU München, Laues Wirkungsstätte zum Zeitpunkt der Entdeckung der Beugung von Röntgenstrahlen 1912).

Im September 2014 wurden Wahlvorschläge für die Wahlen zu den DFG-Fachkollegien mit den Nachbargesellschaften koordiniert und eingereicht.

Am 20.11.2014 fand ein DGK-Vorstandstreffen in München statt.

Am 15.01.2015 erhielt die DGK erfreulicher Weise die Zusage der DFG zur Übernahme des Jahresbeitrags 2014 für die IUCr in Höhe von SFr 10.000.

Am 05.02.2015 fand die Preisverleihung für den DGKK/DGK-Schülerwettbewerb „Wer züchtet den schönsten Kristall“ im Rahmen des 5. Kongresses „P-/W-Seminare“ des Förderkreises Ingenieurstudium e. V. in Nürnberg statt. Ca. 350 Schülergruppen mit ca. 2000 Schülern hatten sich beteiligt; 100 Kristalle sind zur Begutachtung eingegangen. Das Preiskomitee bestand aus: Matthias Bickermann (IKZ), Christiane Frank-Rotsch (IKZ), Birgitta Meisterernst (LMU) und Wolfram Miller (IKZ). Die Preise wurden durch den Vorsitzenden der DGKK, Dr. Jochen Friedrich, verliehen. Der DGK-Vorsitzende war wegen Krankheit kurzfristig verhindert. Die DGK hatte 2014 2000 Euro zugesagt, die für die Rohmaterialien und den Versand aufgebraucht wurden. Für Preisgelder, Reisegelder für Preisträger und Unterstützung der Rahmenveranstaltung bittet Herr Friedrich um weitere 850 Euro.



Am 24.02.2015 trifft das Laue-Preiskomitees nach wochenlanger Diskussion zu Geist und Auslegung der Ordnung zur Vergabe des Max-von-Laue-Preises einen Beschluss für den diesjährigen Preisträger. Der Vorsitzende der Preiskommission, Herr Kollege Doert, hat einen Vorschlag zur Änderung des Wortlauts der Ordnung eingebracht (siehe TOP 8).

Im Februar 2015 wurde ein Grußwort von der DGK für die 100. Ausgabe des DGKK-Bulletins verfasst.

Am 28.02.2015 wurde die Mitgliedschaft der DGK beim DVT (Deutscher Verband Technisch-Wissenschaftlicher Vereine) gekündigt. Auf eine Nachfrage zu den Gründen für den Austritt aus dem DVT erläutert Herr Schmahl, dass die Mitgliedschaft mit hohen Beiträgen verbunden ist. Die mit der Mitgliedschaft verbundenen Leistungen des Vereins wurden jedoch bisher nicht ausreichend genutzt, um diese Kosten für die DGK weiterhin zu rechtfertigen.

Im März 2015 hat Herr Kollege Ehrenberg vom KIT in Karlsruhe sich bereit erklärt, die DGK-Jahrestagung 2017 durchzuführen.

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

- Herr Prof. Hans Wondratschek
- Herr Dr. Erich Paulus
- Herr Dr. Edmund Vielhaber
- Herr Prof. Stefan Hafner
- Frau Prof. Brigitte Eisenmann
- Herr Prof. Günter Kunze

Vom bereits länger zurück liegenden Ableben von Frau Eisenmann und Herrn Kunze hat der Vorstand erst vor kurzem Kenntnis erhalten.

5.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees

Frau Schorr informiert über folgende Entwicklungen.

Die *IUCr General Assembly* fand auf dem 23. IUCr-Kongress im August 2014 (06.08., 07.08. und 11.08.2014) in Montreal/Kanada statt, in der Deutschland vier Stimmen hat. Diese wurden durch die Vorsitzende und Mitglieder des Nationalkomitees wahrgenommen.

Die Anträge folgender Staaten auf Mitgliedschaft in der *IUCr General Assembly* wurden angenommen: Costa Rica, Pakistan, Türkei, Uruguay, Venezuela, Marokko, Kamerun und Algerien.

Die *Commissions der IUCr* wurden neu gewählt. Das Nationalkomitee hatte 18 Mitglieder der DGK nominiert, mehr als die Hälfte der nominierten Kandidaten wurden erfolgreich in die neuen *Commissions* gewählt:

- *Commission on biological macromolecules*: N. Sträter, M. S. Weiss
- *Commission on charge, spin and momentum densities*: W. Scherer
- *Commission on crystal growth and characterization of materials*: D. Klimm
- *Commission on crystallographic teaching*: M. S. Weiss
- *Commission on Crystallography of Materials*: B. Albert
- *Commission on high pressure*: F. Fabbiani
- *Commission on inorganic and mineral structures*: T. M. Gesing
- *Commission on neutron scattering*: W. Schmahl
- *Commission on structural chemistry*: C. W. Lehmann
- *Commission on Synchrotron and XFEL Radiation*: T. Tschentcher

Der vom Nationalkomittee nominierte Kandidat für das *IUCr Executive Committee*, Wulf Depmeier, war erfolgreich. Er wurde für 6 Jahre zum Mitglied des *Executive Committee* gewählt. Weitere Mitglieder sind Herr Kuzel (Tschechische Republik), Herr Garcia-Granda (Spanien) und Herr Takata (Japan). Herr Hackert (USA) setzte sich in der Wahl zum IUCr-Präsidenten durch, zum Vizepräsident wurde Herr Glazer (UK) gewählt. Schatzmeister ist weiterhin Herr van Meervelt (Belgien).

Weiterhin wurde auf der *General Assembly* der Ort für die *25. IUCr General Assembly and Congress 2020* bestimmt. Zur Wahl standen Paris und Prag, wobei sich in der Wahl Prag durchsetzte.

Weiterhin traf sich auf dem *23. IUCr Congress* auch das *ECA Council*. Deutschland wurde auf diesen Meetings durch die Vorsitzende des Nationalkomitees vertreten. Präsident des *ECA Executive Committees* ist Andreas Roodt von der University Bloomfontein (Südafrika), *ECA Secretary* ist Georgina Rosair (UK). Mitglieder des *ECA Executive Committee* von der DGK sind Udo Heinemann als Officer (SIG) und Christian Lehmann als Schatzmeister. Auf dem Meeting wurde auf die ECM 29 vom 23.08. bis 28.08.2014 in Rovinj (Kroatien) hingewiesen. Die ECM 30 wird im August 2015 in Basel (Schweiz) stattfinden. Für die ECM 31 hat sich Wien (Österreich) als Tagungsort vorgestellt.

Auf der Eröffnungszeremonie des 23. IUCr-Kongress wurde der Ewald-Preis an Prof. A. Janner und Prof. Jannssen (beide vom *Institute for Theoretical Physics*, *University of Nijmegen*, Niederlande) für *„the development of superspace crystallography and its application to the analysis of aperiodic crystals“* überreicht.

5.3 Bericht des Schriftführers

Im Jahr 2014 gab es 37 Eintritte und 19 Austritte. Die DGK hatte am 14.03.2015 1118 Mitglieder, davon 877 Vollmitglieder, 104 Studenten und Doktoranden, 90 Pensionäre, 10 Arbeitslose, 21 Dauermitglieder, 5 Ehrenmitglieder, 8 Institute und 3 weitere unpersönliche Mitglieder. Die Zahl der Mitglieder mit offenen Beiträgen kann dieses Jahr nicht ermittelt werden, da die Finanzgeschäfte der DGK aufgrund der Einführung des SEPA-Systems gegenwärtig nicht über die Mitgliederdatenbanksoftware erfolgen.

5.4 Bericht des Schatzmeisters

Nach dem für die DGK finanziell schwierigen Jahr 2013 hat sich die Kassenlage 2014 deutlich entspannt. Der Einzug der Mitgliedsbeiträge für 2013 konnte rückwirkend im März 2014 durchgeführt werden, nachdem alle Kontonummern und Bankleitzahlen in IBAN und BIC konvertiert wurden und alle vorliegenden Einzugsermächtigungen in Mandate für SEPA-Lastschriften umgewandelt waren. Die gesetzlich vorgeschriebenen Pränotifikationen wurden allen Lastschriftteilnehmern, größtenteils per E-Mail, zugestellt. Künftig werden diese Pränotifikationen in der Regel im Mitteilungsheft veröffentlicht.

Zeitnah mit dem Erscheinen des Mitteilungshefts 44, im Oktober 2014 wurden die Mitgliedsbeiträge der Vollzahler (40,00 €, inklusive 5,00 € Spende für das Laue-Preisgeld) per SEPA-Lastschrift eingezogen. Diese zwei Beitragszahlungen in einem Kalenderjahr führten hier und dort zu etwas Verwirrung, alle Unklarheiten konnten jedoch entweder am Telefon oder per E-Mail aufgelöst werden. Bedingt durch die neue Beitragsordnung, die für Rentner und Pensionäre einen etwas höheren Beitrag als für Studierende und Stellungssuchende vorsieht, mussten neue Buchungssätze erstellt werden. Dieser Aufwand verzögerte die Einreichung der entsprechenden SEPA-Lastschriften bis zu den Weihnachtsferien. Die Vorlauffristen und Bankfeiertage waren ursächlich dafür, dass die Abbuchungen erst am 02. Januar 2015 erfolgten. Diese Beiträge sind in der Einnahmen-Überschussrechnung 2014 deshalb noch nicht ausgewiesen.

Wenngleich der Jahresabschluss der DGK für 2014 einen erheblichen Überschuss aufweist und auch die Kontostände keinen Anlass zur Beunruhigung geben, ist die weiterhin stark angespannte Situation für Investoren an den Kapitalmärkten auch für die DGK und ihre Treuhandvermögen besorgniserregend. Die Erträge des sogenannten Laue-Kapitals, das aus Einzelspenden der DGK-Mitglieder über einen längeren Zeitraum aufgebaut wurde, sind unter 150 € (10 % des Preisgeldes) pro Jahr gefallen. Damit ist es unmöglich, das Laue-Preisgeld allein aus den Kapitalerträgen der Tagesgelder zu finanzieren. Eine Aufstockung durch die Mitgliedsbeiträge ist erforderlich und wird mit der neuen Laue-Preis-Ordnung ermöglicht.

Einnahmen-Überschussrechnung 2014 der DGK

Einnahmen 2014			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2014	17.780,00 €	31.775,11 €
	Barzahler 2014	1.025,11 €	
	Bankeinzug rückwirkend 2013	12.970,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	5,81 €
	Cashkonto 850	5,81 €	
Entnahme Rücklage Dauermitglieder			187,43 €
Spenden	Laue-Preisgeld (499 Spender)		2.570,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	1.689,64 €	3.071,78 €
	Rückzahlungen	1.382,14 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.200,00 €
Summe Einnahmen			**41.810,13 €**
Ausgaben 2014			
Mitteilungen			-6.806,50 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	-80,00 €	-1.190,00 €
	Rücklastschriften	-1.110,00 €	
Rücklage Dauermitglieder	Rückbuchung von 2013		-2.015,77 €
Administration	Bankgebühren	-164,20 €	-695,07 €
	Medaillenprägung	-76,17 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-55,00 €	
	Reisekosten & Spesen	-399,70 €	
Verbände, Organisationen	2 Jahre ECA, DVT, BVMatW		-2.176,52 €
Arbeitskreise	Förderung	-8.866,37 €	-14.266,37 €
Reisestipendien	ECM Warwick, IUCr	-1.400,00 €	
Max-von-Laue-Preisgeld	Auszahlung und Umbuchung	-4.000,00 €	
Summe Ausgaben			**-27.150,23 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2014			
Einnahmen	1 Neues Dauermitglied	120,00 €	2.138,96 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	3,19 €	
	Rückbuchung von 2013	2.015,77 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2014	-187,43 €	-187,43 €
Überschuss 2014			**1.951,53 €**
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2014			**16.611,43 €**

Kontoführung 2014			
Konto	**30.12.2013**	**31.12.2014**	**Änderung**
Giro	500,00 €	1.154,09 €	654,09 €
Rücklage Dauermitglieder 910	203,87 €	2.155,40 €	1.951,53 €
DKG-Cash 085	1,03 €	14.006,84 €	14.005,81 €
Guthaben der DGK	**704,90 €**	**17.316,33 €**	**16.611,43 €**

Jahresabrechnung 2014 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2014			
Zinsen	Laue-Sparbuch 920	0,19 €	117,19 €
	Laue-Kapital 930	117,00 €	
Spenden			2.570,00 €
Summe Einnahmen			**2.687,19 €**
Ausgaben 2014			
Laue-Preis 2014	Dr. Tilman Leisegang (Freiberg)		-1.500,00 €
Summe Ausgaben			**-1.500,00 €**
Überschuss Einnahmen und Ausgaben 2014			**1.187,19 €**

Kontoführung 2014			
Konto	**01.01.2014**	**31.12.2014**	**Änderung**
Laue-Sparbuch 920	1,22 €	2.662,51 €	2.661,29 €
Laue-Kapital 930	60.044,10 €	60.000,00 €	-44,10 €
Kapital der Stiftung	**60.045,32 €**	**62.662,51 €**	**2.617,19 €**

Jahresbilanz 2014 Interdisz. Krist. Stiftung			
Einnahmen 2014			
Zinsen	Sparbuch 830	0,00 €	60,04 €
	Stiftungskapital 870	60,04 €	
Summe Einnahmen			**60,04 €**
Ausgaben 2014			
Kein Preis vergeben			0,00 €
Summe Ausgaben			**0,00 €**
Bilanz Ein- und Ausgaben 2014			**60,04 €**

Kontoführung 2014			
Konto	**01.01.2014**	**31.12.2014**	**Änderung**
Stiftungs-Sparbuch 830	1,06 €	1,06 €	0,00 €
Stiftungskapital 870	30.805,14 €	30.865,18 €	60,04 €
Kapital der Stiftung	**30.806,20 €**	**30.866,24 €**	**60,04 €**

5.5 Bericht der Kassenprüfer

Herr Fischer berichtet im Auftrag von Herrn Schreuer und Frau Becker-Bohaty, die die Kassenprüfung für das Geschäftsjahr 2014 durchgeführt haben. Die Prüfung 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 konnte aufgrund der zeitgleich stattfindenden DPG-Tagung nicht teilnehmen. Ihr Bericht findet sich auf Seite 23.

5.8 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG

Herr Braden konnte aufgrund der zeitgleich stattfindenden DPG-Tagung nicht teilnehmen. Sein Bericht findet sich auf Seite 25.

5.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Herr Stöcker berichtet stellvertretend für Herrn Meyer. Der Redaktionsschluss für Heft 45 ist der 31. Mai 2015. Dadurch soll insbesondere das Protokoll der Mitgliederversammlung zeitnah die Mitglieder erreichen. Der Redaktionsschluss für Heft 44 war der 31. Mai 2014. Trotzdem erreichten die letzten Beiträge erst im September die Redaktion, sodass erst am 16.09.2014 der Druck beginnen konnte. Das sollte in diesem Jahr vermieden werden. Die Rückläuferquote liegt inzwischen bei ca. 2 %. Um diesen erfreulich niedrigen Wert zu halten, sollten alle Mitglieder ermuntert werden, bei Umzug oder Wechsel des Arbeitsplatzes ihre neue Adresse per Webformular an die DGK zu melden. Auch wer kein Heft erhalten hat, sollte seine aktuelle Adresse per Webformular melden. Im letzten Heft sind mehrere umfangreiche Artikel erschienen, was vielfach als sehr positiv empfunden wurde. Die Redaktion würde sich freuen, wenn auch weiterhin derart qualitativ hochwertige Beiträge publiziert werden könnten und ermuntert alle Mitglieder zum Heft beizutragen.

5.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Herr Schuck konnte an der diesjährigen Tagung nicht teilnehmen. Es gibt keine besonderen Vorkommnisse zu berichten. Herr Schuck hat sich intensiv an den Aktivitäten des Jahres der Kristallographie 2014, insbesondere an dem Webauftritt und der Übersetzung der IUCr-Broschüre, beteiligt.

6 Entlastung des Vorstands

Die Mitgliederversammlung beschließt ohne Gegenstimmen und Enthaltungen die Entlastung des Vorstands für das Geschäftsjahr 2014.

7 Wahlen

7.1 Wahl des Vorstands der DGK

Der Vorstand der DGK ist für eine Amtszeit von drei Jahren neu zu wählen. Es kandidieren:

- Vorsitzende: Susan Schorr (Berlin),
- Stellvertreter: Wolfgang Schmahl (München),
- Schriftführer: Daniel Többens (Berlin),
- Schatzmeister: Christian Lehmann (Mülheim).

In geheimer Abstimmung werden die Kandidaten mit folgendem Ergebnis gewählt:

- Frau Schorr: 47 ja, 2 nein, 6 ungültig/Enthaltungen,
- Herr Schmahl: 53 ja, 1 nein, 1 ungültig/Enthaltungen,
- Herr Többens: 50 ja, 2 nein, 2 ungültig/Enthaltungen,
- Herr Lehmann: 51 ja, 1 nein, 2 ungültig/Enthaltungen.

Alle Kandidaten nehmen die Wahl an.

Herr Schmahl dankt Herrn Heinemann (Vorsitz: 2009–2012, stellv. Vorsitz 2012–2015) und Herrn Sträter (Schriftführer 2009–2015) für ihre Tätigkeiten im Vorstand der DGK.

7.2 Wahl von Mitgliedern des Nationalkomitees

Das Nationalkomitee umfasst sechs Mitglieder und die Vorsitzende der DGK (*ex officio*). Bis 2018 sind gewählt: Herr Schreuer, Frau Schorr, Herr Ficner und Herr Dittrich. Herr Fischer und Herr Meyer scheiden 2015 aus dem Komitee aus. Da Frau Schorr als Vorsitzende der DGK auch Mitglied des Nationalkomitees ist, soll an ihrer Stelle ein weiteres Mitglied in das Nationalkomitee gewählt werden. Für die drei neu zu wählenden Mitglieder kandidieren Hermann Schindelin (Würzburg), Wolfgang Bensch (Kiel), Björn Winkler (Frankfurt), Georg Roth (Aachen), Ute Kolb (Mainz) und Claudia Weidenthaler (Mülheim).

Jedes Mitglied kann in geheimer Wahl bis zu drei Personen wählen. In das Nationalkomitee werden gewählt: Ute Kolb (39 Stimmen), Claudia Weidenthaler (35 Stimmen) und Wolfgang Bensch (23 Stimmen).

7.3 Wahl des Komitees für den Max-von-Laue-Preis

Das Komitee für den Max-von-Laue-Preis umfasst vier Mitglieder und wird alle drei Jahre neu gewählt. Es kandidieren: Manfred Weiss (Berlin, Wiederwahl), Reinhard Neder (Erlangen, Wiederwahl), Thomas Doert (Dresden, Wiederwahl), Alexandra Friedrich (Frankfurt) und Birger Dittrich (Hamburg). In geheimer Wahl kann jedes Mitglied bis zu vier Stimmen abgeben.

Gewählt werden Manfred Weiss (44 Stimmen), Reinhard Neder (44 Stimmen), Thomas Doert (40 Stimmen) und Alexandra Friedrich (40 Stimmen).

7.4 Wahl des Komitees für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie

Das Komitee ist alle drei Jahre neu zu wählen. Es kandidieren Wulf Depmeier (Kiel), Yves Müller (Erlangen) und Claudia Weidenthaler (Mülheim). Die drei Kandidaten werden einstimmig ohne Enthaltungen in das Komitee gewählt.

7.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Jürgen Schreuer und Petra Becker-Bohatý werden ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen als Kassenprüfer für das Jahr 2013 gewählt.

8 Ordnung für den Max-von-Laue-Preis

Der Entwurf für die Änderung der Ordnung des Max-von-Laue-Preises wurde vor der Vorstandssitzung versendet. Die Mitgliederversammlung beschließt die auf Seite 27 abgedruckte neue Ordnung für den Max-von-Laue-Preis.

9 Ordnung für die Vergabe von Reisestipendien

Die Mitgliederversammlung beschließt die auf Seite 29 abgedruckte Ordnung für die Vergabe von Reisestipendien ohne Gegenstimmen bei einer Enthaltung.

10 Beschluss der Beitragsordnung

Die Mitgliederversammlung beschließt die auf Seite 99 abgedruckte Beitragsordnung ohne Gegenstimmungen und ohne Enthaltungen.

11 Jahrestagungen 2016 und 2017

Herr Dinnebier berichtet über den Stand der Vorbereitungen zur 24. Jahrestagung der DGK in Stuttgart vom 14. bis 17. März 2016 (Tagungsleiter Robert Dinnebier und Thomas Schleid).

Die Jahrestagung 2017 soll von Helmut Ehrenberg in Karlsruhe ausgerichtet werden.

12 Sonstiges

Zu diesem Tagungsordnungspunkt gibt es keine Beiträge.

Wolfgang Schmahl
(Vorsitzender)

Norbert Sträter
(Schriftführer)

Unleashed Performance…

D8 VENTURE

You've worked hard to grow the best crystals, so why take a chance with the quality of your data? Bruker's new high-brilliance, low-maintenance X-ray sources, together with the impressive speed and sensitivity of the all-air-cooled PHOTON 100 detector, deliver data that will exceed your expectations. The D8 VENTURE provides an extremely powerful platform for single- and dual-source solutions for structural biology and chemical crystallography.

www.bruker.com

Crystallography

Innovation with Integrity

ANLAGE ZU TOP 5.6:

BERICHT DES VERTRETERS DER DMG IM VORSTAND DER DGK

- Die vorangegangene DMG-Vorstands- und Beiratssitzung erfolgte am 19./20. Februar 2015 im Physikzentrum in Bad Honnef. Vorsitz (2015/16) der DMG hatte François Holtz (Stellv. Vorsitzende 2015: Astrid Holzheid).
- Das Amt des DMG Schriftführers geht ab März 2015 über auf Klaus-Dieter Grevel (*Klaus-Dieter.Grevel@rub.de*)
- Das gemeinsame Treffen der DMG-Sektionen Petrologie/Petrophysik und Geochemie erfolgt vom 26. bis 27.06.2015 am GeoForschungsZentrum Potsdam (Anmeldung: *pege2015@gfz-potsdam.de*).
- Vom 25. bis 27.02.2015 findet der Workshop der DMG-Sektionen „Chemie, Physik und Kristallographie der Minerale (CPKM)“ und „Angewandte Mineralogie in Technik und Umwelt (AMITU)“ in Bad Windsheim statt.
- Das AK-Treffen „Mineralogische Museen und Sammlungen“ erfolgt am 17. und 18. März 2015 unter dem Motto „Mehr Bewegung im Museum – sind Sonderausstellungen und modernes Design Besuchermagnete?“ im Mineralogischen Museum der Julius-Maximilians-Universität Würzburg.
- Die Jahrestagung „Archäometrie und Denkmalpflege“ findet vom 25. bis 28.03.2015 in Mainz statt.
- Im Mai 2015 erfolgt das Statusseminar „BGR-Forschungsaufträge im Bereich der Rohstoff- und Lagerstättenforschung“ an der BGR in Hannover.
- In 2015 werden sieben DMG-Doktorandenkurse angeboten (siehe Homepage: *www.dmg-home.de/kursprogramm.html*)
- Im Herbst 2015 erfolgt die nächste Fachkollegienwahl der DFG.

Tagungen:
- DMG-Jahrestagung 2015, Berlin, 4. – 7. Okt. 2015, Gemeinschaftstagung DGG, DMG, GV unter dem Thema „100 Jahre Alfred Wegener, die Entstehung der Ozeane und Kontinente“ an der FU Berlin.
- *European Mineralogical Conference* EMC 2016 (11. – 15. Sept. 2016), Rimini, Italien. Die DMG-Jahrestagung 2016 findet im Rahmen der EMC statt.
- DMG Bremen 2017 (24. – 28. Sept.), Organisatoren A. Lüttge und W. Bach, gemeinsam mit der DGGV.

Ulrich Bismayer, Hamburg

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
sowie **problembezogene Seminare in Ihrem Haus !**

Ansprechpartner und Vertrieb der Programme

crystallographica search/match
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.

SiroQuant® V4.0- upgrade !

Si- Phase
Einbindung von CIF- Files oder
eigenen Strukturdaten
in die Rietveld- Datenbank.

Die Akkreditierung nach DIN EN ISO/IEC 17025 gilt für die in der Urkunde aufgeführten Prüfverfahren (Röntgenbeugung).

ANLAGE ZU TOP 5.7:

BERICHT DER VERTRETERIN DER DPG IM VORSTAND DER DGK

Aktivitäten der Fachgruppe Kristallographie (KR) der DPG im Rahmen der DPG-Frühjahrstagung vom 15. bis 20. März 2015 in Berlin:

- Die Fachgruppe KR der DPG hat aktuell 259 Mitglieder (Stand: 13.01.2015).
- Nach dem umfangreichen Tagungsprogramm des Internationalen Jahrs der Kristallographie IYCr2014 geht es dieses Jahr etwas ruhiger zu. Es sind, trotz gestiegener Mitgliederzahlen, bei KR leider nur 10 Beiträge eingereicht worden, davon drei Vorträge. Diese fanden im Rahmen gemeinsamer Fachsitzungen mit dem Fachverband Dielektrische Festkörper (DF) statt.
- Highlight unseres diesjährigen Programms war das fachübergreifende Symposium „Domain Wall Functionality and Engineering in Complex Oxides (SYDW)“ der Fachverbände DF (federführend), DS, KR, MA, MI und TT.
- Die Fachgruppe KR hat ihre Zusammenarbeit mit dem Fachverband Dielektrische Festkörper (DF) intensiviert und führt alle ihre Fachsitzungen gemeinsam mit DF durch. Die Postersession zum Thema „Multiferroics“ ist dieses Jahr erstmalig zur selben Zeit am selben Ort wie die Poster von KR und DF.
- Auch die Mitgliederversammlung der Fachgruppe Kristallographie während der DPG-Frühjahrstagung 2015 in Berlin wird dieses Jahr gemeinsam mit DF stattfinden. Raum und Zeitpunkt werden auf dem Tagungsserver (*http://berlin15.dpg-tagungen.de*) bekannt gegeben.

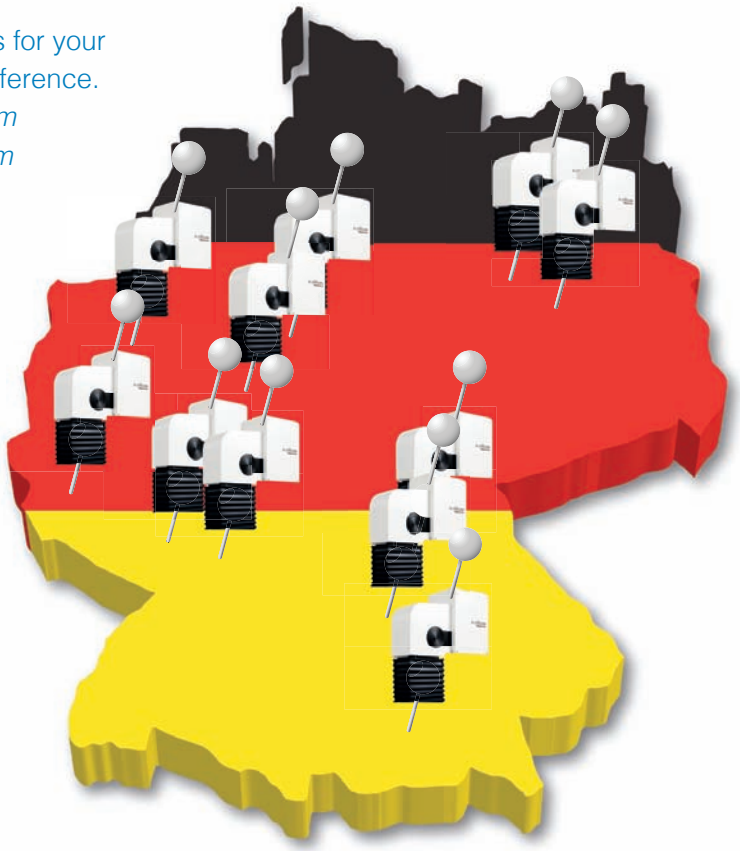
Termine der nächsten DPG-Tagungen (Sektion Kondensierte Materie, SKM):

- 2016 – Regensburg: 06.03. – 11.03.2016 (Termin geändert!)
- 2017 – Dresden: 19.03. – 24.03.2017 (noch nicht bestätigt)
- 2018 – Berlin: 11.03. – 16.03.2018

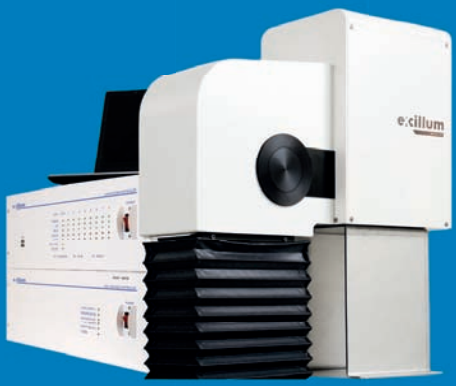
Leonore Wiehl, Darmstadt

MetalJet sources are already boosting research all over Germany

Please contact us for your local customer reference.
www.excillum.com
info@excillum.com



The MetalJet D2 from Excillum is the brightest microfocus X-ray tube in the world. By using a liquid-metal jet as anode the traditional power-density limit, that when the anode melts, is overcome. It is already molten.



excillum

ANLAGE ZU TOP 5.8:

BERICHT DES VERTRETERS DER DGK IM VORSTANDSRAT DER DPG

Der Bericht bezieht sich auf die Vorstandsratssitzungen der DPG am 21. und 22. November 2014 in Bad Honnef und am 15.03.2015 in Berlin.

- Die DPG versucht ihre mittelfristige Strategie in den folgenden Schwerpunkten zu stärken: Außenwirkung der DPG, Nachwuchsgewinnung, Aktionen für Schule und Physiklehrer, Brücke zur Industrie und Mobilisierung von Industriemitgliedern sowie Internationales Engagement.
- Die Highlights der Physik sind auch in 2014 wieder erfolgreich verlaufen und mit über 30.000 Besuchern sehr gut besucht gewesen.
- Die DPG hat an einem Positionspapier zur Chemischen Energieforschung mitgewirkt.
- „Physik konkret"-Publikationen mit den Themen „Fusion – auf dem Weg zum Kraftwerk" und „Eine neue Basis für das Kilogramm" wurden erstellt.
- Der Überschuss der Frühjahrstagungen 2014 beläuft sich auf rund 250 T€. Bei den Tagungen gab es insgesamt 10.193 Teilnehmer. Der geschätzte Gesamthaushalt der DPG ergibt einen Überschuss von etwa 200 T€, der zur Finanzierung der Sanierung des Physikzentrums genutzt werden kann.
- Der derzeitige CERN-Generaldirektor Rolf-Dieter Heuer wurde zum künftigen Präsidenten der DPG gewählt.
- Herr Arnulf Quadt wurde zum Vorstandsmitglied für Öffentlichkeitsarbeit bestimmt.
- Der Bau eines von der Heraeus-Stiftung finanzierten Gästehauses für das Physikzentrum in Bad Honnef wurde im September 2014 begonnen.
- Ende 2014 hatte die DPG 62.387 Mitglieder; erstmals seit zwei Jahrzehnten sank damit im Jahr 2014 die Zahl der Mitglieder.
- Die Diskussion um den Karlsruher Physik-Kurs hat sich seit der Mitgliederversammlung im März 2014 stark verringert.
- Der Internettauftritt der DPG wird technisch und inhaltlich modernisiert, es gibt eine DPG-App.
- Am 6. Mai 2015 wird die *EPS Historic Site*-Plakette an die LMU München verliehen.
- Nach intensiven Diskussionen wird das CHE-Ranking modifiziert. Unter anderem werden die Fachbereiche zukünftig auch in ihrem fachlichen Profil dargestellt.
- Die Resonanz auf PiA – Physik im Advent – war auch in 2014 sehr gut.
- Zum 100. Jubiläum der Allgemeinen Relativitätstheorie ist ein Themenheft des Physik-Journal geplant.
- Der endgültige Abschluss weist für 2014 einen Überschuss von 318.199,17 € (vor Einstellung in die Rücklagen) aus.
- Es wird der Vorschlag, eine Gustav-Magnus-Medaille zu verleihen, diskutiert, aber nicht zur Abstimmung gebracht.
- Die DPG unterstützt weiterhin die Bemühungen *Trans National Access*-Programme für den pan-europäischen Zugang zu Großforschungseinrichtungen im EU-Programm Horizon2020 zu verankern.

Markus Braden, Köln

STOE

SINCE 1887

FREEDOM TO DESIGN
YOUR BEST SOLUTION

STOE is a customer-centered, fully independent company. Our sole focus is to achieve the best data quality for your specific XRD needs. We have no limits in implementing the best available components.

Whenever it comes to quality, we accept no compromises.

Visit us at www.stoe.com.

STADIVARI THE FASTEST AND MOST FLEXIBLE WAY TO EXPLORE RECIPROCAL SPACE.

SINGLE CRYSTAL DIFFRACTOMETRY

STADI P THE RAPID, COMPREHENSIVE MODULAR SYSTEM WITH UNSURPASSED RELIABILITY.

POWDER DIFFRACTOMETRY

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

STOE & Cie GmbH | WWW.STOE.COM

Ordnung für den Max-von-Laue-Preis

Stand: 17.03.2015

1. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) verleiht entsprechend ihrem Zwecke einen Preis, der dem Andenken an Max von Laue gewidmet ist.

2. Der Preis besteht aus einer Urkunde und aus einem Geldbetrag und wird in der Regel auf der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie überreicht. Die Höhe des Preisgeldes sollte mindestens 1500 € betragen. Die Preisträgerin/der Preisträger hat das Recht, auf der folgenden Jahrestagung über die prämierte wissenschaftliche Arbeit vorzutragen.

3. Prämiert werden hervorragende wissenschaftliche Arbeiten von Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern aus dem Gebiet der Kristallographie im weitesten Sinne. Das Preiskomitee berücksichtigt hervorragende Leistungen insbesondere der vorangegangenen fünf Jahre.

4. Die Promotion der Preisträgerinnen/Preisträger soll in der Regel nicht länger als zehn Jahre zurückliegen; Erziehungszeiten sind dabei zu berücksichtigen.

5. Die Auswahl der Preisträgerinnen/Preisträger erfolgt durch ein Komitee, das aus vier gewählten DGK-Mitgliedern und der Vorsitzenden/dem Vorsitzenden der DGK (*ex officio*) besteht. Die vier zu wählenden Komitee-Mitglieder werden von der Mitgliederversammlung der DGK auf drei Jahre gewählt; einmalige Wiederwahl ist zulässig. Das Komitee wählt aus seinem Kreis eine Vorsitzende/einen Vorsitzenden, der die Federführung übernimmt, für die Einhaltung von Terminen sorgt und die Beschlussfassung vorbereitet.

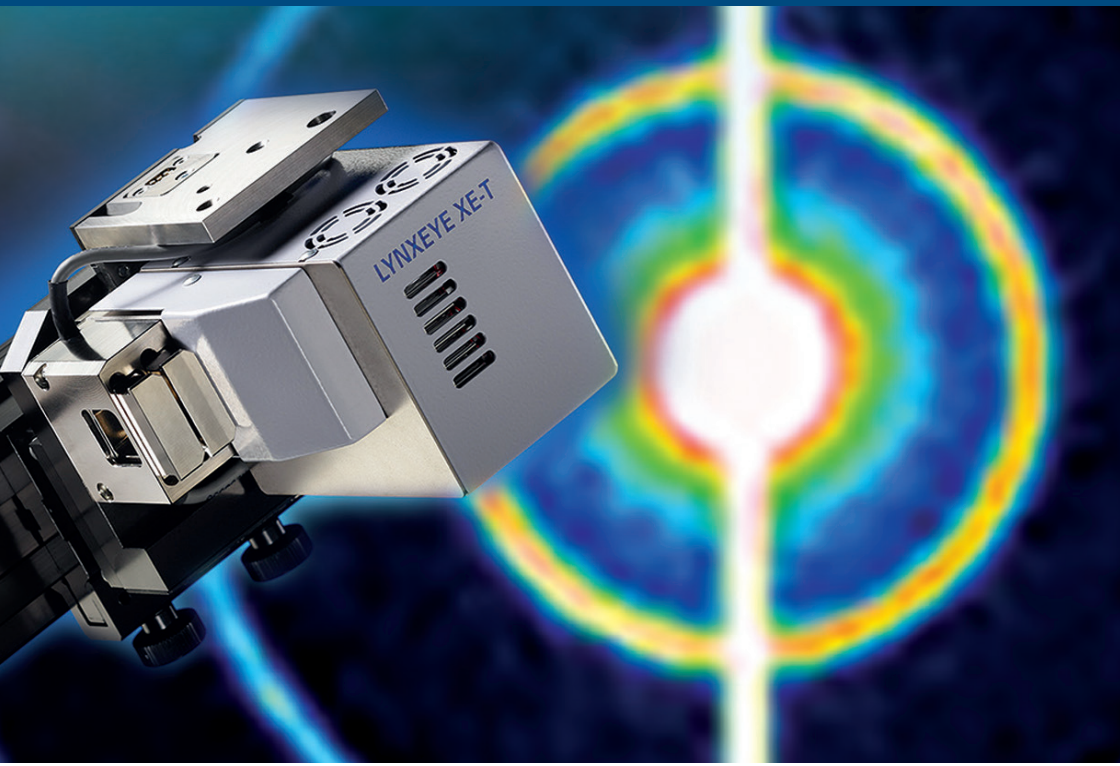
6. Das Komitee trifft seine Entscheidung aufgrund von Vorschlägen, welche dem Komitee mitgeteilt oder von ihm eingeholt werden. Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder der DGK sowie Mitglieder fachnaher und assoziierter Gesellschaften und andere interessierte Wissenschaftler. Die Auslobung des Preises ist in den Mitteilungen der DGK, der Homepage der DGK sowie in Publikationsorganen, die einer breiten Fachöffentlichkeit zugänglich sind, rechtzeitig, mindestens jedoch drei Monate vor der Preisverleihung, bekanntzugeben. Die Vorschläge sollten spätestens acht Wochen vor Preisverleihung bei der Vorsitzenden/dem Vorsitzenden des Komitees vorliegen.

7. Das Vermögen des Max-von-Laue-Preises wird auf einem eigenen Konto der DGK geführt und ist grundsätzlich ungeschmälert in seinem Wert zu erhalten. Zuwendungen und Spenden der Mitglieder der DGK bzw. Dritter wachsen dem Vermögen zu, wenn sie ausdrücklich dazu bestimmt sind. Die Erträgnisse des Vermögens sind für das Preisgeld zu verwenden.

8. Das Preisgeld des Max-von-Laue-Preises wird aus den Erträgnissen dieses Vermögens, den für das Preisgeld bestimmten Zuwendungen, Spenden oder dem sonstigen Einkommen der DGK genommen.

9. Der Schatzmeister legt jährlich dem Vorstand und der Mitgliederversammlung der DGK einen Bericht über das Vermögen und die Erträgnisse des Max-von-Laue-Preises vor, der von den Kassenprüfern der DGK zu prüfen ist.

LYNXEYE XE-T: Energy dispersive 0D/1D/2D XRD



The 1st and only detector on the market enabling energy dispersive zero-, one- and two-dimensional diffraction

- Superb energy resolution better than 380 eV, eliminating the need for Kß filters, mirrors and secondary monochromators
  → Unrivalled filtering of sample fluorescense, white radiation, and Kß radiation
- Operation with all common characteristic X-ray emission lines (Cr, Co, Cu, Mo, and Ag radiation)
- Variable sample to detector distance to optimize 2θ- and γ-coverage
- No defective strips at delivery time - guaranteed
- Full integration in DIFFRAC.SUITE

www.bruker.com

Ordnung zur Vergabe von Reisestipendien der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.

Stand: 17.03.2015

1. Die DGK vergibt zur Erfüllung ihres Zweckes gemäß § 2 Nr. 4 der Satzung Reisestipendien an junge Wissenschaftlerinnen und junge Wissenschaftler.

2. Der Vorstand lobt für internationale Tagungen die Reisestipendien aus und gibt diese Auslobung öffentlich bekannt.

3. Die Reisestipendien sind beim Vorstand zu beantragen. Dem formlosen Antrag ist eine Begründung sowie das Abstract des angenommenen wissenschaftlichen Beitrags sowie eine Stellungnahme des betreuenden Hochschullehrers beizufügen. Zum Zeitpunkt der Antragstellung darf die Promotion noch nicht abgeschlossen sein.

4. Der Vorstand wählt anhand der Qualität der Beiträge, der zu fördernden Umstände sowie des zur Verfügung stehenden Budgets der DGK die Stipendiaten aus. Ein Anspruch auf Reisestipendien besteht nicht.

5. Nimmt der Antragsteller/die Antragstellerin das Reisestipendium an, so ist er/sie verpflichtet, einen kurzen Tagungsbericht an die Mitteilungen der DGK zu senden.

Rigaku

Leading With Innovation

XRD Solutions

Introducing the 5th generation MiniFlex™ benchtop diffractometer

- Over 500 patents and 5,000 scientific publications reference the Rigaku MiniFlex
- MiniFlex 600 has twice the power of competitive instruments
- Available options include an automatic sample changer, high-speed 1D detector, noise reducing monochromator and more

MiniFlex 600

SmartLab

Highly versatile multipurpose XRD

- HyPix detector:
  Next generation 2-D detector
- Variety of X-ray sources available, e.g. 9 kW RAG or µ-focus MicroMax™-007, depending on application
- Self-aligned optics maximizes uptime
- 5-axis goniometer gives additional information on thin film samples

Rigaku Corporation and its Global Subsidiaries
website: www.Rigaku.com | email: info@Rigaku.com

Rückblick zur 23. Jahrestagung der DGK in Göttingen

Vom 16. bis 19. März 2015 fand die 23. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) an der Georg-August-Universität Göttingen statt. Organisiert wurde die DGK-Tagung von sechs in Göttingen tätigen Kristallographinnen und Kristallographen: Dr. Francesca Fabbiani (Geowissenschaftliches Zentrum), Prof. Dr. Ralf Ficner (Institut für Mikrobiologie und Genetik), Dr. Karin Kühnel (Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie), Prof. Dr. Werner F. Kuhs (Geowissenschaftliches Zentrum), Prof. Dr. George Sheldrick (Institut für Anorganische Chemie), Prof. Dr. Dietmar Stalke (Institut für Anorganische Chemie).

Insgesamt verzeichneten wir 427 registrierte Teilnehmerinnen und Teilnehmer, davon waren 148 Studentinnen oder Studenten. Die Vorträge für die 18 Mikrosymposien wurden aus den eingereichten 277 Abstracts ausgewählt, wobei in der Regel sechs Vorträge (à 30 min) pro Mikrosymposium stattfanden. Die anderen Abstracts erhielten die Möglichkeit der Präsentation als Poster.

Bei dieser DGK-Tagung wurde zum ersten Mal ein Mikrosymposium *„Lightning Talks of Young Crystallographers“* durchgeführt. Hier konnten 22 Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler ihre jeweiligen Poster in Kurzvorträgen vorstellen.

Die sechs Plenar-Vorträge von international renommierten Kolleginnen und Kollegen fanden alle wie geplant statt:

- Prof. Dr. Bo Brummerstedt Iversen (Aarhus University, Aarhus/Dänemark): „Materials Crystallography“
- Prof. Dr. Wayne Hendrickson (Columbia University, New York/USA): „Optimization of Anomalous Diffraction Analysis“
- Prof. Dr. Andrew Goodwin (University of Oxford, Oxford/Großbritannien): „Crystallography without crystals? “
- Prof. Dr. Alessia Bacchi (University of Parma, Parma/Italien): „Trapping liquids into crystals“
- Prof. Dr. Chrystele Sanloup (University of Edinburgh, Edinburgh/Großbritannien): „Short-range order in silicate melts at high pressure“
- Prof. Dr. Oliver Einsle (Universität Freiburg): „Life without Restraints – unusual metal centers in bioinorganic chemistry“

Ralf Ficner, Göttingen

Gespräche und Diskussionen während der Postersession und der Industrieausstellung.

Organisatoren und Preisträger des Posterpreises der „Jungen Kristallographen“.

Gesellschaftsabend im „Bullerjahn“ im alten Rathaus von Göttingen.

Ralf Ficner

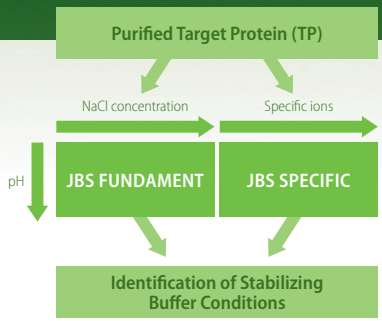
Susan Schorr

JBS Thermofluor Screens

Assess protein stability within 30 minutes

Since there is no such thing as a standard buffer for all proteins, success of purification and downstream processing of a particular protein of interest greatly depends on identification of a buffer environment that facilitates the protein's stability & homogeneity in solution [1,2]. Thus, in most labs it has become routine to search for stabilizing conditions before starting time-consuming experiments such as

- **Crystallization**
- **Ligand/Inhibitor Screening**
- **Activity Assays and**
- **Large Scale Production and Formulation.**



JBS Thermofluor Screens use the concept of categorizing buffer components into

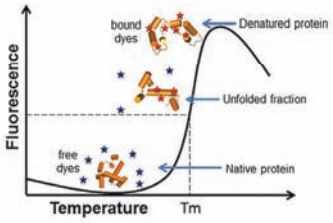
- **FUNDAMENTAL** factors that influence the ***whole* protein molecule** and
- **SPECIFIC** factors that affect **energetically important *hot spots*** on the protein

JBS Thermofluor Screens allow identification of a buffered environment that stabilizes the protein of interest. Both screens are based on broad-range buffer systems [3].

While JBS FUNDAMENT allows screening the pure pH effect at different ionic strengths, the JBS SPECIFIC is for screening of high-scoring mono-, di- and trivalent ions [4].

The protein's melting temperature (Tm) is used as reporter for protein stability and determined by a thermal shift assay (96-well plate format) monitoring the unfolding of a protein in a temperature-dependent manner. The higher the Tm, the higher is the thermostability of the protein in that specific environment.

The screens come in ready-to-use 96-well plate format compatible with standard qPCR machines along with dye and control protein. Simply start the experiment by adding the protein of interest plus dye and obtain a melting curve within 30 minutes!



Product	Cat. No.	Amount	Price (EUR)
JBS FUNDAMENT Thermofluor Screen	CS-330	1 Kit	236,00
JBS SPECIFIC Thermofluor Screen	CS-331	1 Kit	236,00

References:

[1] Boivin *et al.* (2013) Optimization of protein purification and characterization using Thermofluor screens. *Protein Expression and Purification* **91**:192.

[2] Reinhard *et al.* (2013) Optimization of protein buffer cocktails using Thermofluor. *Acta Cryst. F* **69**:209.

[3] Newman (2004) Novel buffer systems for macromolecular crystallization. *Acta Cryst. D* **60**:610.

[4] http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do

Jena Bioscience GmbH
Loebstedter Str. 71
07749 Jena
Germany

Phone +49 (0)3641-62 85 000
Fax +49 (0)3641-62 85 100
www.jenabioscience.com
info@jenabioscience.com

Jena Bioscience

Bericht des Stipendiaten zum IUCr-Kongress in Montréal

Meine Teilnahme am 23. Kongress der IUCr wurde erst durch den großzügigen Zuschuss der DGK ermöglicht, für den ich mich auf diesem Weg herzlich bedanken möchte.

Die Tagung fand vom 5. bis 12. August 2014 in Montréal statt. Neben dem ausgezeichneten wissenschaftlichen Programm bot sich dort auch die Gelegenheit zum wissenschaftlichen Austausch, zum Beispiel bei den Postersessions und zwischen dem Vortragsprogramm. Ein Highlight war auch der zentrumsnahe Veranstaltungsort, von dem aus Montréal gut kennengelernt werden konnte. Insbesondere die vielen Bars und Restaurants boten die Gelegenheit mit anderen Tagungsteilnehmern nach dem wissenschaftlichen Programm ins Gespräch zu kommen.

Vom Vortragsprogramm ragte der Hauptvortrag über die Gewinnung des ersten Pulverdiffraktogramms vom Mars heraus. Neben einer groben Analyse der Zusammensetzung der Marsoberfläche wurde der Versuchsaufbau von CheMin gezeigt, einem von zehn Instrumenten des Marsrovers Curiosity. Daneben gab es viele interessante Mikrosymposien, von denen ich insbesondere die in den Themenbereichen Fehlordnung, PDF (*Pair Distribution Function),* modulierte Strukturen und Elektronenkristallographie besucht habe. Mein eigener Posterbeitrag handelte von der Charakterisierung neuer Verbindungen im pseudobinären System $SnSe$-Bi_2Se_3. Abgerundet wurde das Programm von Seminaren zu neuer Software, wo die Autoren zu einzelnen Funktionen direkt befragt werden konnten. Ich habe an den Vorstellungen von SHELXT, einem neuen Programm zur Strukturlösung und Symmetriebestimmung, sowie von YELL, einem Programm zur Verfeinerung von diffuser Streuung, teilgenommen.

Insgesamt bot die Tagung einen umfassenden und sehr interessanten Überblick über neue Entwicklungen in der kristallographischen Forschung.

Philipp Urban, Leipzig

Symmetrie traditioneller javanischer Batikmuster

Während meiner fast 30-jährigen Dienstzeit als technische Assistentin am Institut für Kristallographie der Universität Frankfurt am Main waren die mir übertragenen Aufgaben vielfältig. Neben chemischen und physikalischen Analysen gehörten dazu die Herstellung von Posterbeiträgen und Fotos für wissenschaftliche Tagungen sowie die Erstellung von Unterrichtsmaterialien für die Vorlesungen. Einiges zu tun gab es da für die Symmetrieübungen. Nach der dritten Saison mit Bildern von Escher fühlte ich mich von den phantastischen Fabeltieren gebissen und ging auf die Suche nach neuen Beispielen. Gleichzeitig hoffte ich, bei den Studenten aus orientalischen Ländern mehr Interesse an den Übungen zu wecken, indem ich ihnen Muster aus ihrem eigenen Kulturbereich präsentierte. Bücher über Volkskunst aus aller Welt waren sehr hilfreich, besonders eine 5-bändige Serie „Ornamente der Völker“, Wasmuth Tübingen, 1953–1968.

Seit 1970 beschäftigte ich mich mit Java und javanischer Kultur, insbesondere mit Batik und anderen traditionellen Textilien. In meiner Sammlung entdeckte ich unter den Batiken aus Java 13 der 17 möglichen Ebenengruppen und alle 7 Bandsymmetrien. Das brachte uns, meine Freundin Hani Winotosastro und mich, auf die Idee, eine Batik zu entwerfen, die im Patchworkstil viele der traditionellen Muster zeigt. Die Fertigstellung nahm fast zwei Jahre in Anspruch.

Für die ECM in Marrakech hergestellte Batik im Patchworkstil, die mehrere traditionelle Muster zeigt.

Herstellung einer traditionell gefärbten Batik: Wachsung (links) und Indigofärbung (rechts).

Der Herstellungsprozess einer traditionell gefärbten Batik – Indigoblau und Sogabraun auf weißem Untergrund – besteht aus mindestens acht Arbeitsgängen, nämlich: Übertragen des Musters auf den Stoff (Lichttisch); Wachszeichnung der Umrisse und aller Stellen, die weiß und braun werden sollen; 1. Färbung mit Indigo mit anschließender Oxidierung an Luft; Entfernung der Wachszeichnung durch Auskochen; erneutes Abdecken aller Linien und Flächen, die weiß und blau bleiben sollen; 2. Färbung in Soga (Farbstoff aus Baumrinde und Holz); Fixierung mit Pflanzenauszügen; Auskochen.

Auch die hochsymmetrischen Batikmuster früherer Jahrhunderte wurden auf diese Weise gemacht. Angesichts der bearbeiteten Fläche (1 m × 2,5 m) fragt man sich, was der Grund für die vielfache regelmäßige Wiederholung oft kleiner Motive war. R. T. Hardjonegoro, der Direktor des Palastmuseums in Solo, erklärte es damit, dass die ständige Konzentration auf das Muster ein Mittel zur Meditation war.

Auffällig ist, dass in dem zu 90 % islamischen Java kaum 6-zählige Symmetrien zu finden sind, während die 3-zähligen Gruppen ganz fehlen. Zwei Philosophiemodelle spielen noch heute in Java eine bedeutende Rolle – das hindujavanische Kompassmodell Mancapat und der Dualismus. Beim Kompassmodell sind den vier Himmelsrichtungen und dem Zentrum Farben, Hindugötter, javanische Wochentage etc. zugeordnet, wobei das Zentrum immer die höchste Stellung einnimmt (z. B. Gott Shiva und die Farbe weiß). Die Mehrzahl der Batikmuster mit 4-zähligem Drehpunkt könnte hier seine Ursache haben. Der Dualismus zeigt sich sowohl im 2-zähligen Drehpunkt als auch in der Gegenüberstellung von Gegensätzen (Ober- und Unterwelt, hell/dunkel, links/rechts).

Eine CD der „Marrakech"-Batik ist in Vorbereitung. Sie soll im Oktober erscheinen und neben einer Gesamtansicht Fotos aller Einzelmuster mit den javanischen Namen sowie eine einfache Einführung in die Symmetrielehre und die Muster der javanischen Batiken enthalten.

Annegret Haake, Frankfurt am Main

Die Arbeitskreise der DGK berichten

ARBEITSKREIS „JUNGE KRISTALLOGRAPHEN“ / „YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS“

Seit mittlerweile mehr als zwei Jahren gibt es den Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ der DGK und in dieser Zeit ist einiges geschehen. Der Arbeitskreis zählt nunmehr über 120 Mitglieder und wächst stetig, auch dank der Tätigkeit der Lehrstuhlinhaber und Gruppenleiter mit kristallographischer Ausrichtung, die ihre Mitarbeiter und Studenten zur wissenschaftlichen Vernetzung ermutigen.

Online ist der AK auf einer ausführlichen Webseite im Rahmen der DGK-Homepage vertreten – *http://dgk-home.de/aks/jkyc* – und verbreitet Neuigkeiten auch auf den üblichen Kanälen der sozialen Netzwerke. Aber auch abseits der virtuellen Sphären trifft man sich – mittlerweile bis zu zwei Mal im Jahr –, um neueste wissenschaftliche Erkenntnisse, aber auch Erfahrungen auf dem Jobmarkt, in der Wissenschaftspolitik und in weiteren relevanten Bereichen des Forschungsbetriebs auszutauschen.

Zum „1st Meeting of the Young Crystallographers“ gibt es im nachfolgenden Artikel einen Bericht, verfasst von der Teilnehmerin Julia Ilina von der HU Berlin. Über 30 Teilnehmer trafen sich für drei Tage im September 2014 an der Exzellenzuniversität Bremen und wirkten an einem vielseitigen wissenschaftlichen Programm mit, das viele Gelegenheiten zum fachlichen Diskurs und allgemeinen Austausch gab. Hanna Lührs von der Universität Bremen sei an dieser Stelle nochmals für die herausragende Organisation gedankt, sowie Thorsten Gesing für die großzügige und vorausschauende Einladung.

Zudem konnten die Jungen Kristallographen an der diesjährigen DGK-Jahrestagung in Göttingen erstmals ein eigenes Mikrosymposium anbieten, das – angelehnt an das Bremer Konzept – aus über 20 fünfminütigen Vorträgen, sowie einer anschließenden Postersession bestand und sehr gut aufgenommen wurde. Die aus fast 60 eingereichten Beiträgen ausgewählten Vortragenden waren hierbei nicht nur bei den eigens im Mikrosymposium vergebenen Posterpreisen, sondern darüber hinaus auch bei den Auszeichnungen der Tagung im Allgemeinen sehr erfolgreich.

Desweiteren veranstaltete der Arbeitskreis, unterstützt durch die großzügigen Industriesponsoren, ein mittagspausenüberspannendes „Get Together“, bei dem Bilanz gezogen sowie neue Pläne bekannt gemacht und geschmiedet wurden. Zudem gab es eine Umgestaltung des

AK-Teams, die eine stetige Erneuerung der Sprecher bei maximalem Erfahrungsaustausch ermöglichen wird. Oliver Pecher (University of Cambridge) übernimmt – ähnlich wie in seiner bisherigen Rolle des Co-Sprechers – die Organisation von Events, sowie die Finanzen des Arbeitskreises, während Carola Müller (Lunds Universitet) das Sprecher-Duo mit Julia Dshemuchadse (University of Michigan – Ann Arbor) vervollständigt. Neue Aufgaben im Team werden übernommen von Julia Ilina (HU Berlin), Lilith Domnik (HU Berlin), Gregor Hofer (ETH Zürich), Falk Meutzner (TU Bergakademie Freiberg) und Jan Philipp Wöhrle (Universität Freiburg).

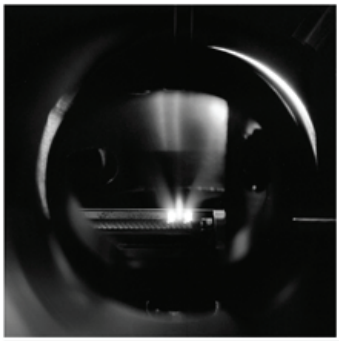
Eine weitere Aktivität des AK wird im Herbst stattfinden: Das „Lab Meeting @ STOE“ der Jungen Kristallographen der DGK wird am 8./9. September 2015 in Darmstadt abgehalten und soll den Teilnehmern Einblicke in Methoden und Technologien sowie Arbeitsabläufe in der Industrie und Wissenschaft geben. Das nächste AK-Treffen 2016 in Berlin wird von den Organisatoren an der HU Berlin bereits aktiv geplant.

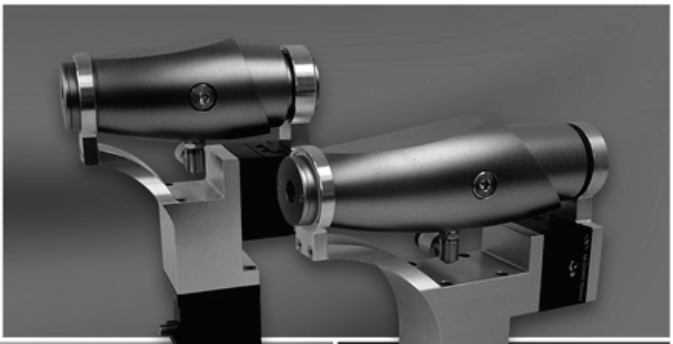
Der AK Junge Kristallographen hatte ein sehr erfolgreiches Jahr. An dieser Stelle möchten wir uns bei allen, die dazu beigetragen haben, ganz herzlich bedanken. Dies sind allen voran der DGK-Vorstand, der uns stets unterstützend zur Seite steht, aber ebenso unsere treuen Industriesponsoren – vor allem STOE, PANalytical, Bruker und Dectris – sowie zahlreiche Unterstützer aus den Reihen der DGK. Wir freuen uns darauf, mit unseren Aktivitäten weiterhin einen Beitrag zur Deutschen Gesellschaft für Kristallographie leisten zu dürfen!

Julia Dshemuchadse (Ann Arbor, Michigan, USA) und Carola Müller (Lund, Schweden)

APPLIED X-RAY OPTICS

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)

AXO DRESDEN GmbH
Applied X-ray Optics – High Precision Deposition

Gasanstaltstr. 8b · 01237 Dresden · Germany
phone: +49-351-250897-20 · fax: +49-351-250897-66
contact@axo-dresden.de · www.axo-dresden.de

AXO

MORE THAN 20 YEARS OF EXPERIENCE IN X-RAY OPTICS AND HIGH PRECISION DEPOSITION

Bericht vom „1st Meeting of the DGK's Young Crystallographers"

28.–30.09.2014, Universität Bremen

Das erste Mal hörte ich von den Jungen Kristallographen auf der 22. Jahrestagung der DGK in Berlin. Während eines 30-minütigen Treffens zwischen Mikrosymposien machte eine kleine Gruppe junger und ambitionierter Wissenschaftler die Gründung dieses neuen Arbeitskreises bekannt, der anstrebt, den Erfahrungsaustausch zwischen jungen Kristallographen in verschiedenen Forschungsfeldern zu verbessern und aktiv zu unterstützen. Jeder junge Kristallograph wurde eingeladen und ermutigt an einer ersten Wissensaustausch-basierten Veranstaltung im späten September in Bremen teilzunehmen. Gesagt, getan: Sechs Monate später befand ich – eine junge Strukturbiologie-Doktorandin und nun stolze Teilnehmerin der ersten Veranstaltung dieses neuen Arbeitskreises – mich im Zug nach Bremen und konnte es kaum erwarten die anderen Jungen Kristallographen zu treffen.

Am ersten Treffen der Jungen Kristallographen der DGK nahmen drei erfahrene Vortragende aus der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie teil, sowie 28 Junge Kristallographen – vornehmlich Doktoranden und Postdoktoranden –, vier Industrievertreter, sowie eine Reihe weiterer Teilnehmer, die für die Durchführung der Veranstaltung verantwortlich waren und ebenfalls aktiv am Programm teilnahmen. Das Treffen fand vom 28. bis 30. September 2014 statt und bestand aus drei unterschiedlichen Themenblöcken: Vorträge und „Lightning Talks", Postersitzungen sowie einem Unterhaltungsprogramm.

Der erste Tag des Treffens begann mit einem gemütlichen Grillabend auf dem Campus der Universität Bremen, an dem die Teilnehmer die Möglichkeit hatten, einander vor dem Beginn des offiziellen, akademischen Programms kennenzulernen.

Der zweite Tag begann mit den Willkommensworten von Prof. Thorsten Gesing (Universität Bremen), gefolgt von einem Vortrag eines Mentors der Jungen Kristallographen, Prof. Ulli Englert (RWTH Aachen). Er besprach die Herausforderung der Untersuchung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen mittels Röntgendiffraktion. Am Nachmittag fand der Vortrag des Max-von-Laue-Preisträgers Dr. Tilmann Leisegang (Fraunhofer THM) statt, der die Methodik der Röntgenabsorptionsspektroskopie anhand einer Untersuchung des $YMnFeO_5$-Systems vorstellte. Im Anschluss an jeden Vortrag hatte das Publikum die Gelegenheit Fragen zu stellen.

Eine der besten Komponenten des Treffens war die Gelegenheit, das eigene Projekt vor dem multidisziplinären Publikum zu präsentieren. Alle Teilnehmer waren angehalten, ihre Forschung in einer fünfminütigen Präsentation vorzustellen. Diese „Lightning Talks“ bildeten die Grundlage für eine darauf folgende, zweistündige Postersession. Die Beiträge waren in drei Sitzungen unterteilt, von denen die ersten zwei – „Structures and properties“ – an diesem zweiten Tag des Treffens abgehalten wurden, jeweils nach einer Vorlesung der eingeladenen Vortragenden.

Zusätzlich zum umfassenden akademischen Teil des zweiten Tages gab es noch einen spannenden Tagesordnungspunkt im Unterhaltungsteil des Programms: Abendessen in einem traditionellen Bremer Restaurant und ein zauberhafter, geführter Nachtwächter-Stadtrundgang durch die schlafende Innenstadt.

Hanna Lührs (Universität Bremen, Organisatorin), Thomas Hartmann (STOE), Anja Burkhardt (DESY Hamburg, Preisträgerin), Lilith Domnik (HU Berlin, Preisträgerin), Ken Inge (Universität Kiel, Preisträger & Sonderpreis), Pawel Kuczera (ETH Zürich, Preisträger), Falk Meutzner (TU Bergakademie Freiberg, Preisträger), Oliver Pecher (University of Cambridge, Organisator), Julia Dshemuchadse (ETH Zürich, Organisatorin).

Der dritte Konferenztag begann mit einer Vorlesung über die höherdimensionale Strukturbeschreibung, gehalten von Dr. Andreas Schönleber (Universität Bayreuth). Die „Lightning Talks“ und die dazugehörige Postersession, die darauf folgten, waren den „Methods and Processes“ in der Kristallographie gewidmet. Eine großartige Idee der Organisatoren war es, Industrievertreter einzuladen, um Einblicke in das Für und Wider einer Karriere in der Industrie – verglichen mit einer Karriere in der akademischen Forschung – zu geben. Alexander Gerisch (Bruker AXS), Lars Grieger (PANalytical), Dubravka Šišak Jung (DECTRIS) und Thomas Hartmann (STOE) hielten jeder einen zwanzigminütigen Vortrag und stellten die Anforderungen des industriellen Arbeitsumfeldes an junge Kristallographen im Detail vor.

Der offizielle Teil des ersten Treffens der Jungen Kristallographen der DGK wurde mit der Preisverleihung abgeschlossen: Fünf Teilnehmer wurden mit Preisen für ihre „Lightning Talks“ und die dazu gehörenden Poster ausgezeichnet.

Wie erwartet hielt auch der letzte Konferenztag ein interessantes Unterhaltungsprogramm bereit: Die Exkursion zum „Center of Applied Space Technology and Microgravity“ (ZARM), gefolgt von einem feierlichen Abendessen und Schwarzlicht-Minigolf im Bremer Hafen.

Dank gilt der exzellenten Organisation durch Dr. Hanna Lührs, Dr. Michael Fischer, Dr. Oliver Pecher, Dr. Julia Dshemuchadse und viele andere. Ich, als Teilnehmerin, konnte nicht nur mein kristallographisches Wissen erweitern und interessante Persönlichkeiten aus der Industrie und der akademischen Forschung treffen, sondern lernte auch die schöne Stadt Bremen kennen. Wichtig sei auch anzumerken, dass die Beiträge der Sponsoren – DGK, FCI, Universität Bremen, STOE, Bruker, DECTRIS, PANalytical, Sanofi – es möglich machten, dass alle Konferenzkosten für die Teilnehmer übernommen werden konnten.

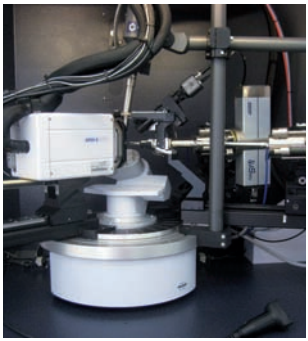
Julia Ilina
zuerst publiziert auf dem DGK-Blog am 28.10.2014 in englischer Sprache:
http://dgk-home.de/report-from-the-1st-meeting-of-the-dgks-young-crystallographers

INCOATEC
innovative coating technologies

Upgrading X-ray diffractometers with Incoatec´s unique microfocus source IμS

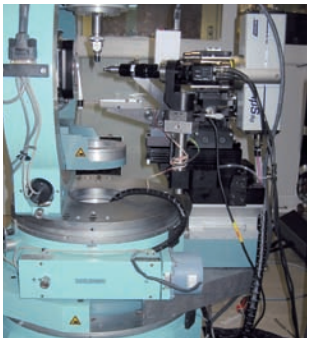
Old systems shine in new bright light...

Bruker AXS Systems



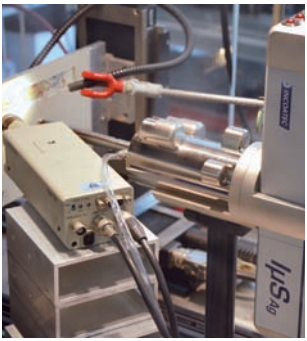
Bruker APEX II DUO IμS in Duesseldorf, Germany

Other Systems



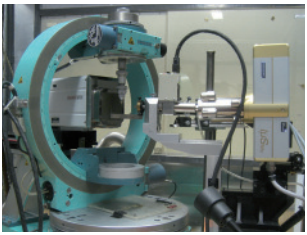
Huber goniometer with APEX II detector in Newcastle, UK

Special Engineering



Combined XRF/XRD setup for paint analysis in Antwerp, Belgium

IμS 500



We were very proud to announce our 500TH IμS CUSTOMER PD Dr. Birger Dittrich from the University of Goettingen. We celebrated this with a 1-day workshop at the Institute of Inorganic Chemistry in Goettingen with high-quality scientific talks. Dr. Dittrich´s main research field is the development of new methods for charge density studies. Their existing Huber goniometer was upgraded with a Golden Mo-IμS HB.

AK 6 „Molekülverbindungen“

Der Arbeitskreis Molekülverbindungen hat 2014 im Internationalen Jahr der Kristallographie den mittlerweile achten Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ zusammen mit dem Arbeitskreis ChemKrist der GDCh-Fachgruppe „Analytische Chemie“ veranstaltet. Dieses Mal vom 15. bis 19.09.2014 und erneut im ehemaligen Zisterzienser-Kloster Hardehausen bei Warburg. 36 Teilnehmer, überwiegend Doktoranden, zusammen mit sieben Dozenten und Tutoren versammelten sich von Montagmittag bis Freitagmittag, um die fundamentalen Aspekte der Kristallstrukturanalyse mit Röntgenstrahlung, losgelöst von herstellerspezifischen Apparaten und Programmen, zu erlernen. Das Team Michael Bolte (Frankfurt), Ullrich Englert (Aachen), Ullrich Flörke (Paderborn), Peter Jones (Braunschweig), Christian Lehmann (Mülheim) und Martin Nieger (Helsinki) wurde erstmals durch Dieter Schollmeyer (Mainz) verstärkt. Der ungebrochene Andrang und die rundweg positive Resonanz der Teilnehmer spiegeln sich in der Entscheidung 2016 die dann neunte Sommerschule am bewährten Ort zu veranstalten.

Ein besonderes Highlight im Internationalen Jahr der Kristallographie war die Eröffnungsveranstaltung Ende Januar in Paris. Aus Sicht der Molekülkristallographie gab es in Deutschland eine Reihe interessanter Veranstaltungen. Während der analytica-Konferenz in München wurde ein Mikrosymposium mit dem Titel *„International Year of Crystallography – Current Topics in Industry and Academia“* veranstaltet. Einem Übersichtsvortrag, der die Geschichte der Kristallographie seit der Verleihung des Nobelpreises für Physik an Max von Laue für die Entwicklung der Röntgendiffraktion behandelte, folgten Fachvorträge, die aus allen Bereichen der Kristallographie zusammengestellt waren. An meinem Institut hat im Oktober Roland Boese einen öffentlichen Abendvortrag gehalten und dabei in brillanter Weise den Spagat zwischen Allgemeinverständlichkeit und wissenschaftlichem Anspruch gemeistert, als er über geschichtete Medikamente im Magen, brennendes Eis und Benzol-Acetylen-Dünen auf dem Saturnmond Titan referierte.

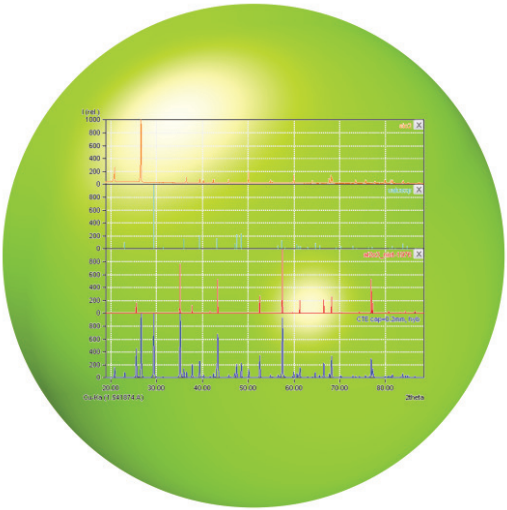
Für 2015, in der Woche vom 5. bis 9. Oktober, ist zusammen mit ChemKrist wieder eine Workshop-Konferenz, dieses Mal zum Thema Kristallstrukturbestimmung aus Pulverdaten geplant. Den Veranstaltern Martin Schmidt und Norbert Nagel (beide Frankfurt am Main), schon einmal von hier aus ein herzliches Dankeschön. Der Workshop-Konferenz wird ein Workshop zur *Crystal Structures Database*, der vom *Cambridge Crystallographic Data Centre* an der Uni Frankfurt veranstaltet wird, vorausgehen.

Dieses ist mein letzter Jahresbericht als Sprecher des AK 6. Auf der Jahrestagung der DGK in Göttingen wurden in einer Mitgliederversammlung des AK 6 der bisherige stellvertretende Sprecher Prof. Ullrich Englert (RWTH Aachen) zum neuen Sprecher und Dr. Alexander Pöthig (LMU München) zum Stellvertreter gewählt. Meinen Nachfolgern wünsche ich viel Erfolg in ihrem Amt und hoffe, dass die Mitglieder des AK 6 die neue Führungsspitze mit vielen Konferenzbeiträgen für unsere Jahrestagung und reger Teilnahme an den Veranstaltungen unterstützen.

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction



Neue Version 3!

Auf den ersten Blick sieht die neue Match! Version 3 aus wie die bisherige Version 2, und sie lässt sich auch genau so bedienen. Dennoch ändert sich mit ihr einiges:
Mit der neuen Version 3 nehmen wir Abschied von unserem bisherigen Modell der kostenpflichtigen Updates. Stattdessen gibt es nun ein sogenanntes “Subskriptionsmodell”, das uns erlaubt, die Software kontinuierlich weiterzuentwickeln.
Sie erwerben für eine bestimmte Zeit (die sogenannte Subskriptionsphase) das Recht, alle in dieser Zeit verfügbar werdenden Updates zu installieren. Selbstverständlich können Sie die Software auch künftig zeitlich unbegrenzt benutzen, auch wenn Sie Ihre Subskriptionsphase zwischenzeitlich einmal nicht verlängern!

Darüber hinaus gibt es natürlich auch erste funktionelle Neuerungen:

- Neue Entries können jederzeit zur Referenzdatenbank hinzugefügt werden, ohne den User Database Manager zu benutzen oder eine Neuindexierung durchführen zu müssen.
- Die automatische Rietveld-Verfeinerung kann nun konfiguriert werden. Der Benutzer kann in einem komfortablen neuen Dialog festlegen, welche Parameter in welchem von bis zu 10 Zyklen verfeinert werden sollen.
- Es gibt einen neuen User level "Rietveld", der alle Schritte von der Rohdatenverarbeitung über die Phasenidentifizierung bis hin zur Rietveld-Verfeinerung automatisch durchführt.
- **Kostenlose Testversion** sowie weitere Infos: **http://www.crystalimpact.com/match**

CRYSTAL IMPACT

CRYSTAL IMPACT
H. Putz & K. Brandenburg GbR
Kreuzherrenstr. 102
D-53227 Bonn

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

Bericht zum 15. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“

26. – 29. Mai 2015, Ruhr-Universität Bochum

Die Kernspinresonanzspektroskopie (von engl. *Nuclear Magnetic Resonance,* kurz NMR) ist eine Methode zur lokalen Strukturaufklärung und findet in weiten Bereichen der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung Anwendung. Unterstützung bei Rietveld-Verfeinerungen, Charakterisierung von dynamischen Prozessen, Untersuchung von kristallinen und amorphen Keramiken oder der Einsatz der NMR-Spektroskopie für geochemische bzw. petrologische Fragestellungen (Elementdiffusion in Schmelzen, Lokalstruktur in Schmelzen oder Gläsern) lassen sich hier als Beispiele nennen.

Um interessierten Studenten und Doktoranden aus dem Bereich der Mineralogie und Geowissenschaften eine Einführung in das weitgefächerte Gebiet der Festkörper-NMR-Spektroskopie zu geben, fand vom 26. bis 29. Mai 2015 am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum unter der Leitung von PD Dr. Michael Fechtelkord und mit gemeinschaftlicher Unterstützung durch DMG und DGK (Arbeitskreis Spektroskopie) der mittlerweile 15. Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ statt. Am Kurs haben 15 Studierende im Masterabschnitt, Doktoranden und Post-Docs aus Berlin, Bochum, Halle a. d. Saale, Jena und Jülich teilgenommen. Gelegenheiten um unter den Teilnehmern das „Eis zu brechen“ fanden sich am ersten Tag (gemeinsamer Besuch des nahegelegenen Restaurants „Summa cum Laude“) und am vorletzten Tag (Möglichkeit im Restaurant „Vuko’s“ zu kegeln).

Die einzelnen Kurstage gliederten sich in einen vormittäglichen theoretischen Teil und in einen darauf aufbauenden praktischen Teil (Probenpräparation, hard- und softwareseitige Bedienung des BRUKER ASX 400 Spektrometers, Auswertung der Messungen) am Nachmittag. Am ersten Tag erfolgte eine Einführung in die theoretischen, mathematischen und physikalischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie, der möglichen Aufgaben- und Anwendungsgebiete sowie zum Aufbau eines NMR-Spektrometers und der ^{1}H-Spin-Gitter-Relaxation. Im praktischen Teil des ersten Tages wurden Spin-Gitter-Relaxationszeiten von Tetramethylammoniumjodid bei unterschiedlichen Temperaturen bestimmt und „per Hand“ die entsprechenden Aktivierungsenergien von Methylgruppenrotationen im $(CH_3)_4I$ auf halblogarithmischen Papier ermittelt. Der Fokus im Theorieteil des zweiten Tages lag auf der magnetischen dipolaren Wechselwirkung, der chemischen Verschiebung, dem MAS-Verfahren (*Magic Angle Spinning*) und einer Einführung in die Spektrenauswertung mit dem Freeware-Programm DMFIT. Das MAS-Verfahren konnte am Nachmittag an synthetischem Phlogopit bei der Aufzeichnung von ^{1}H-, ^{19}F- und ^{29}Si-Spektren direkt angewendet und im Anschluss daran die Spektren mit DMFIT ausgewertet werden. Der vorletzte Kurstag

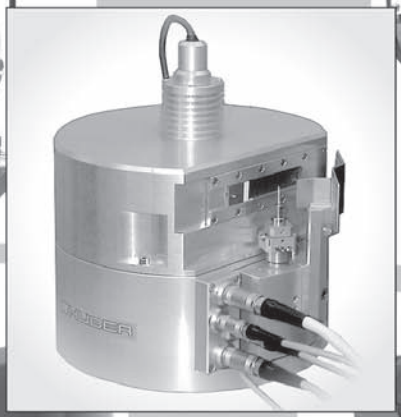
beschäftigte sich mit den Grundlagen des Hahn'schen Echos, der Kreuzpolarisationstechnik (CPMAS) und der Anwendung an einer Kaolinit-Probe (^{1}H- und ^{29}Si-Spektren) sowie der Auswertung mittels Excel. Messmethoden für Kerne mit Kernspin > ½ und NMR-Verfahren wie die DOR (*Double Rotation*), MQMAS (*Multiple Quantum Magic Angle Spinning*) und SATRAS (*Satellite Transition Spectroscopy*) standen am letzten Tag im theoretischen Teil im Vordergrund. Im letzten praktischen Teil für diesen Shortcourse erfolgten Messungen der Quadrupolkerne ^{23}Na und ^{27}Al an NaCl, $NaSO_4$ und α-Al_2O_3 Probenmaterial sowie die Auswertung der aufgezeichneten Spektren mittels DMFIT und die Bestimmung der Quadrupolkopplungskonstante von α-Al_2O_3.

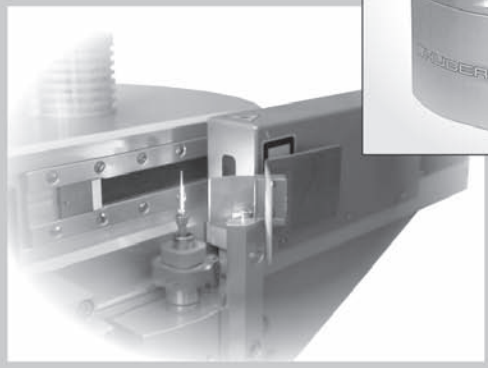
Das sich bereits in dieser Kurzfassung abzeichnende straffe Programm des Kurses war nur durch sehr gute Vorbereitung und Leitung des Kurses sowie das stetige persönliche Engagement und die Hilfsbereitschaft von Dr. Michael Fechtelkord erfolgreich zu bewältigen. Das zu Anfang des Kurses ausgeteilte umfangreiche Skript war bei den Theorie-Vormittagen sehr hilfreich. Der Shortcourse eignet sich für alle an der Festkörper-NMR-Spektroskopie interessierten MSc-Studierenden und Doktoranden, idealerweise mit mineralogischen und quantenmechanischen Vorkenntnissen. MSc-Studenten können weiterhin nach abgelegter benoteter Prüfung drei Kreditpunkte (ECTS) durch Teilnahme am Kurs erlangen. Ein mehr als gelungener Shortcourse der bedenkenlos weiter empfohlen werden kann. Abschließend lässt sich daher nur eines sagen: Danke Herr Dr. Fechtelkord!

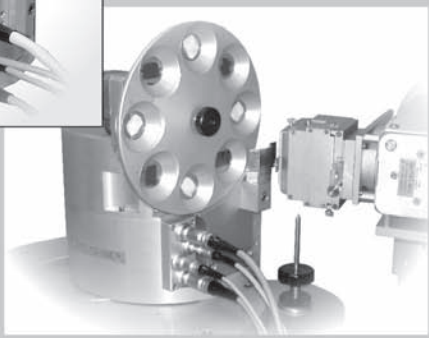
Achim Schaller, Tobias Linke und Karen Dietmann (Halle/Saale)

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry







HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

- ☑ A factor of more than100 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

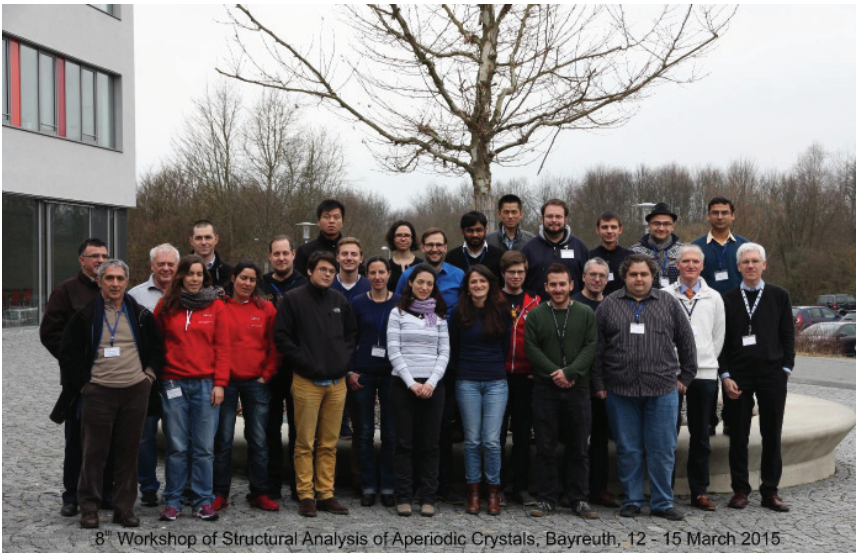
Tel: +49 (0)8051 68780
Fax: +49 (0)8051 687810
info@xhuber.com
www.xhuber.com

Report on the 8th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals

12–15 March 2015, University Bayreuth

The 8th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals took place at the University of Bayreuth in Bayreuth, Germany, from 12 through 15 March 2015. The Workshop has been organized by the Special Interest Group on Aperiodic Crystals (AK 16) of the German Crystallographic Association (DGK). Local organisation was by Andreas Schönleber and Sander van Smaalen. The University of Bayreuth provided several seminar rooms for lectures, tutorials and the poster session. The objectives of the Workshop were to provide an overview of aperiodic order in crystals, of the basics of the superspace description of modulated structures and crystal chemical understanding of aperiodic crystals, as well as a working knowledge of structural analysis of aperiodic crystals.

Lecturers were Michal Dusek, Lukas Palatinus and Vaclav Petricek from Prague, Czech Republic, and Maxim Bykov, Andreas Schönleber and Sander van Smaalen from Bayreuth, Germany. Lectures were organized in slots of 2×45 minutes or 1×90 minutes, respectively. Topics were introduction to order in aperiodic crystals, the superspace approach, superspace symmetry and an introduction to the use of the software Jana2006. More advanced topics were diffraction by aperiodic crystals, twinning and overlapping reflections, structure solution by Charge Flipping as well as magnetic structures. In addition, case studies on nuclear and magnetic structures and pressure-induced incommensurate phases of FeOCl-type compounds were presented.



An important part of the Workshop was a practical course employing the software Jana2006, which allowed the participants to obtain a working knowledge of structural analysis, to which the afternoons were dedicated. A tutorial based on selected examples guided the participants step by step through the procedure of structural analysis of modulated structures. Exercises included in the script motivated the participants not only to press buttons, but to take a pencil and a piece of paper and to think about the theory behind the procedures, instead. The lecturers served as tutors.

The Workshop started on Thursday afternoon with registration, a first lecture and a Welcome party in the evening. On Saturday afternoon a poster session was organized in which participants could present and discuss their own research projects, on Saturday evening the Workshop dinner took place. Every morning and every afternoon a 30 minute break with coffee/tee and snacks gave possibility for discussion and exchange with participants and lecturers.

The 8th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals was attended by 29 participants, including the lecturers, i. e. 17 young scientists (mainly PhD students) and 16 post-docs and senior scientists. The participants came from Czech Republic (4), France (3), Germany (16), and Switzerland (6). Participants came from universities and research institutes including departments of solid state physics, inorganic chemistry, general chemistry, geosciences, materials science and crystallography. This list shows that interest in aperiodic crystals persists in all areas of research on the solid state.

Andreas Schönleber and Sander van Smaalen, Bayreuth

DECTRIS®

detecting the future

New laboratory detectors

HPC X-ray detectors for your laboratory

Synchrotron technology at laboratory budgets

- *Noise-free Hybrid Photon Counting technology*
- *Ultimate resolution thanks to direct detection*
- *Superior SNR from Ti to Ag, speeding up high-throughput applications*

laboratory and industry

sales@dectris.com | www.dectris.com

Protokoll des 2. Arbeitskreistreffens des AK 20 in Bad Schandau

29.09.2014 bis 01.10.2014

Auf dem zweiten Treffen des Arbeitskreises „Materialwissenschaftliche Kristallographie“, an dem 12 Arbeitskreismitglieder teilnahmen und der thematisch breit aufgestellt war, wurden sowohl die Arbeitsschwerpunkte der einzelnen Arbeitsgruppen vorgestellt als auch die aktuellen Forschungsergebnisse ausführlich diskutiert. Konsens des Arbeitskreistreffens war es, bei zukünftigen Treffen mehr Zeit für strategische Überlegungen einzuplanen und diese im Vorfeld entsprechend vorzubereiten. Es wurde von den anwesenden Arbeitskreismitgliedern beschlossen, beim nächsten Treffen konkrete Vorschläge für gemeinsame Finanzierungsmöglichkeiten, wie die Förderung von Forschergruppen durch die DFG zu diskutieren. Ein Thema, das beispielweise in vielen Arbeitskreisen auf verschiedenen Ebenen auf großes Interesse stößt, ist die Mikrostrukturanalyse von anorganischen Feststoffen. Des Weiteren sollen beim nächsten Treffen Themen für gemeinsame Projekte und/oder die Nutzung technischer Ausstattung ohne direkte finanzielle Förderung formuliert werden.

Nach dem wissenschaftlich anspruchsvollen Teil gab es auch noch einen körperlich kräftezehrenden Aufstieg: zur Schrammsteinaussicht. Diese kleine Wandertour soll sogar einen Teilnehmer von der Höhenangst kuriert haben.

Das nächste Arbeitskreistreffen ist für die Zeit vom 21. bis 23.09.2015 am Helmholtz-Zentrum in Berlin geplant. Interessenten können sich bereits per E-Mail anmelden:

http://dgk-home.de/meetings/workshops

Anke Köhler (Freiberg) und Claudia Weidenthaler (Mülheim an der Ruhr)

Personalia

Jubilare 2015

Vorname	Name	Ort	Alter
Roland	Boese	Essen	70
Hans-Jörg	Deiseroth	Siegen	70
Detlef	Fanter	Teltow	70
Hans Anton	Graf	Berlin	70
Rüdiger	Kniep	Langenfeld	70
Jürgen	Kräußlich	Jena	70
Gerhard	Materlik	Oxfordshire	70
Gernot	Schubert	Falkensee	70
Burkhard	Ziemer	Berlin	70
Helmuth	Zimmermann	Erlangen	70
Hans	Berger	Berlin	75
Udo	Bogner	Regensburg	75
Martin	Dräger	Mainz	75
Otto	Ermer	Köln	75
Heinrich	Fink	Espenau	75
Wolfhart	Göcke	Rostock	75
Herbert E.	Goebel	München	75
Hans	Hartl	Berlin	75
Siegfried	Heinrich	Offenburg	75
Hartmut	Jex	Ulm	75
Walter	Jung	Köln	75
Volker	Krämer	Freiburg	75
Emil	Makovicky	Lyngby	75
Ulrich	Müller	Marburg	75
Fritz	Parak	Dachau	75
Peter	Paufler	Dresden	75
Dieter	Pohl	Hamburg	75
Kriemhild	Reinecke	Berlin	75
Joachim	Bohm	Berlin	80
Walter	Engel	Pfinztal	80
Heino	Freese	Hamburg	80
Wolfgang	Hoffmann	Großsolt	80
Elisabeth	Kirchner	Bergheim	80
Wilfrid Edgar	Klee	Baden-Baden	80
Ali	Kutoglu	Marburg	80
Heinz Hermann	Schulz	München	80
Ursula	Steinike	Berlin	80
Hans-Georg	Weiß	Berlin	80
Wolfgang	Wilde	Berlin	80

Vorname	Name	Ort	Alter
Heinrich	Arnold	Aachen	85
Dietrich	Babel	Marburg	85
Hans	Bradaczek	Berlin	85
Johannes	Heydenreich	Halle	85
Ulrich	Klement	Regensburg	85
Karl	Fischer	Saarbrücken	90
Horst	Saalfeld	Norderstedt	95

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DES

MAX-VON-LAUE-PREISES 2015 AN JULIA DSHEMUCHADSE

© Conventus

Sehr geehrte Damen und Herren,

ich freue mich sehr über die verdiente Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2015 an meine Mitarbeiterin Julia Dshemuchadse. Julia erwarb ihr Diplom in Physik im Jahr 2008 an der TU Dresden. Ihre Diplomarbeit fertigte sie unter der Leitung von Prof. Dirk C. Meyer in der Nachwuchsgruppe Nanostrukturphysik am Institut für Strukturphysik an. Dabei wurde sie von Dr. Tilmann Leisegang (beide frühere Max von Laue-Preisträger – 2004 bzw. 2012) betreut. Ihre Diplomarbeit war der eingehenden Untersuchung eines Seltenerd-Übergangsmetall-Silizids gewidmet, das sowohl als Überstruktur als auch als kommensurabel modulierte Struktur beschrieben werden kann.

Ihre Doktorarbeit führte sie danach unter meiner Leitung am Laboratorium für Kristallographie der ETH Zürich durch. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Untersuchung von intermetallischen Verbindungen mit sehr großen Elementarzellen (bis zu mehr als 23 000 Atome enthaltend). Bis zu ihrem Abschluss 2013 erbrachte sie grundlegende Beiträge zum Verständnis dieser hoch-komplexen Phasen. Anschließend forschte sie zwei weitere Jahre als PostDoc an meinem Institut, ihre Arbeit an intermetallischen Phasen fortführend. Ihre statistischen Untersuchungen zu charakteristischen Strukturparametern nunmehr *aller* bekannten intermetallischen Phasen stellen einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der Strukturbildung intermetallischer Phasen dar.

Julia ist bereits Ko-Autorin von dreizehn Publikationen in international anerkannten Zeitschriften – darunter sechsmal an der Position des Erstautors. Sie arbeitet gegenwärtig mit mir an einer umfangreichen Monographie zu Struktur und Eigenschaften intermetallischer Phasen. Julia hat zudem Beiträge zu zahlreichen internationalen Konferenzen verfasst: Fünf eingeladene Vorträge sowie dreizehn eingereichte Vorträge, dreizehn Posterbeiträge und sieben eingeladene Seminarvorträge an externen Instituten. Ihre Fähigkeit komplexe wissenschaftliche Probleme klar und interessant darzustellen, wurde mit jeweils einem Posterpreis und einer Auszeichnung für den besten Vortrag belegt.

Neben ihren akademischen Leistungen beteiligt Julia Dshemuchadse sich seit einigen Jahren auch aktiv an der Arbeit der DGK. Als Mitgründerin im Jahr 2013 zur Sprecherin des Arbeitskreises „Junge Kristallographen“ ernannt, hat sie maßgeblich dazu beigetragen, diesen neuen AK zu einer Mitgliederzahl von beinahe 100 zu verhelfen. Sie war federführend bei der Erstellung einer umfassenden Internetpräsenz sowie bei der Organisation eines AK-Treffens in Bremen im September 2014. Zusätzlich wurde sie am letzten DGK-Jahrestreffen von der Mitgliederversammlung in das Preiskomitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze gewählt. Julia hat auch ihre Lehrverpflichtungen überdurchschnittlich gut erfüllt: Von den Studenten ihrer wöchentlichen Kristallographie-Übungen wurde sie jedes Jahr mit ausgezeichneten Noten evaluiert.

Die kommenden zwei Jahre wird Julia mit einem Stipendium des Schweizer Nationalfonds an der *University of Michigan* verbringen, um in einem interdisziplinären Projekt den Einflussbereich der Kristallographie auf neue Forschungsgebiete zu erweitern und sie damit zu einer noch moderneren und vielseitigeren Wissenschaft zu machen.

Ich gratuliere Julia auf das Herzlichste zur verdienten Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2015.

Walter Steurer, Zürich

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2015 AN REINHARD NEDER

Lieber Reinhard, liebe Kolleginnen und Kollegen, sehr geehrte Damen und Herren,

als ich von Petra Becker als Mitglied des Preiskomitees gebeten wurde, die Laudatio für den diesjährigen Preisträger der Will-Kleber-Gedenkmünze, Professor Reinhard Bernhard Neder, zu halten, hat mich das sehr gefreut, da ich ihn sowohl als immer bescheiden auftretenden unermüdlichen Forscher, aber auch als hervorragenden Hochschullehrer schätze. Letzteres teile ich mit diversen Studierendengenerationen, die seine didaktisch herausragenden Vorlesungen und Übungen besuchen durften, in denen er ihnen die selbst komplexesten kristallographischen Lehrinhalte in verständlicher Form aufbereitete.

Betrachtet man den Lebenslauf des Namensgebers der Gedenkmünze, Will Kleber, so stellt man auch bei ihm, neben seiner umfangreichen Forschungstätigkeit, einen deutlichen Bezug zur Vermittlung von kristallographischem Wissen fest. Gerade diese intensiven Bemühungen um die Vermittlung von vertieften kristallographischen Inhalten sollte bei den immer schwieriger werdenden Zeiten für das kristallographische Fachgebiet, das vielfach nur noch als Hilfswissenschaft angesehen wird, nicht außer Acht gelassen werden.

Wie dem nachfolgenden Zitat der Verleihungsurkunde zu entnehmen ist, führten diese beiden Tatsachen auch dazu, Reinhard B. Neder für die Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze auszuwählen. Ich darf zitieren: „Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht die Will-Kleber-Gedenkmünze 2015 an Herrn Professor Dr. Reinhard B. Neder für seine herausragenden wissenschaftlichen Leistungen auf dem Gebiet fehlgeordneter Strukturen und sein engagiertes Wirken in der kristallographischen Lehre."

Betrachtet man die Liste der bisherigen Preisträger, begegnen uns herausragende Persönlichkeiten aus dem Fachgebiet der Kristallographie und ihren Nachbarwissenschaften. Es freut mich auch besonders, dass Reinhard nach seinem Doktorvater, oder besser gesagt seinen Doktorvätern, Fritz Frey und Hans Boysen auf dieser Liste aufgenommen wird.

Ich möchte nun im Folgenden seinen wissenschaftlichen Karriereweg und damit seine Leistungen und die Persönlichkeit von Reinhard B. Neder, die zur Auswahl für die Auszeichnung mit der Will-Kleber-Gedenkmünze führten, skizzieren. Nachdem ich ihn erst im späteren Verlauf seiner Karriere kennenlernen durfte, habe ich mich dafür etwas in seinem familiären Umfeld informiert.

Sein Karriereweg in Richtung der Kristallographie begann schon, laut Angaben seiner Schwester, sehr früh. Seine Begeisterung für Kristalle wurde durch seinen Gymnasiallehrer für Chemie und Mathematik im Schillergymnasium Münster geweckt. Danach waren, laut seiner Schwester, die Familienurlaube von Steinbruchbesuchen geprägt, bei denen er, Zitat: „mit einem riesigen Hammer eifrig nach verschiedenen Kristallen forschte. Wir Geschwister wollten ihm natürlich helfen und schleppten alles an, was glitzerte. Die Steinchen sammelten sich in seiner Schreibtischschublade und wurden systematisch katalogisiert und erforscht." Hier zeigte sich schon eine prägende Charaktereigenschaft, nämlich einerseits die Beharrlichkeit Dinge zu verfolgen, bis diese grundlegend verstanden sind und sich nicht durch vermeintlich unwichtige Dinge ablenken zu lassen, und anderseits andere mit seiner Faszination anzustecken.

Den fachlichen Austausch pflegte er bereits in dieser sehr frühen Phase seiner Karriere. Auch hier führe ich eine Aussage seiner Schwester zum Beleg an, Zitat: „sein bester Freund, Domenique R., ist Geologe geworden, auch so ein Steinforscher." Die jugendliche Sammelleidenschaft brachte ihn schließlich zum Mineralogie-Studium an die Westfälische-Wilhelms-Universität Münster. Bereits während seines Studiums erhielt Reinhard B. Neder ein Stipendium des Instituts für Begabtenförderung der Konrad-Adenauer-Stiftung. Nach erfolgreichem Abschluss seines Vordiploms setzte er sein Studium in den USA an der *Arizona State University* in Tempe fort, das er mit dem *„Master of Geology"* abgeschlossen hat. Während dieses Aufenthaltes in den USA wurde auch der Grundstein für seine Forschungstätigkeit auf dem Gebiet der Untersuchung von korrelierten Ordnungs- und Unordnungserscheinungen in Kristallen und der Modell- und Methodenentwicklung zur Beschreibung und Simulation dieser gelegt. Neben seinen wissenschaftlichen Erkenntnissen nahm er aus den USA auch noch ein privates „Souvenir" zurück nach Europa mit. Eines der Ergebnisse schließt, soviel ich erfahren habe, seine Schulausbildung dieses Jahr ab und folgt den Spuren ihres Vaters durch die Aufnahme eines naturwissenschaftlichen Studiums. Auch hier ein Beweis Menschen für die naturwissenschaftlichen Fachgebiete zu begeistern.

Seine Forschungsaktivitäten auf dem Gebiet der Fehlordnungsuntersuchen setzte er durch die Doktorarbeit an der Ludwig-Maximilians-Universität in München in der Arbeitsgruppe von Prof. Fritz Frey in München mit Arbeiten am Forschungsreaktor FRM I fort. Die Arbeit beschäftigte sich mit der temperaturabhängigen Untersuchung von integraler und elastischer

diffuser Neutronenstreuung aufgrund der Defektstruktur in kubisch stabilisierten Zirkonia. Diese Arbeit erhielt den Promotionspreis der Fördergesellschaft der Ludwig-Maximilians-Universität München. Auch hier wurde eine wesentliche persönliche Charaktereigenschaft von Reinhard B. Neder, die Beharrlichkeit und die Geduld in der Verfolgung von wissenschaftlichen Erkenntnissen, deutlich. Die für seine Arbeit notwendige Aufnahme der diffusen Intensitäten eines kleinen Teils des reziproken Raumes der untersuchten Proben an der Forschungs-Neutronenquelle FRM I in Garching dauerte zu diesem Zeitpunkt für eine Temperatur bis zu zwei Monate. An heutigen Neutronenquellen mit moderner Detektortechnik können vergleichbare Datensammlungen im Bereich von Stunden erhalten werden. Man muss allerdings festhalten, dass man sich zu dieser Zeit auch zwei Monate über das Ergebnis klar werden konnte und die weitere Vorgehensweise durchdenken konnte. Die Auswertung und Modellbildung dieser Messungen gestaltete sich zu diesem Zeitpunkt allerdings sehr schwierig. Im Vergleich zu den Einkristall-Verfeinerungsprogrammen basierend auf einem gemittelten Modell waren keine adäquaten Werkzeuge zur Beschreibung und Intensitätsberechnung von Defektstrukturen vorhanden. In dieser Zeit entstand die Grundidee zum Simulationssoftware-Paket DISCUS. Reinhard B. Neder stellte damit ein Werkzeug zur Verfügung, um relativ einfach eine Modellierung von Defektstrukturen vorzunehmen und die Verteilung von Intensitäten abseits der Braggreflexe basierend auf dem Defektmodell zu berechnen. Festgehalten wurden die Möglichkeiten dieses Werkzeugs in der Buchveröffentlichung *„Diffuse Scattering and Defect Structure Simulations: A Cook Book Using the Program DISCUS“*, das er mit seinem langjährigen Mitstreiter Thomas Proffen verfasste und das bei *Oxford University Press* erschien.

Neben den Programmiertätigkeiten war Reinhard B. Neder auch wesentlich an Entwicklungen von experimentellen Aufbauten am FRM I, wie der Steuerelektronik von Diffraktometern und Ofenentwicklungen, beteiligt. Der Doktorarbeit folgte eine Assistentenzeit an der Ludwig-Maximilians-Universität München in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Heinz Schulz, in deren Rahmen er auch seine Habilitationsschrift verfasste. Er beschäftigte sich mit der Realstrukturbestimmung an Mikrometer- und Submikrometerkristallen und trug wesentliche Entwicklungen sowohl auf dem wissenschaftlichen als auch instrumentellen Bereich zu diesen Untersuchungen bei. Erwähnt seien hier auch die wesentliche Beteiligung an den ersten Entwicklungen eines Mikrofokusmessplatzes an der Europäischen Synchrotron-Strahlungsquelle ESRF, die zu Messungen von diffuser Streuung an Kristallen mit unter einem Kubikmikrometer führte. Dies stellte zu dieser Zeit eine nicht selbstverständliche Untersuchung dar. Auch während dieser Zeit führte er die Weiterentwicklung der Simulationssoftware DISCUS weiter fort.

Mit der Berufung als Professor für Kristallstrukturlehre 1997 an den Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallstrukturlehre von Prof. Martin Okrusch an die Julius-Maximilians-Universität Würzburg trat er seine erste akademisch unabhängige Stelle an. Im Jahr 2008 wechselte er an die Universität Erlangen an den Lehrstuhl für Kristallographie und Strukturphysik von Prof. Andreas Magerl im Department für Physik, wo er bis heute als Professor für Kristallographie tätig ist. Schon während seiner Zeit in Würzburg begann Reinhard B. Neder sich mit der Methodik zur strukturellen Beschreibung und Simulation von Nanopartikeln zu beschäftigen. Die Fragestellung der Abgrenzung der Bulkstruktur zur im Nanopartikel verwirklichten strukturellen Anordnung beschäftigt ihn bis heute. Hier sei auch besonders sein Engagement in der Entwicklung von Methoden zur zeitaufgelösten Messungen von polykristallinen Materialien *in operando* an Synchrotronquellen hervorgehoben, deren Realstruktur unter Verwendung der Autokorrelationsfunktion charakterisiert werden.

Hier ergänzen sich seine wissenschaftlichen und seine instrumentellen Fähigkeiten. Dass dieses Engagement auch von der wissenschaftlichen Community anerkannt wird, zeigt ein vor kurzem in *Science* erschienener Artikel zusammen mit seiner Mitarbeiterin zu *„Universal solvent restructuring induced by colloidal nanoparticles“*.

Ich denke, die bisherigen Ausführungen meinerseits machen deutlich, dass mit Reinhard B. Neder ein würdiger Preisträger ausgewählt wurde.

Ich freue mich daher ganz besonders, dass die Deutsche Kristallographische Gesellschaft dich für deine herausragenden wissenschaftlichen Leistungen auf dem Gebiet der fehlgeordneten Strukturen und dein engagiertes Wirken in der kristallographischen Lehre mit der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze auszeichnet.

Klaudia Hradil, Wien

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2015 AN PETER LUGER

© Conventus

Wenn Kristallographen von dem roten Buch sprechen, meinen Sie nicht die Worte des Vorsitzenden Mao Tse-tung, sondern die Erstauflage von *„Modern X-ray Analysis on Single Crystals"* aus der Feder von Peter Luger. Mit diesem Buch hat Peter Luger unzähligen jungen Kristallographen eine Anleitung zur praktischen Kristallstrukturanalyse an die Hand gegeben, ohne dabei auf eine mathematisch fundierte Basis der zugrundeliegenden Theorie zu verzichten. Und genau hierauf gründet sich auch Peter Lugers Herangehen an wissenschaftliche Fragestellungen und die daraus folgenden Antworten, die wir mit der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille, der höchsten Anerkennung unserer Gesellschaft für wissenschaftliche Arbeiten, auszeichnen wollen.

Laut Satzung der DGK soll mit der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille das wissenschaftliche Lebenswerk des Geehrten ausgezeichnet werden. Peter Lugers wissenschaftliches Lebenswerk ist geprägt von seinem mathematisch analytischen Denken und der Bereitschaft die jeweiligen methodischen und instrumentellen Entwicklungen der Kristallographie aufzugreifen und in einer kritischen Betrachtung für seine eigene Forschung originell, erfolgreich und fortschrittsweisend einzusetzen. Ich möchte vor allem „kritische Betrachtung" betonen und komme gleich noch einmal darauf zurück. Durch sein wissenschaftliches Schaffen zieht sich, gleichsam wie ein roter Faden die Begeisterung für die Struktur von Molekülen.

Zu Beginn seiner Karriere und über viele Jahre hat Peter Luger höchst erfolgreich mit Hans Paulsen, dem Hamburger Kohlenhydratchemiker, die Kristallstrukturen zahlreicher Mono- und Disaccharide aufgeklärt und zwar zu einer Zeit, als direkte Methoden weit entfernt waren von der heutigen, vermeintlichen Automatik. Sein Mathematikstudium versetzte ihn in die Lage Algorithmen für die Vektorsuche im Pattersonraum zu entwickeln und die zugehörigen Computerprogramme zu schreiben. Damit gelang es auch Kristallstrukturen mit mehreren kristallographisch unabhängigen Zuckermolekülen aufzuklären. Der systematische

Vergleich der Konformation von Hexosen und Pentosen, sowie der glykosidischen Bindung war das Ergebnis dieser Bemühungen. Da Peter Luger die Geometrie der kleinen ringförmigen Kohlenwasserstoffe faszinierte, begann er ein weiteres Arbeitsprogramm, dass die Kristallstrukturaufklärung dieser bei Raumtemperatur flüssigen, teilweise sogar gasförmigen Moleküle zum Inhalt hatte. Dazu musste er eine Tieftemperaturanlage zur Kristallzucht auf dem Diffraktometer aufbauen, ein damals keinesfalls triviales Unterfangen. Viele, gelegentlich sich den Kristallisationsbemühungen heftig widersetzende Molekülstrukturen kleiner gespannter Ringe wurden so aufgeklärt. Unter anderem auch die Kristallstruktur von Cyclobutan, an deren Bestimmung ich direkt beteiligt war. Es handelt sich um die einzige Kristallstruktur meines Lebens, bei der ich eine ganze Nacht neben dem Tele-Type-Terminal gesessen habe und den Ausdruck jedes einzelnen Reflexes gespannt verfolgt habe, da unser mühsam aus der Gasphase gezüchteter Kristall durch Sublimation langsam immer kleiner wurde. Im Morgengrauen hatten wir dann einen einfachen Datensatz und der Kristall war verschwunden.

Mitte der achtziger Jahre des vergangenen Jahrhunderts begann Peter Luger dann sein Interesse an Molekülstrukturen über deren reine Geometrie hinaus auszuweiten. Die experimentelle Elektronendichtebestimmung prägt seit dieser Zeit sein wissenschaftliches Schaffen. Dass Bullvalen, ein mehrgliedriger ringförmiger Kohlenwasserstoff mit einem stark gespannten Dreiring wurde intensiv untersucht. Die klassische X-N-Methode erforderte Neutronendiffraktometrie, um die thermische Bewegung der Atome unabhängig von den Bindungselektronen zu bestimmen und um die Positionen der Wasserstoffatome mit hoher Präzision zu bestimmen. Auf dem heimischen Diffraktometer konnten die Kristalle aber nur bis zur Temperatur des flüssigen Stickstoffs abgekühlt werden, während die Neutronenmessungen bei 20 K und darunter möglich waren. Infolgedessen wiesen die leichten Atome in den vergleichsweise großen Molekülen sehr viel kleinere anisotrope Auslenkungsparameter auf. Peter Luger baute ein Diffraktometer mit Heliumkryostat und konnte nunmehr auch in seinem Labor die nötigen tiefen Temperaturen bei der Röntgenbeugung erreichen. Zur gleichen Zeit begann er auch erste Experimente mit Synchrotronstrahlung am HASYLAB in Hamburg. Organische Molekülverbindungen waren bis dahin in Hamburg nicht intensiv untersucht worden. Die hohe Intensität der Synchrotronstrahlung und die geringe Divergenz waren für die teilweise winzigen Kristalle der neuen amphiphilen synthetischen Membranbildner des Sonderforschungsbereiches „Gerichtete Membranprozesse“ von unschätzbarem Wert. Peter Luger sah jedoch das Potential Tieftemperaturkristallographie und Elektronendichtebestimmung mit Synchrotronstrahlung zu kombinieren und so wurde die Umbauphase des Speicherrings DORIS genutzt, um das geplante Diffraktometer am Strahlrohr D3 für die Aufnahme eines geschlossenen Helium-Kryostaten auszurüsten. Währenddessen wurde in der Arbeitsgruppe von Peter Luger die Entwicklung des Programmpakets XD in einer internationalen Kooperation begonnen. Es spricht für die Bescheidenheit und Integrität von Peter Luger, dass er, da er selbst keine Zeit hatte selber Programmteile für XD zu schreiben, auf die Aufnahme in die Autorenliste von XD verzichtete.

Mit dem Aufkommen der Flächenzähler begann ein weiterer wichtiger Abschnitt für die wissenschaftliche Arbeit von Peter Luger. Sowohl an seinem Tieftemperaturdiffraktometer im eigenen Labor als auch an Synchrotronquellen hat er diese neue Technologie nach kritischer Prüfung konsequent für die Elektronendichtebestimmung eingesetzt. Eine Pionierarbeit in *Science* und der spätere Einsatz der eigens modifizierten Proteinbeamline an der *Swiss Light Source* für minutenschnelle Erfassung ganzer Datensätze belegen dies eindrucksvoll. Die experimentellen Elektronendichteuntersuchungen hat Peter Luger schon frühzeitig mit den Ergebnissen aus *Ab-initio*-Rechnungen korreliert. Während zunächst Differenzelektronendichtekarten einander gegenübergestellt wurden, konnten später mittels topologischer

Analysen auch numerische Vergleiche durchgeführt werden. Ich habe eingangs auf die für Peter Luger typische kritische Betrachtung neuer Entwicklungen hingewiesen und möchte hierzu ein Gespräch, das während eines unserer gemeinsamen Mittagessen stattfand und das mir auch für meine eigene wissenschaftliche Arbeit im Gedächtnis geblieben ist, wiedergeben. Zurückgekehrt von einer Gordon-Konferenz zum Thema „Elektronendichte und chemische Bindung“, berichtete ich über Richard Baders Ansatz die Elektronendichte von Molekülen, die er aus *Ab-initio*-Rechnungen erhielt, mittels des Gradienten und der Krümmung der Elektronendichte in atomare Anteile zu zerlegen und über bindungskritische Punkte die Eigenschaften der chemischen Bindungen zu charakterisieren. Meine große Euphorie über die neue Methode und ihre Anwendungsmöglichkeiten für experimentelle Elektronendichten wurde von Peter Luger mit der zutreffenden Bemerkung, dass bei der Bildung der zweiten Ableitung der Elektronendichte die Messfehler, die experimentellen Daten inhärent sind, potenziert würden, zunächst einmal gedämpft. Dieses kritische Hinterfragen, schätze ich bei Peter Luger besonders.

Zahlreiche Arbeiten an biologisch relevanten Molekülen sind dann unter Verwendung von Baders „Atoms-in-Molecules“-Theorie auf diese Weise in Peter Lugers Arbeitskreis entstanden. Für Peter Luger vielleicht nur eine logische Fortführung seiner Ideen, für die Kristallstrukturanalyse und Elektronendichtebestimmung größerer Moleküle hingegen von besonderem Wert ist die Entwicklung des Invariom-Modells. Mit diesem Ansatz gelingt es, die Anzahl der Variablen einer Multipolverfeinerung soweit zu reduzieren, dass auch weniger hochaufgelöste Datensätze für eine sinnvolle Elektronendichtebestimmung nutzbar werden.

Auch nach seiner Emeritierung ist Peter Luger weiterhin aktiv und der Kreis schließt sich, denn im letzten Jahr ist sein vollständig überarbeitetes Lehrbuch neu aufgelegt worden, dem Geist der Zeit entsprechend allerdings nicht mehr knallrot sondern in dezenten Blautönen.

Christian W. Lehmann, Mülheim an der Ruhr

HANS WONDRATSCHEK

07.03.1925 – 26.10.2014

Prof. Dr. Hans Wondratschek verstarb am 26. Oktober 2014, kurz vor seinem 90. Geburtstag, in der Stadt seines Wirkens, Karlsruhe. Prof. Wondratschek war einer der eminentesten Forscher auf dem Gebiet der mathematischen Kristallographie, mit herausragenden Arbeiten zu vierdimensionalen Symmetrien und zu den Untergruppen der dreidimensionalen Raumgruppen. Er trug wesentlich zu den *International Tables of Crystallography A* und *A1* bei und beteiligte sich aktiv an der neuesten, der 6. Auflage des *Volume A*, die in Kürze erscheinen wird.

Hans Wondratschek erblickte am 7. März 1925 in Bonn das Licht der Welt. Er genoss dort seine Schulausbildung und begann seine Studien in den Fächern Mathematik und Chemie. Für seine Dissertation wendete er sich dem Gebiet der Mineralogie und Kristallographie zu und promovierte 1953 zum Thema „Über die tensoriellen Eigenschaften symmetrischer Körper“ bei Will Kleber in Bonn. Diese Arbeit offenbarte bereits seine Begabung für die mathematische Behandlung kristallographischer Probleme, doch in den Folgejahren beschäftigte sich Hans Wondratschek mit experimentellen mineralogischen Themen. Noch in Bonn begann er mit Untersuchungen seiner innig geliebten Sanidin-Kristalle von Volkesfeld in der südlichen Vulkaneifel, denen er sich lebenslang wissenschaftlich begeistert hingab. Nach seiner Dissertation ging Hans Wondratschek an das Max-Planck-Institut für Silikatforschung in Würzburg zu Heinz Jagodzinski. Dort entstanden 1953–1958 zusammen mit Ludwig Merker Arbeiten über neue Verbindungen mit Apatit-Struktur. Es folgten drei Jahre (1958–1961) im Labor von Fritz Laves am Institut für Kristallographie und Petrographie der ETH Zürich. Mit Georg O. Brunner arbeitete Hans Wondratschek dort über die Infrarot-Absorption von Feldspäten und Quarz. Mit Alfred Niggli entwickelte er die „Kryptosymmetrien“, eine Verallgemeinerung der Punktgruppen. Im Jahr 1961 kehrte Hans Wondratschek zurück nach Bonn zu Alfred Neuhaus, wo er seine *venia legendi* für Mineralogie und Kristallographie mit einer Habilitationsschrift über Pyromorphite erhielt. Danach ging er als Privatdozent nach Freiburg im Breisgau.

Im Jahr 1964 erhielt Hans Wondratschek den Ruf auf den Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallographie an die Universität Karlsruhe (TH) und nahm ihn an. In Karlsruhe wirkte er bis zur Emeritierung im Jahr 1991 und darüber hinaus, denn bis wenige Monate vor seinem Tod blieb er aktiv in der Forschung und als Autor. In der Karlsruher Zeit manifestierten sich seine Erfolge in der theoretischen Kristallographie mit vielfältigen Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften und Büchern. Mit die wichtigsten Kooperationspartner fand Hans Wondratschek dabei in einer Gruppe von Mathematikern in Aachen unter Joachim Neubüser. Die zahlreichen aus dieser Kooperation entsprungenen Arbeiten beschäftigten sich mit der Struktur der Raumgruppen und vornehmlich mit der Ableitung der 4894 vierdimensionalen Raumgruppen. Diese Forschung kulminierte in der Monographie „Crystallographic Groups of Four-Dimensional Space“ von Brown, Bülow, Neubüser, Wondratschek & Zassenhaus (1978), sechs Jahre vor Entdeckung der Quasikristalle, für die die Kristallographie die Beschränkung auf drei räumliche Dimensionen endgültig sprengen sollte. Im März 1981 richtete Hans Wondratschek die 21. Jahrestagung der AGKr (Arbeitsgemeinschaft Kristallographie, neben der Vereinigung für Kristallographie eine der beiden Vorgängerorganisationen der DGK) in Karlsruhe aus, auf der ein Symposium mit großer internationaler Beteiligung den damals aktuellen Stand der theoretischen Kristallographie beleuchtete.

Hans Wondratschek trug wesentlich zu den *International Tables of Crystallography* bei. Für den *Volume A*, dessen erste Ausgabe 1983 erschien, schrieb er das grundlegende Kapitel 8 *„Introduction to Space Group Symmetry“*, und brachte zahlreiche Beiträge zu den Tabellen der Raumgruppen. Die fünfte Ausgabe erschien 2002, und in einer engen Zusammenarbeit mit Mois Aroyo (Bilbao) arbeitete er an der sechsten Ausgabe, die in Kürze erhältlich sein wird. Zum *Volume B* trugen Hans Wondratschek und Mois Aroyo 2001 das Kapitel *„Crystallographic viewpoints in the classification of space-group representations“* bei. Forschung über die Untergruppen der Raumgruppen sowie die *Crystallographic Orbits* führten 2004 zum Band A1 *„Symmetry Relations between Space Groups“* (zusammen mit Ulrich Müller), deren 2. Ausgabe 2010 erschien.

Hans Wondratschek erhielt viele Auszeichnungen: Den Viktor-Moritz-Goldschmidt-Preis der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (1981), die F.-Becke-Medaille der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (1987) und 2001 die Carl-Hermann-Medaille der DGK. Seit 1989 war Hans Wondratschek Mitglied der Akademie der Wissenschaften Leopoldina in Halle an der Saale.

Er war ein sehr aktiver, enthusiastischer und sehr angesehener akademischer Lehrer sowohl im nationalen als auch internationalen Wirkungsbereich. Dazu trugen nicht zuletzt 15 internationale Sommerschulen über kristallographische Symmetrie und Raumgruppen bei, davon eine in China und viele nach 1989 in osteuropäischen Ländern. Eine Schule in Sofia führte zur Publikation des Buches *„Symmetry of Crystals“* (1994) von Theo Hahn und Hans Wondratschek.

Hans Wondratschek war ein kreativer Wissenschaftler von hohem internationalem Ansehen. Wir alle – Kollegen, Studenten und Freunde – werden ihn sehr vermissen. Für viele von uns war er jahrzehntelang Vorbild oder Begleiter, als stets hilfsbereiter Lehrer, Ratgeber, Diskussionspartner oder Gutachter. Er hinterlässt seine Schwester Riele Thees, seine zwei Söhne – Klaus Wondratschek und Axel Warnicke –, sowie drei Enkel – Paula Wondratschek und Frank & Daniel Warnicke –, denen wir unsere Anteilnahme aussprechen.

Theo Hahn (Aachen),
übersetzt aus dem Englischen [Acta Cryst. A71 (2015) 253–254] von Wolfgang Schmahl

Erich F. Paulus

09.10.1937 – 16.01.2015

Prof. Dr. Erich F. Paulus ist am 16. Januar 2015 im Alter von 77 Jahren von uns gegangen. Er war bis zu seiner Pensionierung der Leiter der Gruppe für Röntgenstrukturanalyse der Hoechst AG, und anschließend Honorarprofessor an der Goethe-Universität in Frankfurt.

Erich Paulus wurde am 09.10.1937 in Franken auf einem Bauernhof bei Neustadt an der Aisch geboren. Nach dem Abitur begann er sein Chemie-Studium in Erlangen, wechselte aber bald an die Ludwig-Maximilians-Universität München. Zu seinen akademischen Lehrern gehörten Walter Hoppe, Heinz Peter Fritz und vor allem Ernst Otto Fischer, der 1973 den Chemie-Nobelpreis erhielt. Dem Einfluss dieser Lehrer ist es zuzuschreiben, dass sich Erich Paulus schon früh der Röntgenstrukturanalyse widmete, und später über 50 Jahre lang Einkristallstrukturanalysen durchführte.

Erich Paulus promovierte 1965 über die Röntgenstrukturanalyse von Kobalt- und Rhodium-Cyclooctatetraen-Komplexen; die Strukturen mit jeweils sechs symmetrieunabhängigen Schweratomen konnte er mit großem Aufwand durch Pattersonsynthese lösen. Anschließend ging er, zusammen mit seiner frisch angetrauten Gattin Sabine, für ein Jahr als Post-Doc zu O. S. Mills an die Universität Manchester und forschte dort weiter auf seinem Arbeitsgebiet. Nach seiner Rückkehr nach München arbeitete er ein weiteres Jahr als Post-Doc in den Arbeitskreisen von W. Hoppe, H. P. Fritz und E. O. Fischer.

Die Hoechst AG, die stets an den aktuellen wissenschaftlichen Entwicklungen interessiert war, hatte bereits Mitte der 60er Jahre Aufträge zur Röntgenstrukturanalyse von Kristallen nach extern vergeben. Dann erkannte man, dass eigene Aktivitäten erforderlich waren; und so wurde Erich Paulus am 01.09.1967 bei der Hoechst AG eingestellt. Er kam in die Abteilung „Angewandte Physik“. Diese Abteilung stand unter der Leitung von Prof. Leopold Küchler, der als Mitautor des 5-bändigen Werkes über Chemische Technologie („Winnacker-Küchler“) bekannt geworden ist.

Das erste Diffraktometer von Erich Paulus war ein „Automatisches Einkristall-Diffraktometer“ (AED) der Bauart von Walter Hoppe. Es wurde von einem PDP8-Computer gesteuert, der die Messergebnisse auf Papierstreifen lochte, die dann waschkörbeweise zum Großrechner (Siemens 4004-46) gebracht wurden. Für die Auswertung der gemessenen Röntgenbeugungsdaten gab es damals kaum Computerprogramme; Herr Paulus entwickelte daher, zusammen mit dem begabten Hoechster Mathematiker Dieter Kobelt, ein eigenes Programmsystem zur Lösung und Verfeinerung von Kristallstrukturen. Erst Anfang der 80er Jahre wurde dieses Programmsystem durch die SHELX-Programme von George Sheldrick ersetzt. Erich Paulus pflegte seitdem eine gute Freundschaft zu George Sheldrick.

Die Arbeiten des Labors von Erich Paulus beschränkten sich nicht nur auf Einkristallstrukturanalyse, sondern umfassten auch die Kristallzüchtung, und die – weniger spektakuläre, aber sehr nützliche und gefragte – Röntgenpulverdiffraktometrie, zur Phasenbestimmung u. a. von Keramiken, Kunstdüngern, Hochtemperatursupraleitern, organischen Pigmenten und pharmazeutischen Wirkstoffen. In manchen Jahren wurden über 2000 Röntgenpulverdiagramme aufgenommen und interpretiert. Das Labor war stets nach dem aktuellen Stand der Technik ausgerüstet. Auch auf der Einkristallseite wurde immer gemäß dem Stand der Technik „aufgerüstet“. Beispielsweise war Herr Paulus 1993 der erste, der ein funktionsfähiges Siemens-Diffraktometer mit Drehanode und CCD-Flächenzähler betrieb.

Die wissenschaftlichen Arbeiten fanden innerhalb der Hoechst AG hohe Anerkennung. Dies zeigt sich u. a. darin, dass auf der Titelseite des Geschäftsberichts der Hoechst AG 1980 ein handgefertigtes Kristallstrukturmodell aus dem Labor von Erich Paulus abgebildet war. Dieser Wertschätzung mag es zu verdanken sein, dass Erich Paulus es schaffte, sein Labor durch alle Umorganisationen und Wirrungen der Hoechst AG und ihrer Nachfolgefirmen hindurch zu manövrieren. Der wissenschaftliche Anspruch von Herrn Paulus stieß allerdings in den 90er Jahren bei den Führungsetagen der Hoechst AG und ihrer Nachfolgefirmen, die nur den „Shareholder Value“ (Aktienkurs) im Blick hatten, immer weniger auf Gegenliebe, und so wurde Erich Paulus Ende 1998 pensioniert.

Seit den 70er Jahren hat Erich Paulus – damals mit wohlwollender Zustimmung der Hoechst AG – mit dem kristallographischen Institut der Universität Frankfurt zusammengearbeitet; seit 1983 hatte er dort einen Lehrauftrag. Auch mit anderen Wissenschaftlern innerhalb und außerhalb der Hoechst AG hat er gerne kooperiert und er war stets für wissenschaftliche Fragestellungen offen. Sein Motto lautete: „Unsere Aufgabe ist es, den Kollegen zu helfen.“ Seinen Vorgesetzten hat er oft seine Meinung offen gesagt, aber gegenüber seinen Mitarbeitern war er selbstlos, hilfsbereit und fürsorgend.

Im Jahr 2000 wurde Erich Paulus vom Fachbereich Geowissenschaften der Goethe-Universität Frankfurt wegen seiner wissenschaftlichen Verdienste zum Honorarprofessor ernannt. Bis fast zu seinem Tode arbeitete er regelmäßig an seinem Schreibtisch im Institut für Mineralogie und Kristallographie in Frankfurt-Rietberg. Von den über 200 Veröffentlichungen, die Erich Paulus geschrieben hatte, entstanden über 50 nach seiner Pensionierung.

Erich Paulus war von 1992 bis 2000 Vorsitzender des GDCh-Arbeitskreises KSAM (Kristallstrukturanalyse von Molekülverbindungen), der heute als ChemKrist (Chemische Kristallographie) firmiert.

Abgesehen von seiner Leidenschaft, der Kristallographie, befasste sich Erich Paulus mit Philosophie, Religion, Musik, Literatur und Kunst. Häufig unternahm er zusammen mit seiner Frau Sabine weite Fahrten zu Kunstausstellungen. Außerdem kümmerte er sich mit viel Liebe um seine Enkel.

Am 16. Januar 2015 ist er nach kurzer schwerer Krankheit gestorben. Er hinterlässt eine Frau und zwei Kinder.

Wir verlieren mit ihm einen begeisterten Kristallographen, einen Wissenschaftler, der immer ein offenes Ohr für seine Kollegen hatte, und einen gutmütigen, fürsorglichen und liebevollen Menschen.

Martin U. Schmidt, Goethe-Universität Frankfurt

Ankündigungen

Fachgebiet Kristallographie Univ. Bremen

Prof. Dr. Reinhard X. Fischer (Geowissenschaften)
Prof. Dr. Thorsten M. Gesing (Chemie)

Ausstellungskonzept und Organisation

Khalid Bin Mahbub, Johannes Birkenstock, Manfred Burianek, Reinhard X. Fischer, Hanka Medová, Thomas Messner, Iris Spieß, Tianyi Wu, Alessio Zandonà

Veranstalter

Universität Bremen, Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, Haus der Wissenschaft Bremen

Finanzielle Unterstützung

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, Haus der Wissenschaft Bremen, Sparkasse Bremen, Universität Bremen, Wolfgang-Ritter-Stiftung

Leihgaben

Ralf Bätzel (Univ. Bremen), BEGO Bremer Goldschlägerei, Dr. Manfred Burianek (Univ. Bremen), Eric Clark (Florida State University), The M.C. Escher Company (Baarn, NL), Prof. Dr. Juan Manuel García-Ruiz (CSIC-Universidad de Granada), Dr. Kristin Gratz (PANalytical GmbH, Kassel), Prof. Dr. Kirsten I. Grimm (Univ. Mainz), Häberlein und Mauerer AG (München), Prof. Dr. Wolfgang Hofmeister (Univ. Mainz), Dr. Rolf Hollerbach (Universität zu Köln), Martha Santana Ibáñez (Triana Science & Technology, Granada), Dr. Olaf Medenbach (Univ. Bochum), Dr. Goetz Meisterernst (Siltronic AG, Burghausen), Prof. Dr. Manfred Mühlberg (Berlin), Vijay V. Parsi Sreenivas (BIAS, Univ. Bremen), Dr. Christian Reimann (Fraunhofer-Institut IISB, Erlangen), Dr. Hans-Peter Schertl (Univ. Bochum), Prof. Dr. Jochen Schlüter (Univ. Hamburg), Swarovski Deutschland, Dr. Reinhard Uecker (Leibniz-Institut für Kristallzüchtung, Berlin)

Logo Gestaltung

Lara Feldermann (Universität Bremen)

KRIMI

Die faszinierende Welt der Kristalle, Minerale, Materialien und historischen Instrumente.

Freier Eintritt

Haus der Wissenschaft, Sandstraße 4/5, 28195 Bremen
2. Juli 2015 (Eröffnung 17 Uhr) bis 12. September 2015
Mo – Fr 10-19 Uhr, Sa 10-14 Uhr

Texture School @ CZM

Clausthal-Zellerfeld

29th September – 1st October, 2015

TEXMAT
Texture Analysis on Materials Science
IWW – TU Clausthal
Prof. H.-G. Brokmeier

September 29, 2015

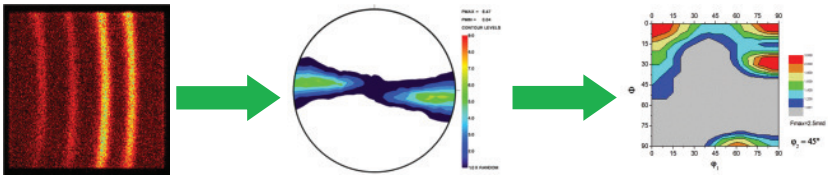
From Area Detector pictures to pole figures

September 30, 2015

Interpretation of pole figures

October 01, 2015

Interpretation of the orientation distribution function



For registration

Email: heinz-guenter.brokmeier@tu-clausthal.de

FAX: 49(0) 4152 872666.

Course fee: 300 € (Academic), 600 € (Industry)

(@eventfotografen.ch)

http://ecm30.ecanews.org

ECM-30 will be a four-day vibrant and intensive scientific meeting held between **August 28 and September 1, 2016 in Basel**, **Switzerland** and will provide many learning opportunities in every current aspect of crystallography.

In addition, there will be a Young Crystallographers meeting, workshops and user meetings, lunch meetings, and a social program, which will allow scientists from all over Europe and the world to meet, connect and exchange. Besides the satellite meetings, a visit to the free electron laser SwissFEL is planned.

Basel is a welcoming, active and enterprising city of open minded citizens who excel in business as well as in the arts. The famous Basel mathematicians Bernoulli and Euler are of course known to many of you. In addition to the architecturally interesting campuses of some leading pharmaceutical and chemical enterprises, world-renowned museums, like the Beyeler, the Vitra Design or the Tinguely museum with its modern architecture, are ready to welcome you.

The conference is located close to the Basel exhibition area, in the triangle between Switzerland, France and Germany. Within a 30 minute ride on public transportation, more than 1000 hotel rooms are available in Basel, St. Louis (France) or Weil am Rhein (Germany). It is well connected to Europe by car, by plane (Basel-Mulhouse-Freiburg Euroairport hosts many low cost carriers) and has frequent train connections to Germany, France, Italy and Austria.

We look forward to welcoming you to Basel in 2016!

Katharina M. Fromm
University of Fribourg

Jürg Schefer
Paul Scherrer Institute

EINLADUNG ZUR TEILNAHME UND BEITRAGSEINREICHUNG

ZEIT-, TEMPERATUR- UND ORTSAUFGELÖSTE RÖNTGEN-PULVER-DIFFRAKTOMETRIE (XII)

19.–20. NOVEMBER 2015

FRAUNHOFER ICT, PFINZTAL

Die zeit-, temperatur- und ortsaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie in Kombination mit neuen Auswerteverfahren hat sich als eine sehr effektive und weitreichende Methode in Forschung und Technik etabliert. Neue Entwicklungen bei Röntgenoptiken und Detektoren sowie der Kombination mit anderen Analyseverfahren (DSC, Spektroskopie etc.) eröffnen immer wieder neue Möglichkeiten der Anwendung. Zeitabhängige Serien von Röntgenbeugungsdiagrammen ermöglichen unter Verwendung geeigneter Modelle die beobachteten Vorgänge mathematisch zu beschreiben und die kinetischen Parameter zu bestimmen. Mikrofokusoptiken ermöglichen es Proben abzuscannen und so die räumliche Verteilung der detektierten Substanzen zu ermitteln.

Um eine deutschsprachige Plattform für Information, Austausch und Diskussion im Bereich der Röntgen-Pulver-Diffraktometrie anzubieten, veranstaltet die Arbeitsgruppe für Angewandte Röntgenbeugung am Fraunhofer ICT in Zusammenarbeit mit dem Forschungsbereich der Angewandten Mineralogie der Universität Tübingen sowie dem Arbeitskreis Pulverdiffraktometrie (AK 13) der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie DGK und der Gesellschaft für Thermische Analyse GEFTA den Workshop zur zeit-, temperatur- und ortsaufgelösten Röntgen-Pulver-Diffraktometrie.

Mit der Veranstaltung soll ein Forum für Anwender und Entwickler aus Forschung und aus der Industrie geschaffen werden, das insbesondere breiten Raum für Diskussionen und Erfahrungsaustausch bietet. Hierzu werden Vorträge zu ausgesuchten Themen breiteren Interesses geladen, und es wird um Beiträge der Teilnehmer gebeten. Beiträge können als Vortrag oder Poster aus allen Bereichen der Röntgenbeugung eingereicht werden. Herstellern und Produktentwicklern wird die Möglichkeit geboten, ihre Produkte während des Workshops auszustellen.

Kontakt: Dr. Paul Bernd Kempa
Fraunhofer ICT
Joseph-von-Fraunhofer-Str. 7
76327 Pfinztal
Telefon: 0721-4640-195
Fax: 0721-4640-111
E-Mail: *paul-bernd.kempa@ict.fraunhofer.de*

Die Ankündigung des Workshops und weitere Auskünfte zu Themen, Kontaktadressen, Terminen, Gebühren und Zimmerreservierung finden Sie auf folgender Seite:

http://www.ict.fraunhofer.de/roentgen2015

Max von Laue-Preis 2016

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

auch in diesem Jahr schreibt die DGK wieder den „Max von Laue-Preis“ für herausragende Nachwuchswissenschaftler/innen aus. Ich möchte Sie im Namen des Preiskomitees hiermit herzlich einladen, geeignete Kandidaten vorzuschlagen. Bitte geben Sie diese Ausschreibung auch an Kollegen weiter. Vorschlagsberechtigt ist jedes DGK-Mitglied!

Wir benötigen eine Stellungnahme des Vorschlagenden sowie ausreichende Informationen zur Beurteilung der Kandidatin/des Kandidaten (Lebenslauf, Kopien ausgewählter Arbeiten z. B. Publikationen, Habil-Schriften o. ä.). Bitte schicken Sie die Unterlagen per E-Mail mit dem Betreff „Laue-Preis“ entweder an

Prof. Dr. Susann Schorr
Helmholz-Zentrum Berlin
Abteilung Kristallographie
E-Mail: *susan.schorr@helmholtz-berlin.de*

oder an

Prof. Dr. Thomas Doert
Technische Universität Dresden
Fachrichtung Chemie und Lebensmittelchemie
E-Mail: *thomas.doert@tu-dresden.de*

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen der 24. DGK-Jahrestagung 2016 in Stuttgart statt.

Einsendeschluss: 5. Januar 2016.

Vielen Dank!

Thomas Doert, Dresden

Aufruf zu Nominierungen für Carl-Hermann-Medaille und Will-Kleber-Gedenkmünze 2016

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht die Carl-Hermann-Medaille an herausragende Forscherpersönlichkeiten und die Will-Kleber-Gedenkmünze mit der hervorragende wissenschaftliche Beiträge auf ausgewählten Gebieten der Kristallographie ausgezeichnet werden.

Wir bitten um Nominierungen an die Vorsitzenden der Komitees zur Verleihung der Ehrungen bis zum 15.12.2015.

Carl-Hermann-Medaille

Prof. Dr. Sander van Smaalen
Labor für Kristallographie
Universität Bayreuth
Universitätsstraße 30
95440 Bayreuth

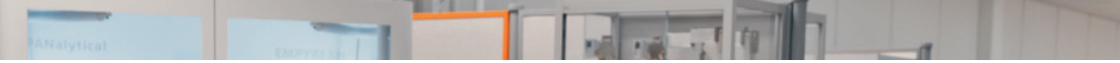
Tel.: 0921-553-886 (881)
Fax: 0921-553-770
E-Mail: *smash@uni-bayreuth.de*

Will-Kleber-Gedenkmünze

Prof. Dr. Georg Roth
Institut für Kristallographie
RWTH Aachen
Jägerstraße 17–19
52056 Aachen

Tel.: 0241-80-96900 (96913)
Fax: 0241-80-92184
E-Mail: *roth@xtal.rwth-aachen.de*

Susan Schorr, Berlin

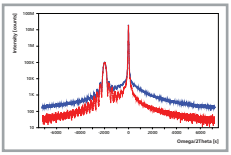


PANalytical
get insight

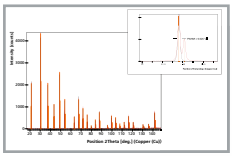
Empyrean

The multipurpose solution for your analytical needs

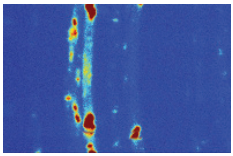
0D



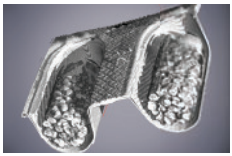
1D



2D



3D



PANalytical GmbH
Nürnberger Str. 113
D-34123 Kassel

T: +49 561 5742 200
F: +49 561 5742 500
info.de@panalytical.com
www.panalytical.com

Tagungen und Termine

September 2015

30.08. – 01.09.2015 **2nd ICSU/IUPAC Workshop on Crystal Engineering** in Como (Italien)

Kontakt: *convinceproject.eu*

30.08. – 03.09.2015 **ESB2015: European Conference on Biomaterials** in Krakau (Polen)

Kontakt: *www.esb2015.org*

30.08. – 04.09.2015 **ECNS2015: 6th European Conference on Neutron Scattering** in Saragossa (Spanien)

Kontakt: *ecns2015.unizar.es*

30.08. – 04.09.2015 **Aperiodic 2015** in Prag (Tschechische Republik)

Kontakt: *crysa.fzu.cz/aperiodic2015*

31.08. – 05.09.2015 **ECS2: 2nd European Crystallography School** in Mieres (Spanien)

Kontakt: *ecs2.ecanews.org*

02.09. – 22.09.2015 **School on Single Crystals of Functional Materials and Their Applications** in Chennai Indien

Kontakt: *www.ssn.edu.in/SERC/DST-SERC%20School%20on%20functional%20materials.htm*

04.09.2015 **Swiss Chemistry Society Fall Meeting** in Lausanne (Schweiz)

Kontakt: *swiss-chem-soc.ch/index.php?option=com_superevents&task=group&view=details&id=2900&lang=en*

05.09. – 08.09.2015 **ESCG: European School on Crystal Growth** in Bologna (Italien)

Kontakt: *escg2015.eccg5.eu*

06.09. – 10.09.2015 **ECMM2015: European Conference on Molecular Magnetism** in Saragossa (Spanien)

Kontakt: *ecmm2015.unizar.es*

06.09. – 18.09.2015 **14th Oxford School on Neutron Scattering** in Oxford (Großbritannien)

Kontakt: *www.oxfordneutronschool.org*

07.09. – 18.09.2015 **19th JCNS Laboratory Course: "Neutron Scattering"** in München

Kontakt: *www.fz-juelich.de/jcns/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/LabCourse/_node.html*

07.09. – 10.09.2015 **6th International Conference of Synchrotron Radiation in Polymer Science** in Madrid (Spanien)

Kontakt: *srps6.com*

08.09. – 11.09.2015 **3rd International GISAS Conference** in Nizza (Frankreich)

Kontakt: *gisas2015.univ-lemans.fr*

09.09. – 11.09.2015 **22nd Meeting of the Brazilian Crystallographic Association and 1st Meeting of the Latin American Crystallographic Association** in São Paulo (Brasilien)

Kontakt: *www.abcristalografia.org.br/evento.php?cod=22ABCr*

Satelliten -Konferenzen:

08.09.2015 **Pre-Congress Workshop: "Powder Diffraction Databases and Applications"**

12.09. – 15.09.2015 **2015 IUCr High-Pressure Workshop**

09.09. – 11.09.2015 **ECMS 2015: 8th European Conference on Mineralogy and Spectroscopy** in Rom (Italien)

Kontakt: *www.ecms2015.eu*

09.09. – 11.09.2015 **ECCG5: 5th European Conference on Crystal Growth** in Bologna (Italien)

Kontakt: *www.eccg5.eu*

13.09. – 17.09.2015 **35th Symposium on Dynamical Properties of Solids** in München

Kontakt: *webapps.frm2.tum.de/indico/conferenceDisplay.py?confId=18*

13.09. – 18.09.2015 **SAS2015: 16th International conference on Small-Angle Scattering** in Berlin

Kontakt: *www.helmholtz-berlin.de/events/sas*

14.09. – 16.09.2015 **FMC2015: Frontiers in Medicinal Chemistry 2015** in Antwerpen (Belgien)

Kontakt: *www.ldorganisation.com/v2/produits.php?langue=English &cle_menus=1238915914&cle_data=1360153416*

14.09. – 18.09.2015 **ICXOM23: 23rd International Congress on X-ray Optics and Microanalysis** in Upton (USA)

Kontakt: *www.bnl.gov/icxom23*

14.09. – 18.09.2015 **PULSE summer school** in Porquerolles (Frankreich)

Kontakt: *pulse-school.sciencesconf.org*

15.09. – 18.09.2015 **2015 E-MRS Fall Conference & Exhibit** in Warschau (Polen)

Kontakt: *http://www.emrs-strasbourg.com/index.php?option=com_content&task=view&id=13&Itemid=1651*

16.09. – 19.09.2015 **13th International Symposium on Biomineralization** in Granada (Spanien)

Kontakt: *granada-en.congresoseci.com/biominXIII*

16.09. – 23.09.2015 **5th International Conference Nanomaterials: "Applications & Properties' 2015"** in Lwiw (Ukraine)

Kontakt: *nap.sumdu.edu.ua*

20.09. – 24.09.2015 **23rd Conference on Applied Crystallography** in Krynica Górska (Polen)

Kontakt: *www.cac.us.edu.pl*

21.09. – 23.09.2015 **2. Workshop des AK20** in Berlin

Kontakt: *dgk-home.de/meetings/workshops*

28.09. – 30.09.2015 **4th International Workshop on Neutron Delivery Systems** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *www.ill.eu/nds2015*

28.09. – 30.09.2015 **Rietveld Refinement & Indexing Workshop** in Newtown Square (USA)

Kontakt: *www.icdd.com/education/rietveld-workshop.htm*

28.09. – 02.10.2015 **ICESS-15: International Conference on Electron Spectroscopy and Structure** in Stony Brook (USA)

Kontakt: *www.stonybrook.edu/commcms/icess/index.html*

28.09. – 03.10.2015 **International Rietveld School Sofia 2015** in Sofia (Bulgarien)

Kontakt: *www.bgcryst.com/RS2015*

Oktober 2015

01.10. – 02.10.2015 **Basic & Advanced Rietveld Refinement & Indexing Workshop** in Newtown Square (USA)

Kontakt: *www.icdd.com/education/rietveld-workshop.htm*

04.10. – 06.10.2015 **Introduction to the Cambridge Structural Database (CSD)** in Frankfurt/Main

Kontakt: *www.anorg.chemie.uni-frankfurt.de/AK_Schmidt/chemkrist2015*

06.10. – 08.10.2015 **Pulverdiffraktometrie für organsche Verbindungen** in Frankfurt/Main

Kontakt: *www.anorg.chemie.uni-frankfurt.de/AK_Schmidt/chemkrist2015*

12.10. – 16.10.2015 **EPM2015: 8th International Conference on Electromagnetic Processing of Materials** in Cannes (Frankreich)

Kontakt: *epm2015.sciencesconf.org*

12.10. – 16.10.2015 **EMBL-EBI-Kurs: "Structural Bioinformatics"** im European Bioinformatics Institute, Hinxton (Großbritannien)

Kontakt: *www.ebi.ac.uk/training/course/structural-bioinformatics*

21.10.2015 **International Workshop on Liquid-Liquid Interfaces** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *www.ill.eu/ilq2015*

25.10. – 29.10.2015 **IUMRS-ICAM2015** in Jeju (Südkorea)

Kontakt: *iumrs-icam2015.org*

26.10. – 03.11.2015 **7th School of the Argentinian Crystallography Association** in La Plata und Buenos Aires (Argentinien)

Kontakt: *www.cristalografia.com.ar*

November 2015

02.11. – 06.11.2015 **EMCMRE-3: 3rd Euro-Mediterranean Conference on Materials and Renewable Energies** in Marrakesch (Marokko)

Kontakt: *www3.emcmre.com*

02.11. – 07.11.2015 **3rd CCP4-OIST school: "From data processing to structure refinement and beyond"** in Okinawa (Japan)

Kontakt: *www.ccp4.ac.uk/schools/OIST-2015*

09.11. – 13.11.2015 **5th Annual Niels Bohr International Academy Workshop on ESS Science: "Condensed Matter Theory and Advanced Software"** in Kopenhagen (Dänemark)

Kontakt: *indico.nbi.ku.dk/conferenceDisplay.py?ovw=True&confId=815*

16.11. – 20.11.2015 **Cristallographie Electronique** in Villeneuve d'Ascq (Frankreich)

Kontakt: *crystelec.univ-lille1.fr*

16.11. – 20.11.2015 **1st African Light Source Conference and Workshop** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *indico.saip.org.za/conferenceDisplay.py?confId=61*

17.11. – 19.11.2015 **In Situ Serial Crystallography Workshop**
am Paul Scherrer Institut in Villingen (Schweiz)

Kontakt: *indico.psi.ch/conferenceDisplay.py?confId=3677*

18.11.2015 **BCA Chemical Crystallography Autumn Group Meeting: "Functional Materials"** in Glasgow (Großbritannien)

Kontakt: *ccg.crystallography.org.uk*

22.11. – 26.11.2015 **IXS 2015: 9th International Conference on Inelastic X-ray Scattering** in Hsinchu (Taiwan)

Kontakt: *ixs2015.conf.tw*

22.11. – 27.11.2015 **Inelastic neutron scattering school** in Lucas Heights (Australien)

Kontakt: *www.ansto.gov.au/Events/Neutronschool/index.htm*

25.11. – 27.11.2015 **AOFSRR 2015 und User Meeting 2015** in Clayton (Australien)

Kontakt: *aofsrr2015.synchrotron.org.au*

29.11. – 04.12.2015 **Materials Research Society 2015 Fall Meeting** in Boston (USA)

Kontakt: *www.mrs.org/fall2015*

Dezember 2015

01.12. – 04.12.2015 **Colloque RX & Matière 2015** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *www.rayonsxetmatiere.org*

05.12. – 08.12.2015 **AsCA2015: The 13th Conference of the Asian Crystallographic Association** in Kolkata (Indien)

Kontakt: *www.asca2015.org*

06.12. – 10.12.2015 **4th Nano Today Conference** in Dubai (VAE)

Kontakt: *www.nanotoday-conference.com*

ECRISLA 2015 in Florianópolis (Brasilien)
07.12. – 11.12.2015 Modul 1: Kristallisation
14.12. – 18.12.2015 Modul 2: Kristallographie

Kontakt: *ecrisla2015.paginas.ufsc.br*

14.12.2015 **NMR Crystallography** in London (Großbritannien)

Kontakt: *www.iop.org/activity/groups/subject/brsg*

Überblick 2016

13.01. – 15.01.2016 **BioXFEL STC: 3rd Annual International Conference** in San Juan (Puerto Rico)

Kontakt: *www.bioxfel.org/events/details/64*

06.03. – 11.03.2016 **80. DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie** in Regensburg

Kontakt: *www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/tagung_2016.html*

09.03. – 11.03.2016 **9th International Workshop on X-ray Radiation Damage to Biological Crystalline Samples** in Lund (Schweden)

Kontakt: *indico.maxlab.lu.se/event/67*

14.03. – 17.03.2016 **24. Jahrestagung der DGK 2016** in Stuttgart

Kontakt: *www.dgk-conference.de*

03.07 – 08.07.2016 **ICCBM-16: 16th International Conference on the Crystallization of Biological Macromolecules** in Prag (Tschechische Republik)

Kontakt: *www.iccbm16.org*

28.08. – 02.09.2016 **EMC2016** in Lyon (Frankreich)

Kontakt: *emc2016.fr*

12.09. – 16.09.2016 **ISMC2016: 4th International Soft Matter Conference** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *www.ismc2016.org*

02.10.2016 **MEDSI2016: Mechanical Engineering Design of Synchrotron Radiation Equipment and Instrumentation** in Barcelona (Spanien)

Kontakt: *indico.cells.es/indico/event/42*

DGK-HOMEPAGE

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

http://dgk-home.de

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

WWW-Redakteur:

Dr. Götz Schuck (goetz.schuck@dgkristall2.de)

DMG-HOMEPAGE

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)

DGKK-HOMEPAGE

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.

Senden Sie diesen Antrag und die folgenden Unterlagen an den Schriftführer der DGK:
Dr. Daniel M. Többens, HZB, Abteilung Kristallographie,
Hahn-Meitner-Platz 1, D-14109 Berlin-Wannsee, Germany.

An die Vorsitzende der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
Frau Prof. Dr. Susan Schorr.

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

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

Name: ..... Vorname(n): .....

Dienstanschrift*: Geburtsdatum: .....

Universität/Firma: .....

Institut/Abteilung: .....

Straße: ..... Ort: ..... PLZ: ..... Land (falls≠D): ……..

Telefon: ..... Fax: .....

Privatanschrift*: E-Mail: .....

Straße: ..... Telefon: .....

Ort: ..... PLZ: ..... Land (falls≠D): .....

* Der Versand erfolgt generell an die Dienstanschrift.
Falls der Versand an die Privatanschrift gewünscht wird, bitte hier ankreuzen: [ ]

Jahresbeitrag:
Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung. Die Bankverbindung der DGK ist: Sparda-Bank Hamburg, IBAN: DE83 2069 0500 0000 6085 99, BIC: GENODEF1S11.

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

Ort, Datum: ..... Unterschrift: .....

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: …….....

BIC: |__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|

IBAN: |__|__|__|__| |__|__|__|__| |__|__|__|__| |__|__|__|__| |__|__|__|__| |__|__|

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 und partiellkristalline Strukturen
AK 5	[ ]	Kristallphysik
AK 6	[ ]	Molekülverbindungen
AK 7	[ ]	Neutronenstreuung
~~AK 8~~		(seit 3/2003 zusammengelegt mit AK 11)
AK 9	[ ]	Theoretische Kristallographie
AK 10	[ ]	Mikroskopie
AK 11	[ ]	Synchrotron-Strahlung und hochauflösende Röntgen-Diffraktometrie, -Reflektometrie und -Topographie
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
AK 20	[ ]	Materialwissenschaftliche Kristallographie
AK 21	[ ]	Junge Kristallographie

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. Das Formular für eine schriftliche Einzugsermächtigung findet sich unter folgender URL:
www.dgk-home.de/wp-content/uploads/2012/06/Aufnahmeantrag_2015.doc

Die Mitgliedsbeiträge für 2015 werden innerhalb von vier Wochen nach Erscheinen dieses Mitteilungsheftes über SEPA-Lastschrift eingezogen. Die Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK lautet DE48ZZZ00001148361. Die Mandatsreferenz lautet DGK-######, wobei ###### für die persönliche Mitgliedsnummer ergänzt durch führende Nullen steht.

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

A	Ordentliche Mitglieder	40 €	
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	15 €	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 Einmalbetrages (ohne weitere zukünftige Beitragszahlungen) von 120 € erwerben.

Die Mitgliedsbeiträge für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. (Steuernummer 27/640/58455) sind mit Steuerbescheid vom 15.08.2012 des Finanzamts für Körperschaften I, Berlin als steuerbegünstigte Zuwendungen anerkannt. Dieser Hinweis, zusammen mit dem Überweisungsbeleg ist für Zuwendungen bis zu einer Höhe von 200 € für die steuerliche Geltendmachung ausreichend.

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 17. März 2015 in Göttingen beschlossen.