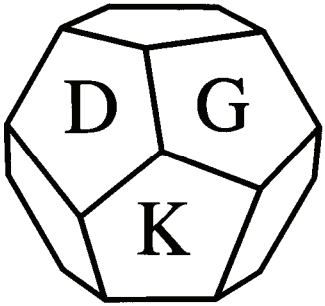
D
G
K



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

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen AXO Dresden, Bruker AXS, Crystal Impact, GE Measurement & Control, Huber Diffraktionstechnik, Incoatec, Jena Bioscience, PANalytical, Rigaku, Röntgenlabor Dr. Ermrich und STOE & Cie.

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, D-09596 Freiberg
Tel.: +49-3731-39-2773, Fax: +49-3731-39-4314
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
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: +49-351-3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

Vorsitzender: Prof. Dr. Wolfgang Schmahl
Ludwig-Maximilians-Universität München, Department für Geo- und Umweltwissenschaften
Theresienstraße 41, D-80333 München
Tel.: +49-89-2180-4313, Fax: +49-89-2180-4334
E-Mail: ***wolfgang.schmahl@lrz.uni-muenchen.de***

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

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

Schatzmeister: Dr. Bernd Müller (bis Oktober 2012)
Prof. Dr. Christian W. Lehmann (kommissarischer Vertreter seit Oktober 2012)
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-45470 Mülheim an der Ruhr
Tel.: +49-208-306-2174, Fax: +49-208-306-2989
E-Mail: ***lehmann@kofo.mpg.de***

Vorsitzender des Nationalkomitees: Prof. Dr. Susan Schorr
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Hahn-Meitner-Platz 1, D-14109 Berlin
Tel.: +49-30-8062-42317, Fax: +49-30-8062-42181
E-Mail: ***susan.schorr@helmholtz-berlin.de***

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

Vertreter der DPG: PD Dr. Leonore Wiehl
Universität Frankfurt, Inst. f. Geowissenschaften, Facheinheit Mineralogie/Kristallographie
Altenhöferalle 1, D-60438 Frankfurt am Main
Tel.: +49-69-79840110, Fax: +49-69-79840109
E-Mail: ***L.Wiehl@kristall.uni-frankfurt.de***

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

Auf ein Wort, liebe Mitglieder der DGK,

dieses Heft der DGK-Mitteilungen enthält unter anderem einen Rückblick und eine Bestandsaufnahme unter der Überschrift „**20 Jahre DGK**“, für deren Zusammenstellung ich Herrn Kollegen Peter Paufler und seinen Mitautoren herzlich danke. Unsere Gesellschaft wurde am **12.03.1991** auf der gemeinsamen Tagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie und der Vereinigung für Kristallographie in München gegründet. Die DGK geht also auf ihren **22.** Geburtstag zu. Die **1.** Jahrestagung war im Juno **1992** in der fröhlichen Stadt Mainz. Im letzten Jahr, im März **2012**, feierten wir auf unserer Jahrestagung in München nicht nur das **100**-jährige Jubiläum der Entdeckung der Röntgenstrahl-Inferenzen durch Laue, Friedrich und Knipping (die eigentlich erst im April so richtig entdeckt hatten), sondern auch, ganz am Rande, die **20.** Jahrestagung der DGK. Auch auf dem **27**. European Crystallographic Meeting im August in Bergen wurden die Röntgenstrahlinterferenzen zünftig zelebriert und ihre Entdecker hochleben lassen. Die DGK hat jungen in Deutschland tätigen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern mit Reisestipendien geholfen, ihre Ergebnisse in Bergen vorzustellen. Im Jahr **2011**, also zum **20**. Geburtstag unserer Gesellschaft, hatte Johannes Keplers kristallographisches Urwerk „Vom sechseckigen Schnee“ bereits seinen **400**. Geburtstag, und vielleicht wegen dieser Quadratzahl feierte sich die DGK selbst nur am Rande. Wie dem auch sei, die Zählung unserer Jahrestagungen ist etwas holprig. Wir hatten **2**-mal in Deutschland das European Crystallographic Meeting: Dresden **1994** und Darmstadt **2010**, und verzichteten jeweils natürlich auf **eine** DGK-Jahrestagung-im-engeren-Sinne. Im weiteren Sinne, in der real existierenden Kristallographie, haben wir dabei aber durchaus getagt (WIR sind die DGK!) und sogar unsere Mitglieder ***de jure*** versammelt. Also wie auch immer man das zählen soll, von den ganzen Ziffern wird einem im hohen Alter schwindlig. Apropos Zahlen, an genau dieser Stelle möchte ich Herrn Kollegen Dr. Bernd Müller herzlichst dafür danken, dass er die DGK über einen weiten Abschnitt ihres jungen Lebens als energischer Schatzmeister mit Rat und Tat voranbrachte. Nach guten **6** Jahren nahm er nun seinen Abschied. Wir wünschen ihm gute Genesung und viele weitere aktive Jahre. Ich danke Prof. Christian Lehmann (Mülheim) für seine Bereitschaft das arbeitsreiche Amt vorübergehend zu führen. Ab und zu soll man ja innehalten und sowohl Standpunkt als auch Gesichtskreis bestimmen. Denn wenn man das nicht tut, weiß man nicht, wo man ist, und kann dann auch nicht wissen, wohin man muss. Deswegen spielt es keine Rolle, wann genau die Gesellschaft das getan hat. Stattgefunden hat es aber **jetzt**, und so können Sie „20 Jahre DGK“ **jetzt** hier lesen, liebe Mitglieder. Also sozusagen zur **21.** Jahrestagung, und das ist ja auch eine super Zahl.

In **2013** freuen wir uns auf diese **21. Jahrestagung**, die zum Frühlingsanfang, vom **19. bis 22. März in Freiberg in Sachsen** stattfindet. Dort gibt es neben frischer Wissenschaft auch die vielleicht schönste Sammlung von Kristallen auf der Welt aus aller Welt zu sehen. Fahren Sie hin, es lohnt sich mehrfach.

Die **ECM28** findet im Vereinigten Königreich an der Universität **Warwick** vom **25. bis 29. August 2013** statt. Auch hierfür lobt die DGK wieder **Reisestipendien für Studierende** aus, die dort substantielle kristallographische Forschungsergebnisse aus ihrer Doktorarbeit vorstellen. Infos und die Liste der erforderlichen Bewerbungsunterlagen werden auf der Webseite ***http://dgk-home.de*** unmittelbar nach der Freiberger 21. DGK-Jahrestagung zu finden sein. Ich bitte dann um zügige Bewerbungen.

Ich wünsche Ihnen gute Gesundheit, Glück und reiche Ernten in 2013 und danach,

Ihr Wolfgang W. Schmahl (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Einladung zur Mitgliederversammlung der DGK 9

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 14.03.2012 in München 11

Anlage zum Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand 21

Anlage zum Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand 24

Anlage zum Bericht des Vertreters der DGK in der DPG 27

Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 30

Kurzberichte der Reisestipendiaten zur ECM27 in Bergen 33

Modernes Kongresswesen – Wissenschaft oder Geschäft? 41

20 Jahre Deutsche Gesellschaft für Kristallographie:

1. Vorwort des Vorsitzenden 47
2. Vom schweren Anfang 48
3. Über das Zusammenwachsen 48
4. Die Arbeitskreise der DGK 55
5. Die Jahrestagungen 58
6. Die Mitglieder 59
7. Die DGK aus der Sicht des Schatzmeisters 63
8. Nationale Vernetzungen 68
9. Vertretung in DFG-Fachgremien 73
10. Internationale Vernetzungen 74
11. Der Privatgelehrte und die DGK oder GRAPH KRISTALLO 79
12. Blick voraus 81
13. Weitere Daten zur Arbeit der DGK 83

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht zum DGK-AK1-Workshop „X-ray Diffraction Data Collection using Synchrotron Radiation“ 91

XXXIII. Arbeitstagung des AK 4 „Nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen“ 94

Bericht des AK6 „Molekülverbindungen“ 97

Workshop zur „Chemical Crystallography“ Beamline P24 an der Petra III-Erweiterung (BMBF-Verbund, AK 6, AK 11) 99

Satellite-Workshop „Neutronenstreuung für Kristallographen“ des AK 7 „Neutronenstreuung“ auf der DGK-Tagung 2012 100

Bericht zum Doktoranden-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ 102

Bericht über die Aktivitäten des AK14 „Computational Crystallography“ 104

Bericht vom AK 16 „Aperiodische Kristalle“ 106

Bericht aus dem AK 18 „Oberflächen und Grenzflächen“ 107

Personalia:

Laudatio zur Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2012 an Tilmann Leisegang 111

Nosce Te Ipso in Silicium 115

Dankesworte anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2012 an Helmuth Zimmermann 120

Walter Borchardt-Ott 122

Heinz Jagodzinski 124

Ankündigungen:

DMG-Doktorandenkurs „Grundlagen und Anwendung der Rietveld-Verfeinerung“ 129

DGK-Jahrestagung 2013 in Freiberg 130

2nd International School on Aperiodic Crystals in Bayreuth 132

Max-von-Laue-Preis 2013 133

Tagungen und Termine 134

Homepages von DGK, DMG und DGKK 143

Aufnahmeformular 144

Arbeitskreise der DGK 145

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 146

EINLADUNG ZUR MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DGK

Die Mitgliederversammlung findet im Rahmen der Jahrestagung 2013 der DGK um 18:00 Uhr, am Mittwoch, dem 20. März 2013, im Audimax der TU Bergakademie Freiberg, Winklerstraße 24, 09599 Freiberg statt.

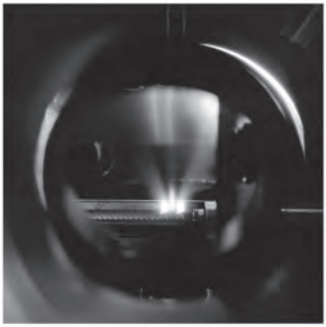
Vorläufige Tagesordnung

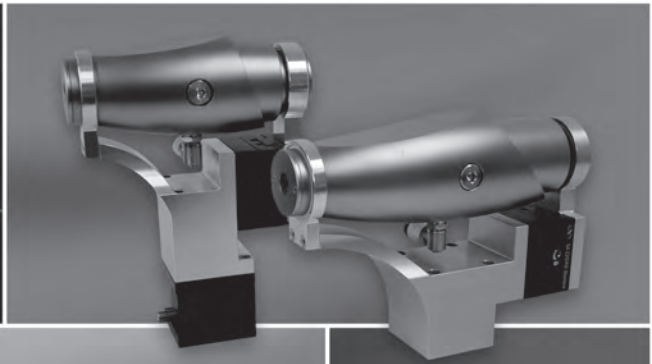
1. Begrüßung der Teilnehmer
2. Feststellung der Beschlussfähigkeit
3. Annahme der Tagesordnung
4. Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 14.03.2012 in München (veröffentlicht in diesem Heft der „Mitteilungen der DGK“)
5. Berichte:
   - 5.1 Bericht des Vorsitzenden
   - 5.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees
   - 5.3 Bericht des Schriftführers
   - 5.4 Bericht des Schatzmeisters
   - 5.5 Bericht der Kassenprüfer
   - 5.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand
   - 5.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand
   - 5.8 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG
   - 5.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen
   - 5.10 Bericht des Redakteurs der Homepage
6. Entlastung des Vorstands
7. Wahlen:
   - 7.1 Nachwahl des Schatzmeisters im Vorstand
   - 7.2 Wahl von Mitgliedern des Komitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze
   - 7.3 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr
8. Beschluss der Beitragsordnung und Spendenaufruf
9. Ehrenmitgliedschaften
10. Arbeitskreise: Neugründungen/Änderungen
11. Stiftung für die Interdisziplinarität der Kristallographie – Namensänderung
12. Ordnung für die Vergabe von Reisestipendien
13. Jahrestagungen 2014 und 2015
14. Sonstiges

Wolfgang Schmahl, Vorsitzender

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)
- Thin film multi-element reference samples for XRF

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

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

AXO

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

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 14.03.2012 IN MÜNCHEN

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der Jahrestagung 2012 der DGK um 18:00 Uhr, am Mittwoch, dem 14. März 2012, im Hörsaal M218 des Hauptgebäudes der Ludwig-Maximilians-Universität, Geschwister-Scholl-Platz 1, 80539 München statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

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

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

- Prof. Dr. Günter Dlubek (Februar 2011)
- Prof. Dr. Richard Wenda (November 2011)
- Dr. Walter Borchardt-Ott (Januar 2012)

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Es sind 79 Mitglieder anwesend. Zur Beschlussfähigkeit müssen mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder der DGK anwesend sein. Die Versammlung ist somit beschlussfähig.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagungsordnung wird mit folgender Änderung einstimmig angenommen. Unter TOP 10 soll über eine Ergänzung der Ordnung zur Durchführung der Jahrestagungen entschieden werden.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 21.09.2011 in Salzburg

Das Protokoll wird – wie in Heft 41 der DGK-Mitteilungen auf Seite 11 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Berichte

5.1 Bericht des Vorsitzenden

Herr Heinemann berichtet über die folgenden Entwicklungen seit der letzten Mitgliederversammlung in Salzburg.

International Union of Crystallography (IUCr): Die Übernahme des Jahresbeitrags der DGK für 2012 in Höhe von 10.000 SFr wurde bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) beantragt. Über den Antrag ist noch nicht entschieden. Die Beitragsrechnung der IUCr kam mit einer weiteren Nachforderung in Höhe von 162,06 SFr für 2011. Eine erste Nachforderung war noch im Vorjahr von der DFG teilweise beglichen worden.

European Crystallographic Association (ECA): Das ECM 27 wird vom 6. bis 11. August 2012 in Bergen stattfinden. Die Frist für *Early Bird Registration* endet am 30. April 2012. Laut Beschluss des Vorstands vom 11.03.2012 wird die DGK bis zu 15 Nachwuchswissenschaftler mit einem Reisestipendium in Höhe von jeweils 400 € für den Besuch des ECM 27 unterstützen. Ein Aufruf zur Antragstellung wird in Kürze auf der Website der DGK veröffentlicht. In Bergen werden der *6th Max Perutz ECA Prize* und der *5th Erwin Felix Lewy Bertaut Prize* der ECA und der ENSA vergeben. Für den Perutz-Preis wurde ein deutscher Kristallograph nominiert. Nominierungen für den Bertaut-Preis sind noch bis zum 31. März 2012 möglich. Die Schweizer Kristallographen werden sich in Bergen um das ECM 30 für Basel bewerben. Die DGK unterstützt diese Bewerbung.

Laue-Jahr: In München wurde das Laue-Jahr 2012 mit einem Laue-Festkolloquium vor Beginn der Jahrestagung der DGK gefeiert. Es gibt einen ersten Kontakt mit dem Röntgen-Museum in Remscheid mit dem Ziel, die Entdeckung der Röntgendiffraktion an Kristallen dort mit Beteiligung der DGK zu präsentieren.

Preise der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie: Auf dem Ehrenabend der DGK wurde Herrn Prof. Helmuth Zimmermann (Erlangen) die Will-Kleber-Gedenkmünze der DGK verliehen. Herr Dr. Tilmann Leisegang (Freiberg) wurde mit dem Max-von-Laue-Preis ausgezeichnet.

Broschüre „Kristallographie in Deutschland“: Laut Beschluss des Vorstands vom 11.03.2012 soll eine grundlegend überarbeitete Neufassung der Broschüre (erste Auflage 2002) bis Ende 2013 fertiggestellt werden. Herr Prof. Bohatý hat sich freundlicherweise bereit erklärt, die Herstellung zu koordinieren.

Dokumentation „DGK 1992–2012“: Die ersten 20 Jahre der DGK sollen in einer Dokumentation zusammengefasst werden. Herr Prof. Paufler hat sich freundlicherweise bereit erklärt, gemeinsam mit dem Schriftführer die Herstellung zu koordinieren.

5.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Herr Heinemann berichtet für Herrn Pietsch, der zur Mitgliederversammlung entschuldigt ist:

Die *International Union of Crystallography* hat ihre Pläne bezüglich eines *International Year of Crystallography* (IYCr) geändert. Es wird jetzt angestrebt, das IYCr im Jahr 2014 zu veranstalten. Das IYCr muss von der Vollversammlung der Vereinten Nationen beschlossen werden. Ein entsprechender Antrag wird von der marokkanischen Vertretung bei den Vereinten Nationen eingereicht. Die DGK unterstützt die Initiative der Vertretung von Marokko mit Schreiben an den Leiter der Ständigen Vertretung Deutschlands bei der UN und den Leiter der Delegation von Marokko bei den Vereinten Nationen.

5.3 Bericht des Schriftführers

Herr Sträter berichtet über die Mitgliederentwicklung der DGK. Im Jahr 2011 gab es 24 Eintritte und 20 Austritte. Die Zahl der Mitglieder beträgt gegenwärtig 1088, darunter 298 Mitglieder mit offenen Beiträgen (Stand 09.03.2012).

5.4 Bericht des Schatzmeisters

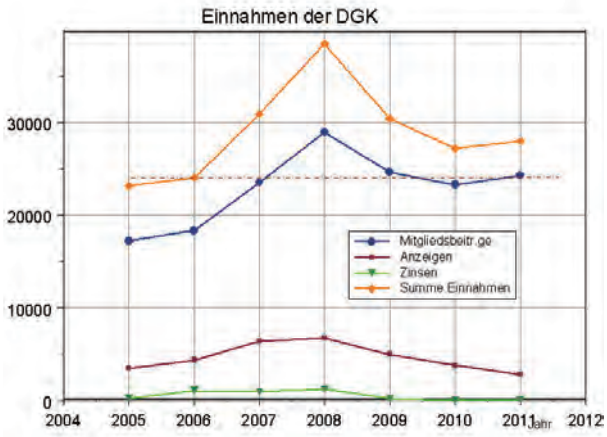
Herr Müller berichtet über die Jahresbilanz der DGK für das Geschäftsjahr 2011 anhand der folgend angeführten Bilanzen.

Einnahmen 2011			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2011	20333,36 €	
	Barzahler 2011	2587,11 €	**24329,64 €**
	Barzahler Nachzahlung	1409,17 €	
Spenden			420,00 €
Zinsen	Girokonto	-0,55 €	147,03 €
	Cashkonto 850	147,58 €	
Rücklagen Dauermitglieder 910	Einzahlung DGK 2011		220,00 €
Falschbuchungen	SpardaBank		0,02 €
Rückzahlung Vorabzahlung	Stiftung Interdis. Kristall. 830		100,00 €
Anzeigen für Mitteilungen			2800,00 €
Summe Einnahmen			**28016,69 €**
Ausgaben 2011			
Mitteilungen			-5192,97 €
Administration	Barzahler, Postgebühren	-157,65 €	
	Stornogebühren	-27,00 €	
	Büromaterial, Kommunikation	-316,23 €	-2751,31 €
Reisekosten & Spesen		-1087,91 €	
Beiträge DGK ECA, DVT		-1162,52 €	
Arbeitskreise	Förderung	-7482,78 €	
	Rückführung	1489,70 €	
Jahrestagung 2011		-4344,20 €	-21668,96 €
Reisestip. IUCr Madrid 2011		-2800,00 €	
Medaillen für Ehrungen		-5031,68 €	
Laue-Tag 2012		-3500,00 €	
Summe Ausgaben			**-29613,24 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2011			
Einnahmen	2 Neue Dauermitglieder	240,00 €	275,07 €
	Zinsen Rücklagekonto 910	35,07 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2011	-220,00 €	-220,00 €
Bilanz 2011			**55,07 €**
Bilanz Ein- und Ausgaben 2011 der DGK			**-1541,48 €**

Kontoführung 2011			
Konto	31.12.2010	31.12.2011	Änderung
Giro	899,39 €	95,26 €	-804,13 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2414,78 €	2469,85 €	55,07 €
DGK-Cash 085	1075,64 €	283,22 €	-792,42 €
Kapital der DGK	**4389,81 €**	**2848,33 €**	**-1541,48 €**

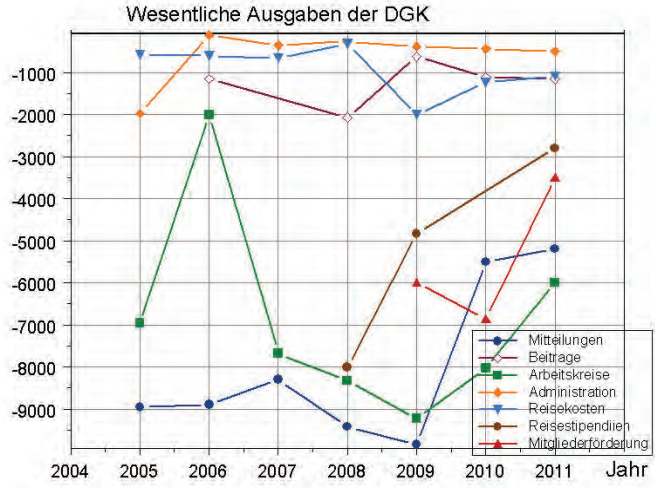
Die DGK hatte im Jahre 2011 insgesamt 28016,69 € eingenommen, davon Einnahmen aus den Mitgliederbeiträgen von 24329,64 €, Zinsen aus den Konten der DGK von 147,58 € und für die Anzeigen in den Mitteilungen von 2800,00 €. Hervorzuheben ist dabei, dass die Einnahmen aus den Mitgliedsbeiträgen, die etwa 87 % der Gesamteinnahmen ausmachen, um ca. 1000 € gegenüber dem Jahr 2010 gestiegen sind. Ausgegeben wurden insgesamt 29613,24 €, d. h. also 1541,48 € mehr als die Einnahmen betragen. Von den Ausgaben entfallen auf die Administration 500,88 € (allein 158 € für die Kosten, mit welchen die Barzahler die DGK unmittelbar belasten), für den Aufwendungsersatz (Reisen u. Ä.) 1087,91 €, für die Mitgliedschaften der DGK in ECA, DVT usw. 1162,52 € sowie für die Mitteilungen der DGK 5192,97 €. Unmittelbar zweckentsprechend zur Förderung von Wissenschaft und Forschung sowie der Lehre wurden 21600 € (87 % der Einnahmen aus Mitgliedsbeiträgen und Zinsen) verwendet: Förderung der Arbeitskreise, Reisestipendien zur IUCr 2011 in Madrid, Medaillen für Ehrungen sowie zur Vorbereitung des Laue-Tags. Zeitnah zur Verwendung bis Ende 2012 stehen somit noch 378,48 € zur Verfügung. Die Kontenstände sind in Übereinstimmung mit den Einnahmen und Ausgaben der DGK im Jahre 2011. Das Rücklagekonto für die Dauermitglieder beträgt 2469,85 €, von diesem wurden entsprechend der Rücklagenkontoordnung 220 € zur Verwendung dem Jahreshaushalt der DGK zugeführt.

Herr Müller zeigte die Entwicklung der Einnahmen und Ausgaben der DGK für die Jahre 2005 bis 2011 anhand der folgenden Grafiken auf.



Für die Einnahmen wies Herr Müller auf die Problematik der geringen Zinsen seit 2009 hin, aber auch auf die Stabilisierung der Mitgliedsbeiträge seit 2009 mit Mehreinnahmen von 6000 € pro Jahr trotz etwa gleicher Mitgliederanzahl. Bei den

Ausgaben zeigt sich eine erfreuliche Zunahme der Aktivitäten der Arbeitskreise bis 2009, die seither aber wieder tendenziell rückläufig sind. Infolge der verbesserten Beitragszahlung konnten Förderungen wie die Vergabe von Reisestipendien sowie die Unterstützung von Jahrestagungen vorgenommen werden.



Im Jahre 2011 konnte wiederum ein Max-von-Laue-Preis vergeben werden (Frau Dr. Alexandra Friedrich, Frankfurt), so dass zum 31.12.2011 ein Betrag von 1152 € für die Preisvergabe 2012 zur Verfügung stand. Dieser Betrag wurde erreicht, weil eine Spende von 730,30 € eingegangen ist. Der Schatzmeister wies darauf hin, dass zukünftig, um die Preisvergabe zu gewährleisten, wohl zu Spenden aufgerufen werden muss (siehe Tabelle Bilanz Laue-Kapital 2011). Herr Müller schlug verschiedene Möglichkeiten vor, wie das Preisgeld für den Max-von-Laue-Preis zukünftig aufgebracht werden kann. Das Kapital beträgt 60000 €, der Zinssatz gegenwärtig 1,1 – 1,4 %. Daraus ergibt sich ein Zinsgewinn von 660 – 840 €, so dass ein Fehlbetrag von 840 – 660 € pro Jahr besteht.

Als Lösungsmöglichkeiten führt er an:

- Die DGK füllt das Preisgeld aus den Mitgliedsbeiträgen auf.
- Es ergeht ein Spendenaufruf an die Mitglieder. Benötigt würden 8 bis 40 Spender mit je 100 € bis 20 €.
- Die DGK akquiriert externe Spender (insbesondere Firmen). Benötigt würden 2 bis 8 Spender mit je 400 € bis 100 €.
- Das Preisgeld würde unter Aufzehrung des Laue-Kapitals aufgebracht. Das Laue-Kapital wird von Zeit zu Zeit durch Spendenaufrufe wieder aufgefüllt.

In einer Diskussion wurde Spenden als optimaler Weg zur Erlangung des Preisgeldes gesehen.

Jahresbilanz 2011 Max-von-Laue-Preis-Stiftung			
Einnahmen 2011			
Zinsen	Laue-Sparbuch 920	22,39 €	877,61 €
	Laue-Kapital 930	855,22 €	
Spende			730,30 €
Summe Einnahmen			**1607,91 €**
Ausgaben 2011			
Laue-Preis 2011	Frau Dr. Alexandra Friedrich, Frankfurt		-1500,00 €
Summe Ausgaben			**-1500,00 €**
Bilanz Ein- und Ausgaben 2011			**107,91 €**
Kontoführung 2011			
Konto	01.01.2011	31.12.2011	Änderung
Laue-Sparbuch 920	802,62 €	297,07 €	-505,55 €
Laue-Kapital 930	60241,76 €	60855,22 €	613,46 €
Kapital der Stiftung	**61044,38 €**	**61152,29 €**	**107,91 €**

Das aktuelle Preisgeld für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie (unselbstständige Stiftung in der Treuhand der DGK) beträgt zum 31.12.2011 nur 512,12 €, so dass der nächste Preis wohl erst im Jahre 2014 verliehen werden kann (siehe Tabelle Bilanz Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2011).

Jahresbilanz 2011 Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie			
Einnahmen 2011			
Zinsen	Sparbuch 830	0,99 €	428,75 €
	Stiftungskapital 870	427,76 €	
Summe Einnahmen			**428,75 €**
Ausgaben 2011			
Rückführung an DGK	Verauslagung Preisgeld 2010		-100,00 €
Summe Ausgaben			**-100,00 €**
Bilanz Ein- und Ausgaben 2011			**328,75 €**
Kontoführung 2011			
Konto	01.01.2011	31.12.2011	Änderung
Stiftungs-Sparbuch 830	9,13 €	84,12 €	74,99 €
Stiftungskapital 870	30174,24 €	30428,00 €	253,76 €
Kapital der Stiftung	**30183,37 €**	**30512,12 €**	**328,75 €**

5.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfung für das Geschäftsjahr 2011 durch Herrn Lehmann und Herrn Schreuer ergab, dass die Kasse fehlerfrei geführt wurde und die Mittel dem Satzungszweck entsprechend ausgegeben wurden.

5.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Herr Bismayer fasst die wichtigsten Punkte seines Berichts auf Seite 21 zusammen.

5.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

Frau Wiehl fasst die wichtigsten Punkte ihres Berichts zusammen (siehe Seite 24).

5.8 Bericht des Vertreters der DGK in der DPG

Herr Braden fasst die wichtigsten Punkte seines auf Seite 27 abgedruckten Berichtes zusammen.

5.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Herr Meyer dankt dem Redaktionskollegium, insbesondere Herrn Stöcker, für seine Arbeit im vergangenen Jahr. Der 30. November ist der Einsendeschluss für die Beiträge für das nächste Heft.

5.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Herr Schuck berichtet, dass ein Content-Management-System für die Webseiten der DGK eingerichtet wurde. Das System soll zunächst zusammen mit Herrn Sträter getestet werden, später mit den Arbeitskreisleitern. Durch das System soll die Einstellung und Aktualisierung der Inhalte des Webauftritts der DGK durch mehrere Personen ermöglicht werden.

6 Entlastung des Vorstands

Herr Lehmann beantragt die Entlastung des Vorstands. Der Vorstand wird ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen für das Geschäftsjahr 2011 entlastet.

7 Wahlen

7.1 Wahl des Vorstands

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

- Vorsitzender: Wolfgang Schmahl (München)
- Stellvertreter: Udo Heinemann (Berlin)
- Schatzmeister: Bernd Müller (Jena)
- Schriftführer: Norbert Sträter (Leipzig)

In geheimer Abstimmung werden die Kandidaten mit folgendem Ergebnis gewählt:

- Herr Schmahl: 75 ja, 5 nein, 2 Enthaltungen
- Herr Heinemann: 80 ja, 0 nein, 1 Enthaltung
- Herr Müller: 78 ja, 1 nein, 1 Enthaltung
- Herr Sträter: 81 ja, 1 nein, 1 Enthaltung.

Herr Heinemann dankt Herrn Neumann (Vorsitz: 2006–2009, stellvertretender Vorsitz: 2009–2012) herzlich für seine Tätigkeit im Vorstand der DGK.

7.2 Nachwahl von Mitgliedern des Nationalkomitees

Das Nationalkomitee besteht aus sechs Mitgliedern, die für sechs Jahre gewählt werden. Eine direkte Wiederwahl ist nicht möglich. Dem Nationalkomitee gehörten in der vergangenen Amtsperiode an: Reinhard X. Fischer (Bremen, bis 2015), Dirk C. Meyer (Freiberg, bis 2015), Ullrich Pietsch (Siegen, Sprecher), Wolfgang Schmahl (München), Manfred S. Weiss (Berlin) und Leonore Wiehl (Frankfurt).

Für die vier neu zu wählenden Mitglieder kandidieren: Birger Dittrich (Göttingen), Ralf Ficner (Göttingen), Holger Meyerheim (Halle), Oliver Oeckler (Leipzig), Susan Schorr (Berlin) und Jürgen Schreuer (Bochum).

In geheimer Abstimmung wurden Frau Schorr (50 Stimmen), Herr Schreuer (49 Stimmen), Herr Ficner (38 Stimmen) und Herr Dittrich (25 Stimmen) in das Nationalkomitee gewählt.

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

Das Preiskomitee für den Max-von-Laue-Preis besteht aus vier Mitgliedern, die für drei Jahre gewählt werden. Eine einmalige Wiederwahl ist zulässig. Dem Komitee gehörten bisher an: Ralf Ficner (Göttingen, keine Wiederwahl möglich), Rainer Hock (Erlangen), Caroline Röhr (Freiburg, Vorsitzende, keine Wiederwahl möglich), Martin U. Schmidt (Frankfurt).

Für die vier zu wählenden Mitglieder kandidieren: Thomas Doert (Dresden), Michael Fechtelkord (Bochum), Peter Gille (München), Reinhard Neder (Erlangen), Martin U. Schmidt (Frankfurt), Manfred S. Weiss (Berlin).

In geheimer Abstimmung werden Herr Neder (63 Stimmen), Herr Weiss (52 Stimmen), Herr Doert (37 Stimmen) und Herr Schmidt (37 Stimmen) in das Preiskomitee gewählt.

7.4 Wahl von Mitgliedern des Komitees für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie

Das Preiskomitee für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie besteht aus drei Mitgliedern, die für drei Jahre gewählt werden. Eine einmalige Wiederwahl ist zulässig. Dem Komitee gehörten bisher an: Wulf Depmeier (Kiel), Yves Muller (Erlangen) und Susan Schorr (Berlin, Vorsitzende).

Eine Wiederwahl ist für alle drei Mitglieder möglich. Herr Heinemann schlägt vor, das bestehende Komitee für eine weitere Wahlperiode zu bestätigen, auch vor dem Hintergrund, dass der Preis aufgrund der gegenwärtigen Niedrigzinslage zurzeit nur alle paar Jahre vergeben werden kann. Dieser Vorschlag findet die Zustimmung der Mitgliederversammlung.

7.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Herr Lehmann und Herr Schreuer werden als Kassenprüfer für das Jahr 2012 bestätigt.

8 Beschluss der Beitragsordnung

Aufgrund der finanziellen Situation der DGK schlägt der Schatzmeister entsprechend der Empfehlung des Vorstandes vor, den Jahresbeitrag 2013 wie bisher zu erheben. Dieser Vorschlag findet die Zustimmung der Mitgliederversammlung. Die aktuelle Beitragsordnung ist am Ende des Heftes abgedruckt.

Es ergeht eine Frage an Herrn Müller bezüglich der Voraussetzungen für die Beitragsermäßigung der Ruhestandsmitglieder. Herr Müller erläutert, dass die Beitragsermäßigung auf Antrag gewährt wird, wenn das Mitglied mindestens 65 Jahre alt ist und nicht mehr in einem aktiven Dienstverhältnis steht.

9 Jahrestagungen 2013 und 2014

Herr Meyer berichtet über den Stand der Vorbereitungen zur DGK-Jahrestagung 2013 in Freiberg, die vom 19. bis 22. März 2013 in der Neuen Mensa stattfinden wird. Die organisatorische Abwicklung erfolgt über Conventus. Die Webseite der Konferenz ist *www.dgk-conference.de*. Freiberg hat etwa 38000 Einwohner. Es wurden 350 Hotelbetten für die Tagung reserviert.

Herr Heinemann berichtet über den Stand der gegenwärtigen Vorbereitungen zur Jahrestagung 2014 in Berlin. Ein Organisationskomitee wird gegenwärtig gebildet, dem Frau Schorr vorstehen soll.

10 Änderung der Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie

Der Vorstand schlägt vor, die Ordnung zur Durchführung der Jahrestagungen der DGK um einen Punkt zu erweitern: „Der Veranstalter achtet auf barrierefreien und ungehinderten Zugang zu allen für die Tagung genutzten Räumlichkeiten.“ Dies soll unter Punkt 11 der Ordnung aufgeführt werden. Diese Änderung der Ordnung wird ohne Gegenstimmen oder Enthaltungen einstimmig angenommen. Die aktualisierte Ordnung zur Durchführung der Jahrestagungen der DGK ist auf Seite 30 abgedruckt.

11 Sonstiges

Herr Neder erkundigt sich auf Nachfrage eines interessierten Anbieters nach dem Bedarf der anwesenden Kristallographen an der Erstellung von Kristallstrukturmodellen. Nach kurzer Diskussion wird vorgeschlagen, das Angebot über die Webseite der DGK bekannt zu machen und so eine Rückmeldung interessierter Mitglieder zu erfragen.

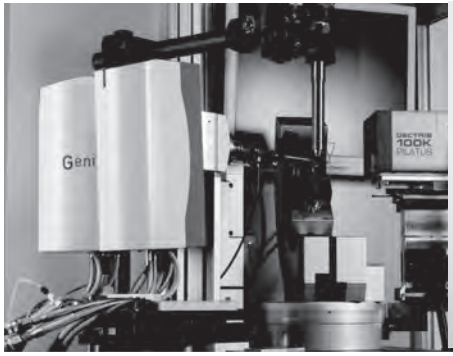
Herr Fischer dankt im Namen aller für die tatkräftige Unterstützung der freiwilligen Wahlhelfer.

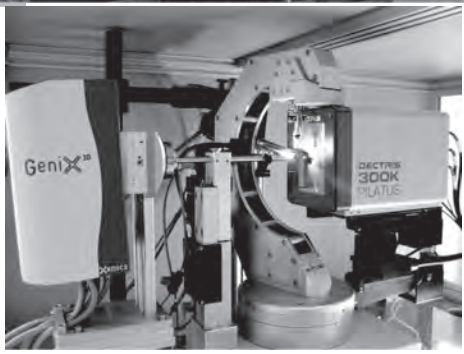
Udo Heinemann
(Vorsitzender)

Norbert Sträter
(Schriftführer)

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

STOE STADI VARI PILATUS





- Four circle goniometer, open Eulerian cradle
- Various sources in Single- and Double Beam Mode
- Ultrafast and sensitive Pixeldetector Pilatus 100K / 300K
- Additional Eulerian cradle with Inverted Phi option
- Fully integrated in the well known STOE X-Area software package

STOE & Cie GmbH P.O.Box 101302 D-64213 Darmstadt
Phone: (+49) 6151 / 98870 Fax: (+49) 6151 / 988788
E-mail: stoe@stoe.com Homepage: http://www.stoe.com

ANLAGE ZUM

BERICHT DES VERTRETERS DER DMG IM VORSTAND

Die vorangegangene DMG-Vorstandssitzung erfolgte am 20.09.2011 in Salzburg, anlässlich der gemeinsamen Jahrestagung der DGK mit der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (ÖMG) und der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG).

Der neue Vorstand der DMG wurde Ende 2011 gewählt und setzt sich zusammen aus:

- Stellvertretende Vorsitzende für 2012 und designierte Vorsitzende für 2013–2014: Astrid Holzheid (holzheid@min.uni-kiel.de)
- Schriftführer: Michael Meyer (m.meyer@rwth-aachen.de)
- Schatzmeister: Jochen Hoefs (jhoefs@gwdg.de)
- Pressereferentin: Heidi Höfer (hoefer@em.uni-frankfurt.de)
- Verbindungsperson zur Deutschen Gesellschaft für Kristallographie: Ulrich Bismayer, (ubis@uni-hamburg.de), Stellvertreter: Carsten Paulmann
- DMG-Redakteur bei Elements: Michael Burchard (Michael.Burchard@geow.uni-heidelberg.de)
- DMG-Redakteur bei GMIT: Klaus-Dieter Grevel (Klaus-Dieter.Grevel@ruhr-uni-bochum.de)
- Redakteur der DMG-Homepage: Dr. Ralf Milke (milke@zedat.fu-berlin.de)
- EJM Chief Editor: Reto Giere (Reto.Giere@minpet.uni-freiburg.de)
- Stellvertretende Sektionsvorsitzende für das Jahr 2010 und damit designierte Vorsitzende für die Periode 2012–2013:
  - Vorsitz der Sektion Chemie, Physik und Krist. der Minerale: Christoph Berthold
  - Vorsitz der Sektion Geochemie: Stefan Jung
  - Vorsitz der Sektion Petrologie und Petrophysik: Harald Behrens
  - Vorsitz der Sektion Angewandte Mineralogie in Technik und Umwelt: Gert H. Klöss
- Beiräte:
  - Dorrit Jacob (für die Periode 2012–2013)
  - Monika Koch-Müller (für die Periode 2013–2014)
- Studentische Mitglieder im Beirat:
  - Adrian Fiege (für die Periode 2012–2013)
  - Christopher Giehl (für die Periode 2013–2014)

Die seit 01.01.2010 angebotene Doppelmitgliedschaft von DMG-GV hat große Attraktivität bei studentischen Neumitgliedern beider Gesellschaften. Über engere Kooperationsstrukturen zwischen DMG und den Geologischen Gesellschaften bis hin zur Zusammenführung denken die Gesellschaften gegenwärtig nach.

2012 werden folgende Doktorandenkurse angeboten:

- Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung (29.05.–01.06.2012), max. 16 Teilnehmer; Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum, Kontakt: Michael Fechtelkord (Michael.Fechtelkord@ruhr-uni-bochum.de)
- High-pressure experimental techniques and applications to the Earth's interior (03.02.–17.02.2012), max. 20 Teilnehmer, Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Kontakt: Stefan Keyssner (stefan.keyssner@uni-bayreuth.de)

- Diffusion in Geological Materials (03.09.–07.09.2012), max. 25 Teilnehmer; Department of Lithospheric Research, University of Vienna, Kontakt: Rainer Abart; (rainer.abart@univie.ac.at)
- Neutronenstreuung für Mineralogen (zweite Hälfte 2012), max. 15–18 Teilnehmer, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Abteilung Kristallographie, Kontakt: Susan Schorr (susan.schorr@helmholtz-berlin.de)
- Texture Analysis with MTEX emphasizing EBSD Data Analysis (2012), Geoscience Mathematics and Informatics, TU Bergakademie Freiberg, Germany, Kontakt: Helmut Schaeben (schaeben@tu-freiberg.de)

Die kommende DMG-Jahrestagung ist integriert in die *European Mineralogical Conference* in Frankfurt 02.–06.09.2012 (Gerhard Brey, Heidi Höfer). Im Folgejahr findet die DMG-Jahrestagung in Tübingen vom 15. bis 19.09.2013 statt (Marcus Nowak, Todd Ehlers).

Ulrich Bismayer, Hamburg

LYNXEYE XE

Energy-Dispersive One-Dimensional Detector for X-ray Diffraction

- **Superb energy resolution**
- **High-speed data acquisition**
- **Best peak-to-background ratio**
- **Operation with all common characteristic X-ray emission lines**

The LYNXEYE XE is the first energy dispersive one-dimensional detector for ultra fast X-ray diffraction measurements. It enables high-speed data acquisition up to 450 times faster than conventional point detector systems with a superb energy resolution making Kß filters and secondary monochromators redundant. Operating with all common characteristic X-ray emission lines (Cr, Co, Cu, Mo, and Ag radiation) it enables outstanding angular resolution (FWHM) and perfect line profile shapes.

www.bruker.com

XRD

ANLAGE ZUM

BERICHT DES VERTRETERS DER DPG IM VORSTAND

BERICHT ZUR VORSTANDSSITZUNG AM 08.10.2012

Die Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) in Berlin (Sektion Kondensierte Materie, SKM) hatte dieses Jahr 6203 registrierte Teilnehmer. Es wurden insgesamt 5332 Vorträge und Poster präsentiert.

Im Laue-Jahr 2012 hat sich die Fachgruppe Kristallographie (KR) der DPG für einige besondere Programmpunkte zum 100-jährigen Jubiläum des Laue-Experiments engagiert. Das kristallographische Highlight war sicher das fachverbandsübergreifende Symposium mit dem Titel „100 years of X-ray diffraction: from the Laue-experiment to new frontiers“, das sehr gut besucht war. Es wurde von der Fachgruppe Kristallographie (KR) organisiert, gemeinsam mit den Fachverbänden BP (Biologische Physik), CPP (Chemische Physik und Polymerphysik), DF (Dielektrische Festkörper), GP (Geschichte der Physik), MA (Magnetismus) und MM (Metall- und Materialphysik), Organisatoren: Leonore Wiehl (Universität Frankfurt), Gerhard Grübel (HASYLAB/DESY) und Joachim Rädler (LMU München). Fachverbandsübergreifende Symposien haben auf den DPG-Tagungen eine hervorgehobene Position, da es insgesamt nur acht davon gibt, die ohne Überschneidungen im Audimax stattfinden. Das „Laue“-Symposium bestand aus fünf eingeladenen Vorträgen, für die wir prominente Redner gewinnen konnten:

- Michael Eckert (Deutsches Museum München): „Disputed discovery: The beginnings of X-ray diffraction in crystals“,
- Walter Steurer (ETH Zürich): „Why are quasicrystals quasiperiodic?“,
- Massimo Altarelli (Hamburg, Leiter des Europäischen XFEL-Projekts): „Coherent Diffraction Imaging with Free-Eletron Lasers“,
- Ilme Schlichting (MPI Heidelberg): „X-ray free-electron lasers – emerging opportunities for structural biology“,
- Tim Salditt (Göttingen): „Structure analysis by X-ray diffraction and X-ray imaging: beyond crystals, beyond averages, and beyond modeling“.

Sie spannten die Brücke von den historischen Anfängen der Röntgen-Beugung an Kristallen über moderne Anwendungen bis zu aktuellen Entwicklungen und Zukunftsperspektiven der Nutzung kohärenter Röntgen-Quellen extrem hoher Intensität, wie sie Freie-Elektronen-Laser darstellen.

In unmittelbarem Zusammenhang damit standen zwei Fachsitzungen mit eingereichten Beiträgen (Kurzvorträge und Poster) zur Materialforschung (10+4) und zu biologischen Themen (10+8):

- „100 years since the Laue experiment: Topical aspects of diffraction and scattering“, Joint Session (KR, BP, CPP, DF, GP, MA, MI, MM),
- „New Perspectives of Scattering at Soft Matter“ (CPP).

Themen bei der „harten“ Materie waren u. a. diffuse Streuung, Gitterdynamik, Gitterdeformation und -spannung in Nanokristallen, Grenzflächen, magnetische Strukturen und Phasenumwandlungen. Die angewendeten Methoden erstreckten sich von der Röntgen-Beugung über inelastische Röntgen-Streuung, Brillouin-Spektroskopie, Elektronenbeugung (einschließlich CBED) bis zu technischen Entwicklungen von Röntgen-Optiken. Eingeleitet

wurde diese Session durch einen eingeladenen Vortrag von Hans-Jürgen Ullrich (TU Dresden), der sich mit frühen Interpretationen der Beugungsphänomene und ihren Beziehungen zu Kossel-Interferenzen befasste.

Bei den „Soft Matter"-Beiträgen waren die Neutronen-Methoden stark vertreten (inelastische bzw. quasielastische Streuung, Neutronen-Spinecho), aber auch Röntgen-Spektroskopie, -Streuung und -Kleinwinkelstreuung, insbesondere GISAXS. Ergänzt wurde diese Session durch zwei eingeladene Vorträge von Ken Andersen (European Spallation Source ESS, Lund, Schweden) über „Soft Matter Research at the ESS" und Oliver Bunk (Paul Scherrer Institut, PSI, Swiss Light Source, Schweiz) über „Scanning small-angle X-ray scattering: Imaging nano-scale properties of extended samples".

Einen starken Bezug zum Laue-Thema hatte auch die vom FV Magnetismus organisierte Session „Soft X-ray Resonant Scattering for Complex Structural and Magnetic Investigations" (MA jointly with KR), Organisation: Eberhard Goering (MPI-IS Stuttgart).

Weitere von der Fachgruppe Kristallographie unterstützte Sessions waren die „Multiferroics" (35 Vorträge + 12 Poster):

- Joint Session Multiferroics I – Junctions and Thin Films / Magnetoelectric Coupling
- Joint Session Multiferroics II – Hexagonal Manganites / Incommensurate Multiferroics
- Joint Session Multiferroics III – Strain / New Routes towards Multiferroicity (MA zusammen mit DF, DS, KR, TT), Organisation: Manfred Fiebig (ETH Zürich)

und ein fachverbandsübergreifende Symposium der Fachverbände DS (Dünne Schichten) zusammen mit DF, KR und HL (Halbleiter): „Resistive Switching", Organisation: Sibylle Gemming (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf) und Regina Dittmann (Forschungszentrum Jülich).

Fast schon Tradition geworden ist die von der Fachgruppe Kristallogaphie alleine organisierte Session „Crystallography in Nanoscience", Organisation: Ullrich Pietch (Siegen). Sie bestand dieses Jahr aus sechs Kurzvorträgen und zwei Postern mit einem eingeladenen Vortrag von Friedhelm Bechstedt (Universität Jena) „On polytypism in III-V nanowires".

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

- 2013: Regensburg, 10. – 15.03.2013
- 2014: Dresden, 31.03. – 04.04.2014
- 2015: Berlin, 15. – 20.03.2015
- 2016: Regensburg, 29.02. – 04.03.2016

Leonore Wiehl, Frankfurt

RÖNTGENLABOR Dr. M. Ermrich

Röntgendiffraktometrie - Röntgenfluoreszenzanalyse

Am Kandelborn 7, D - 64354 Reinheim / b. Darmstadt
Email: roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de
http://www.roentgenlabor-ermrich.de
Fax: (+49) 6162 - 939 824
Tel.: (+49) 6162 - 837 56

Auftragsanalytik / Forschung / Projektarbeit
Reflexion / Transmission / Hochtemperatur / Dünne Schichten ...

Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor
Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

Seminar „Röntgendiffraktometrie für die Praxis“ / 2x im Jahr

Ansprechpartner und Vertrieb der Programme

crystallographica search/match
OxfordCryosystems

Oxford, United Kingdom

CSD crystallographica
Das Werkzeug für Lehre & Forschung
in der Kristallographie.
Von der Kristallansicht bis zum simultan
modifizierbaren Beugungsdiagramm.

CSM search/match
Das Werkzeug für die qualitative
Phasenanalyse.
- am Rohdaten- Diagramm ohne Peaksuche
- mit in-situ Pulverdiagrammsimulation
Alle Datenformate.

SiroQuant
Sietronics Pty Ltd.

Canberra, Australia

SiroQuant® V3.0- Rietveld
Das Werkzeug zur quantitativen
Phasenanalyse mit der Rietveldmethode.
Bestimmung des amorphen Anteils.
Alle Datenformate.

Si- Phase
Einbindung von CIF- Daten
in die Rietveld- Datenbank.

ANLAGE ZUM

BERICHT DES VERTRETERS DER DGK IN DER DPG

Der erste Teil des Berichts bezieht sich auf die Vorstandsratssitzung der DPG am 11. und 12. November 2011 in Bad Honnef und einzelne Punkte, die seitdem bekannt wurden, der zweite Teil entspricht der Vorstandsratssitzung der DPG am 25.03.2012 in Berlin.

- Die DPG hat seit Mai 2011 über 60.000 Mitglieder, Tendenz weiter steigend.
- Durch die Einführung der Bachelorstudiengänge haben sich die Durchschnittsnoten nicht verschlechtert. Die Konferenz der Fachbereiche Physik hat eine Empfehlung abgegeben, welche mathematischen Inhalte zu Beginn des Studiums vorausgesetzt werden sollten.
- Im letzten Jahr gab es 12.500 Neueinschreibungen entsprechend einer erheblichen Steigerung von knapp 30 % gegenüber dem Vorjahr. In die anfänglichen (in der Regel Bachelor) Studiengänge haben sich 10.500 Personen neu eingeschrieben (Zuwachs von 24 %).
- Die Veranstaltung „Highlights der Physik“ ist nach wie vor ein großer Erfolg mit über 35.000 Besuchern; eine Veranstaltung zur Verleihung des Nobelpreises fand ebenfalls großes Interesse in der Öffentlichkeit.
- Das Mentoring-Programm der DPG wird auch im zweiten Jahrgang hervorragend angenommen.
- Aktuell bieten 47 Firmen und Institute Besichtigungstermine im Laborbesichtigungsprogramm an.
- Für den Walter-Schottky-Preis konnten die beiden Firmen Infineon Technologies AG und Robert Bosch GmbH gewonnen werden, so dass das Preisgeld von zukünftig 10.000 Euro gesichert ist.
- Der erste Bauabschnitt der Sanierung des Physikzentrums wurde unter Einhaltung der Kosten aber Überschreitung der Zeitplanung nahezu abgeschlossen. Die Sanierung des „Bürgerkellers“ wird von der Wilhelm und Else Heraeus-Stiftung getragen. Der Bau eines Gästehauses mit Tiefgarage ist in Planung.

- Unter anderem aufgrund des Ertrags aus drei Ausschüttungen der Verwertungsgesellschaft VG WORT ergibt sich ein hoher Bilanzüberschuss für das Jahr 2011.
- Bis zum 8. März 2012 hatten sich bereits 9.578 Teilnehmer(innen) zur Teilnahme an einer der vier Frühjahrstagungen des Jahres 2012 angemeldet. Teilnehmeranzahl und Anzahl wissenschaftlicher Berichte haben sich in den letzten 10 Jahren fast verdoppelt.
- Die Diplom-Absolventenzahl schwankt viel stärker (1.200 bis 3.600) als die Zahl der Promotionen (1.100 bis 1.500). Für die Zeit zwischen 1988 und 2011 ergibt sich eine Promotionsquote bei Berücksichtigung einer vierjährigen Verschiebung, die zwischen 40 % und 100 % schwankt und aktuell bei 78 % liegt.
- Die Übergabe der Präsidentschaft an Frau Prof. Dr. Johanna Stachel wird am 16. April 2012 im Magnus-Haus in Berlin stattfinden.
- Anlässlich der Feierlichkeiten zum 500. Wilhelm und Else Heraeus-Seminar wird die Einweihung und Namensgebung der Begegnungsstätte im Untergeschoss des Physikzentrums am 8. Mai 2012 stattfinden.
- Die Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie, Mikrosonden wird 2013 in Regensburg und 2014 in Dresden stattfinden.

- New Journal of Physics (NJP): Der Verlag IOPP, der von IOP und DPG mit der Herausgabe des NJP beauftragt ist, hat im Herbst 2011 eine Vollkostenrechnung für das NJP vorgestellt. Den deutlich erhöhten indirekten Kosten soll mit einer wesentlichen Erhöhung der Artikelkosten begegnet werden.
- Die Sanierung des Physikzentrums geht weiter voran und kann von den Überschüssen im Jahresabschluss profitieren.

Markus Braden, Köln

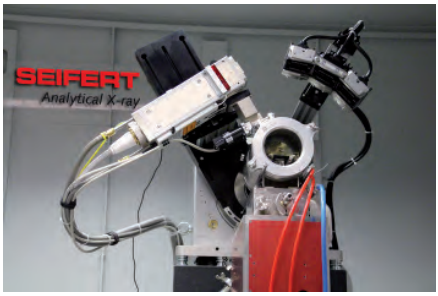
GE
Measurement & Control

DSeTec

Seifert Sun XRD

Röntgendiffraktometer für schnelle In-situ-Anwendungen (z. B. CIGS PV)

Das Seifert Sun XRD ist speziell entwickelt worden für Echtzeituntersuchungen von Temperaturübergängen in der Metallurgie oder auch der Dünnschichttechnologie wie den CIGS – $Cu(In,Ga)Se_2$ Systemen in der Fotovoltaik. Im Sekundentakt können Reaktionen unter den unterschiedlichsten Rahmenbedingungen wie Druck, Temperatur und Heizraten an großflächigen Proben untersucht werden.



Merkmale

- 3 extrem schnelle XRD-Detektoren Meteor1D
- Ein 40°-Diffraktogramm pro Sekunde
- Temperaturkammer für In-situ Untersuchungen
- Wachstumsstudien/Phasenübergänge
- Ofendruck 4 x 10^{-3} – 2000 mbar
- Heizrate: ±15°C/s bis ±50°C/s
- Probengröße max. 100 mm x 200 mm
- Leistungsfähiges RayfleX Softwarepaket

GE imagination at work

www.ge-mcs.com/xrd
E-Mail: xrd.info@ge.com

Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK)

(Stand: 14.03.2012)

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

11. Der Veranstalter achtet auf barrierefreien und ungehinderten Zugang zu allen für die Tagung genutzten Räumlichkeiten.
12. Der Veranstalter hält Räumlichkeiten entsprechend dem Zweck zur Durchführung der Mitgliederversammlung sowie für Ehrungen und Preisvergaben vor.
13. Der Gemeinschaftsabend ist ein Bestandteil der Jahrestagung und sollte der gesellschaftliche Höhepunkt sein.
14. Der Veranstalter ist dem Vorstand bezüglich wissenschaftlichen Inhalts, Organisation und Durchführung der Jahrestagung sowie hinsichtlich der finanziellen Mittel rechenschaftspflichtig.

The New PHOTON 100 Detector for X-ray Crystallography

Cutting edge technology when you need it most

The new PHOTON 100 brings cutting edge CMOS detector technology to your laboratory. It features a huge 10 cm x 10 cm sensor with highest sensitivity optimized for weakly scattering crystals and long unit cells. With its extremely high read-out speed for fast and efficient data collection the PHOTON 100 is the future-proof detector delivering reliable performance when you need it most.

Operating just air-cooled for low maintenance and low cost of ownership the PHOTON 100 comes with a 3-year warranty.

www.bruker.com

Crystallography

Innovation with Integrity

KURZBERICHTE DER REISESTIPENDIATEN ZUR ECM27 IN BERGEN

KURZBERICHT VON TIM WIEGELS (EMBL HAMBURG)

Mein Tagungsbeitrag auf dieser Konferenz hatte den Titel „Structural Bioinformatics incorporated into ARP/wARP“ und wurde als Vortrag im Zuge des Microsymposiums Nummer 6 (MS06 – Bioinformatics informs MX, Vorsitz von Eugene Krissinel und Thomas Luetteke) vorgestellt.

Der Vortrag behandelte die Weiterführung meines Projekts zur Nutzung von bio-informatischen Methoden (Überlagerung, Sekundärstrukturvorhersage, Mustererkennung, Data Mining etc.) zur Verbesserung von Proteinstrukturmodellen welche mit der ARP/wARP Software automatisch aus niedrigaufgelösten Elektronendichtekarten generiert wurden.

Obwohl der Großteil des (leider recht überschaubaren) Publikums mich und meine Arbeit recht gut kennt, da ich seit mehreren Jahren ARP/wARP auf diversen Summer Schools, Workshops etc. vorstelle und Tutorials gebe, weckten die neueren Aspekte meines Vortrages Interesse bei anderen Software-Entwicklern (z. B. Gabor Bunkozci, welcher besonders von meiner Methode zum Sekundärstrukturdocking bei niedriger Auflösung begeistert war) ebenso wie bei diversen Kollegen, die hauptsächlich Strukturen lösen. Die Methoden sind in der ARP/wARP Software Suite verfügbar (bzw. werden in der nächsten Version enthalten sein), somit beschränkten sich die meisten Diskussionen darauf, den Kollegen zu erklären, wo die Software heruntergeladen werden kann, wie sie benutzt wird und wie ich per E-Mail erreichbar bin.

Außerdem habe ich auch ein Tutorial zu ARP/wARP im Zuge des *Software Fair* gegeben.

Zu meinen persönlichen Highlights auf der Konferenz zählten die MS05 „Advances in refinement and validation. Ligand chemistry“, sowie MS07 „Pharmaceutical crystallography – Drug design: success and failures“, da dies Themen sind, die mich persönlich sehr interessieren. Die anderen Vorträge im MS06 waren natürlich auch sehr interessant. Das größte Highlight war natürlich Bergen selbst und der Blick auf Bergen vom Ort des Konferenzdinners.

Leider fiel mir im Allgemeinen auf, dass es doch recht leer war (zumindest in den Microsymposia, in denen ich war, welche zum größten Teil Makromoleküle behandelten). Ich vermute, dass dies darin begründet war, dass Bergen und Norwegen im Allgemeinen recht teuer sind und diese Konferenz leider für viele potentielle Gäste schlichtweg das Budget gesprengt hat.

KURZBERICHT VON VANESSA SAGAWE (UNIVERSITÄT FREIBURG)

Ich habe an der diesjährigen ECM-Konferenz in Bergen mit zwei verschiedenen Posterbeiträgen teilgenommen. Die Titel der beiden Poster lauteten „Theoretical analysis of MB_2, M_3B_4 and M_5B_6 (M = V, Nb, Ta, Cr)“ und „Experimental and theoretical Electron Density in MgB_7“. Beide Poster wurden im Symposium MS15 „Structural complexity of minerals and inorganic materials“ vorgestellt.

Insbesondere zu der Elektronendichteuntersuchung an MgB_7 habe ich große Resonanz erhalten, weil es sich um die bisher einzige vollständige Multipolverfeinerung an einem borreichen Borid handelt.

Sehr interessant fand ich den Vortrag von C. A. Morrison über neue Arten der Modellierung von Atombewegungen in Molekülen. Sie hat vorgeschlagen, anharmonische Bewegungen von Atomen nicht mehr über Gram-Charlier-Entwicklungen zu beschreiben, sondern stattdessen Krümmungsparameter und ähnliches in die Verfeinerung einzuführen. Dadurch würde sich die Zahl der zu verfeinernden Parameter deutlich reduzieren. Da ich im Rahmen meiner Elektronendichteuntersuchungen zum Teil anharmonische Schwingungen berücksichtigen musste bzw. versucht habe, sie zu berücksichtigen, könnte der Ansatz von Morrison auch für meine Systeme sehr hilfreich sein.

Obwohl ich im Rahmen meiner Arbeit bisher nie Zwillinge verfeinern musste, konnte in dem Microsymposium MS30 „Buy one, get one free: Software for twin handling“ sehr viel lernen und habe interessante Möglichkeiten zur Verfeinerung von verzwillingten Kristallen kennengelernt.

Da ich während der von mir betreuten Praktika zum Teil auch Studenten kristallographische Grundlagen vermitteln muss, hat mir der Vortrag von E. Libowitzky zum Thema „The 10 two-dimensional crystallographic point groups – an interactive PowerPoint exercise“ wertvolle Ideen geliefert, um den Praktikanten die wesentlichen Symmetrieoperationen im Zwei- und Dreidimensionalen nahe zu bringen. Auch die praktischen Beispiele bezüglich der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von Kristallen könnten für meine Lehrtätigkeit nützlich sein.

Da sich auch bei den von mir untersuchten Verbindungen die Frage stellt, ob die Einkristall-messungen für die experimentelle Elektronendichtebestimmung bei Raumtemperatur durchgeführt werden können oder ob eine Messung bei tieferen Temperaturen notwendig ist, konnte ich in dem Symposium MS 19 „The importance of low temperature in charge density studies: history and future“ wertvolle Tipps über Messmethoden und -strategien erhalten, die ich in weiteren Untersuchungen möglicherweise zumindest zum Teil anwenden kann.

KURZBERICHT VON VIKTORIA MIHAJLOV (UNIVERSITÄT FREIBURG)

Vielen Dank für die Reisebeihilfe für die Teilnahme an der ECM27 in Bergen. Mein Posterbeitrag lautete „Systematic investigation of the structure and the electronic requirements of the $Na_{36}Cd_{24}Ga_{56}$ type“ im Symposium MS15 „Structural complexity of minerals and inorganic materials“. Mein Posterbeitrag führte zu einigen interessanten Diskussionen über die komplexen Strukturen in intermetallischen kubischen Systemen und die strukturellen Gemeinsamkeiten dieser. Vor allem die Gespräche mit Frau Dshemuchadse (ETH Zürich), die eine systematische Untersuchung dieser Systeme durchführt, waren sehr aufschlussreich.

Das Highlight für mich war das Gesamtkonzept der Tagung, bei der wieder viel Wert auf die Vielfalt der Tagungsbeiträge gelegt wurde. Weitere Highlights waren die Vortragsreihe Quasikristalle (MS22) und diverse „Methoden“-Vorträge, die zahlreich vertreten waren. Auch die *How-to* (MS31) und *Crystallographic teaching* (MS49) Vortragsreihe war gerade für junge Chemiker amüsant und doch lehrreich.

Die Tagung bot wieder zahlreiche Gelegenheiten zu anregenden Diskussionen, Austausch von Erfahrungen und dank der Vielfalt an Themen, die Möglichkeit über „seinen Tellerrand“ hinauszublicken.

KURZBERICHT VON ANNA LEHNER (UNIVERSITÄT FREIBURG)

Mit großer Freude habe ich von dem zuerkannten Reisestipendium für meine Teilnahme an der ECM27 in Bergen erfahren. Im August habe ich bei dieser Tagung ein Poster mit dem Titel „Crystal chemistry and electronic structures of oxidosulfido metallates“ im Symposium, MS15 „Structural complexity of minerals and inorganic materials“ vorgestellt.

Mir hat an der Organisation der Tagung besonders gut gefallen, dass ausreichend Zeit und ein angenehmes Umfeld für die Poster-Präsentationen vorgesehen waren. Am Poster habe ich vor allem von der fachlichen Diskussion mit dem Herausgeber einer Zeitschrift, in der wir kürzlich einen Artikel publiziert hatten und mit vielen interessierten jungen Teilnehmern der Konferenz profitiert. Ich habe mich in meinem Tagungsbeitrag mit der Untersuchung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen auf Basis kristallographischer Daten mit Hilfe von UV-Vis-Spektroskopie und quantenchemischen Simulationen auseinandergesetzt. Es boten sich so viele Gelegenheiten, verschiedenste Bereiche meiner Arbeit einerseits mit Experten zu besprechen und andererseits Wissenschaftlern vorzustellen, die über weniger Erfahrungen mit diesen Methoden verfügen.

Ein besonderer Höhepunkt der Tagung war für mich die Teilnahme an den Treffen der „Young Crystallographers“, einer „General Interest Group“ der ECA. Erstmals kam ich in Kontakt mit der Organisation wissenschaftlicher Konferenzen und war begeistert von meinen Möglichkeiten, in Zukunft bei der Gestaltung von kristallographischen Tagungen aktiv zu werden. Für die nächsten vier Jahre werde ich nun als Sekretärin der „Young Crystallographers“ daran beteiligt sein, Programmvorschläge für ECA-Tagungen auszuarbeiten und Veranstaltungen im Hinblick auf die Interessen junger Wissenschaftler zu organisieren. Ohne die Teilnahme an dieser Tagung hätte mir die Inspiration zu dieser Beschäftigung, die mir viel Freude macht, gefehlt.

KURZBERICHT VON MICHAEL JEHLE (UNIVERSITÄT FREIBURG)

Mein Posterbeitrag mit dem Titel „A systematic crystal chemical study of mixed stannides/germanides“ wurde im Mikrosymposium MS15 „Structural complexity of minerals and inorganic materials“ vorgestellt. Hierbei war vor allem die thematische Breite von vorwiegend theoretischen Arbeiten bis hin zu schwerpunktmäßig mineralogischen Fragestellungen beeindruckend und bot reichlich Raum für Diskussionen.

Erfrischend und bereichernd empfand ich ein Mikrosymposium, in welchem die Vortragenden über ihre Erfahrungen zum Thema Lehre in der Kristallographie berichteten (MS49 „Crystallographic teaching“). Bedauerlich war für mich der Wegfall des Vortrags von Daniel Shechtman. Insgesamt freue ich mich jedoch sehr, dass ich an der 27. ECM in Bergen teilnehmen konnte und bedanke mich dafür auch recht herzlich bei der DGK.

KURZBERICHT VON NADINE RADEMACHER (UNIVERSITÄT FRANKFURT)

Ich bin seit Dezember 2010 Doktorandin in der Arbeitsgruppe Kristallographie bei Prof. Dr. Björn Winkler an der Goethe-Universität Frankfurt am Main. Ich beschäftige mich hauptsächlich mit Materialien, die in Diamantstempelzellen hohen Drücken und Temperaturen ausgesetzt sind. Ich nutze unter anderem die Analyse der Paarverteilungsfunktion (*pair distribution function*, PDF), um die lokalen Änderungen von Strukturen, die aus kleinen Molekülen bestehen, bei sich ändernden Druck- und Temperaturbedingungen zu verfolgen und zu verstehen.

Ich habe zwei Beiträge bei der ECM27 eingereicht. Der erste Beitrag wurde als Vortrag im Mikrosymposium MS36 „Towards megabar pressures: complex and geo-materials“ mit dem Titel „High pressure diamond anvil cell studies of carbon monoxide – viscosity, photochemical polymerization and laser heating“ angenommen. In meinem Vortrag habe ich Untersuchungen von Kohlenmonoxid-Helium-Gemischen bei hohen Drücken und Temperaturen gezeigt. Im Rahmen dieser Studien bestimmte ich die Viskosität von CO bei 4 GPa, erhielt mittels der PDF Informationen über die starke lokale Ordnung in flüssigem CO sowie über die lokale Struktur des Produktes der Polymerisierung von CO (p-CO). Des Weiteren wurde p-CO lasergeheizt und ein Zersetzungsprodukt mittels Einkristall-diffraktometrie charakterisiert. Zum anderen präsentierte ich im Mikrosymposium MS14 „Materials in operando and in situ crystallography of materials“ ein Poster mit dem Titel „High pressure X-ray single-crystal and powder diffraction of SF_6 up to 14 GPa“, das die Kristallstrukturbestimmung von zwei verschiedenen SF_6-Polymorphen mittels Einkristall-diffraktion zeigte. Es wurden außerdem Röntgenpulverbeugungsdaten bis 14 GPa gesammelt, um Informationen über die Kompressibilität von SF_6 zu erhalten.

Die Teilnahme an der ECM27 in der schönen Stadt Bergen ermöglichte es mir, in einer wichtigen Phase meiner Doktorarbeit Zwischenergebnisse zu präsentieren und diese Ergebnisse mit Wissenschaftlern, die aus unterschiedlichen Forschungsbereichen kommen, zu diskutieren. Ich habe zum ersten Mal einen Vortrag bei einer Konferenz gehalten, was eine überaus wichtige und hilfreiche Erfahrung war. Das Programm war breit gefächert und ich konnte Eindrücke darüber sammeln, wie wichtig die Kristallographie in den verschiedenen Naturwissenschaften (von der Biologie bis zur Materialwissenschaft) ist. Ich möchte mich an dieser Stelle bei der DGK herzlich für die finanzielle Unterstützung zur Teilnahme an der ECM27 bedanken.

KURZBERICHT VON PHILIPP MÖRSCHEL (UNIVERSITÄT FRANKFURT)

Ich möchte mich ganz herzlich bedanken, dass ich als Stipendiat für das Reisestipendium der DGK ausgewählt worden bin. Ich befinde mich momentan in den letzten Zügen vor Abgabe meiner Doktorarbeit. Die ECM27 in Bergen war die letzte Tagung, an der ich während meiner Promotionszeit teilgenommen habe. Umso mehr hat es mich erfreut, dass ich die Ergebnisse meiner Forschungsarbeit in einem Vortag auf dieser Tagung präsentieren konnte. Dieser Vortrag im Rahmen des Mikrosymposiums „Structure prediction for crystalline and amorphous molecular solids“ hat es mir ermöglicht, den in meiner Doktorarbeit entwickelten neuen Ansatz zur Berechnung organischer Molekülkristalle unter Verwendung eines QM-MM-Sphärenmodells mit führenden Wissenschaftlern auf meinem Arbeitsgebiet zu diskutieren. Die Diskussion am Ende des Vortrags und die weiterführenden Gespräche im Anschluss waren sicherlich mein persönliches „Highlight“ der Tagung. Insbesondere die Gespräche mit Prof. Dr. Graeme Day und Dr. Jacco van de Streek sind mir lebhaft in Erinnerung. Neben Fragen zu einigen Details der neuen Methode wurden auch Ähnlichkeiten und Unterschiede zu anderen QM-MM-Implementierungen für nicht periodische Systeme (wie dem ONIOM-Modell) diskutiert.

KURZBERICHT VON PHILIPP URBAN (UNIVERSITÄT LEIPZIG)

- Titel des Beitrags:
  „Diffusion processes in $(GeTe)_n(Sb_2Te_3)$ $(4 \leq n \leq 12)$ crystals investigated by synchrotron radiation (MS 14-05)“

- Symposium:
  MS 14: Materials in operando and in situ crystallography of materials

- Diskussionen zum Beitrag:
  Die Diskussion zu meinem Beitrag ging vor allem um die mögliche Anwendung von Laue-Beugung zur Nachverfolgung von Reaktionen *in situ*, die Vorzüge gegenüber monochromierter Synchrotronstrahlung und die Grenzen der Methode bezüglich der Zeitauflösung.

- Highlights:
  - MS34: Aperiodic, short-range ordered and non-crystalline materials at ambient and non-ambient conditions:
    Sehr guter Vortrag über die 3D-PDF, die als Methode für die Verbindungen, die ich untersuche, nützlich sein kann.
  - Veranstaltung für Young Crystallographers:
    Hier konnte sehr gut Feedback zur Tagung im Allgemeinen gegeben werden, zudem war auch ein guter fachlicher Austausch mit anderen Doktoranden möglich.
  - Die Stadt Bergen war ebenfalls ein Highlight.

KURZBERICHT VON ALEXANDER DAMME (UNIVERSITÄT WÜRZBURG)

Der Titel meines Tagungsbeitrages lautete „Synthesis and Characterization of Diborane Compounds“ (MS43-P3) und fand im Rahmen der Poster Präsentation MS43 „Hot topics and structures in molecular chemistry“ statt. Die Gespräche mit anderen Tagungsteilnehmern boten mir die Möglichkeit meinen synthetischen Zugang zu den von mir untersuchten Diboran(4)yl-Platin-Komplexen und den Diboran-Phosphan-Addukten zu präsentieren. Alle vorgestellten Verbindungen wurden von mir röntgenografisch untersucht und damit die absolute Molekülstruktur bestimmt, wodurch Aufschluss über die Bindungsverhältnisse erhalten wurde. Des weiteren konnte ich darüber berichten, welche Einrichtungen für die Röntgenstrukturanalyse in unserem Arbeitskreis Verwendung finden. Sehr interessant war für mich der Vortrag von Peter Brenner aus unserem Arbeitskreis mit dem Titel „The *trans*-Influence of the Boryl Ligand in Square-Planar Platinum(II) Complexes“ (MS27-O2), da diese Arbeiten unter anderem als Grundlage für meine eigene Forschung dienen.

Unsere Einkristall-Röntgenstrukturanalysen finden standardmäßig bei -173 °C statt, um die in der Regel luft- und hydrolyseempfindlichen Verbindungen zu vermessen. Mir war somit das Arbeitsgebiet der Pulverdiffraktometrie mit seinen verschiedenen Methoden weitgehend unbekannt, da sie bei uns bisher keine Anwendung findet. Sehr beeindruckend fand ich hierbei die Vermessung von Substanzen bei unterschiedlichen Drücken, wobei unter anderem versucht wird über die Gegebenheiten im Erdmantel Aufschluss zu erhalten (MS17-O3, MS14-P7).

Ein weiteres interessantes Forschungsgebiet stellte die Einkristall-Röntgenstrukturanalyse von Substanzen dar, die bei Standardbedingungen als Flüssigkeit vorliegen. Diese wurden mit Hilfe von Laserlicht so lange aufgeschmolzen und anschließend wieder eingefroren bis sie als Einkristall vorliegen und somit vermessen werden können (MS23-O3).

Die parallel stattfindende Messe der verschiedenen Hersteller für Röntgendiffraktometer und Zubehör bot einen guten Einblick in die heutige und zukünftige Technik auf diesem Arbeitsgebiet. Die Messe konnte ich auch nutzen, um erste Kontakte zu Firmenvertretern zu gewinnen und in persönlichen Gesprächen gelang es mir, einen guten Einblick in die Firmenstrukturen und Aufgabenfelder eines Chemikers im Arbeitsalltag zu bekommen.

Ein kleiner Wermutstropfen war der Ausfall des Vortrages von Dan Shechtman.

Nichtsdestotrotz ermöglichte mir die Tagung in Bergen weitere Auslandserfahrung zu sammeln und meine englischen Sprachfähigkeiten zu verbessern und dies in einer angenehmen und entspannten Atmosphäre.

Ich hoffe, ich konnte mit meinem Bericht einen kleinen Einblick in meine persönlichen Highlights in Bergen verschaffen.

KURZBERICHT VON REENT MICHEL (UNIVERSITÄT GÖTTINGEN)

Mein Beitrag zur ECM27 in Bergen war ein Poster mit dem Titel „Challenges in small molecule XRD – Alkali Metal Organics from Ammonia“, vorgestellt mit der Nummer P11 in dem Themengebiet MS23 „Intermolecular interactions at ambient and extreme conditions“. Die Posterpräsentation enthielt die Kristallstrukturen einiger Verbindungen aus meinem Forschungsgebiet der Alkalimetallammoniakate, die Lösung eines speziellen kristallographischen Drillingsproblems, eine nicht vollständig verfeinerte modulierte Struktur und spezielle Montiertechniken für extrem thermolabile Verbindungen.

Zu den Teilaspekten gab es folgende Diskussionen: Das reziproke Gitter der drei Domänen des Drillingskristalls erweckte den Eindruck einer hexagonalen Raumgruppe, daher gab A. David Rae von der Australian National University die Möglichkeit zu bedenken, es könnte sich um eine hexagonale oder trigonale Superstruktur handeln. Aufgrund der erfolgreichen Zwillingsverfeinerung haben wir dies allerdings als unwahrscheinlich bewertet. Ognjen Milat vom Institut für Physik in Kroatien interessierte sich insbesondere für die modulierte Struktur, da sein Forschungsgebiet ebenfalls modulierte Strukturen behandelt. Dabei unterhielten wir uns über die unterschiedlichen Probleme, die sich in seinem Fall bei anorganischen Verbindungen wie dotierten Schwermetalloxiden und in meinem Fall bei einer metallorganischen Verbindung ergeben. Für die Rolle der NH-N und NH-π Wasserstoffbrückenbindungen als strukturbestimmende Kraft der Kristallpackung und für die Montiertechnik für stark luft- und temperaturempfindliche Substanzen interessierten sich Agata Bialonska von der Fakultät für Chemie der Universität Breslau und Peter Luger vom Institut für Chemie der Freien Universität Berlin. Erstere holte sich Anregungen, um ähnlich empfindliche Substanzen messen zu können und letzterer diskutierte mit mir über seine eigene Montiertechnik.

Meine persönlichen Favoriten der Keynote-Vorträge waren Simon Parsons von der University of Edinburgh und Neil R. Champness von der University of Nottingham. Simon Parsons Vortrag über den aktuellen Stand zur Bestimmung der absoluten Struktur war besonders interessant, da ich öfter persönlich mit dem Problem zu tun habe. Der Vortrag von Neil R. Champness beeindruckte durch die Anwendung vielfältiger Analysemethoden, die weit über die Kristallographie hinausgingen. Besonders die elektronenmikroskopischen Untersuchungen von MOF-Monoschichten lieferten interessante Erkenntnisse. Von den Mikrosymposia blieben mir „How to“ (MS31), „Buy one, get one free: Software for twin handling“ (MS30) und „Hot topics and structures in molecular chemistry“ (MS43) besonders in Erinnerung. In „How to“ konnte man einiges zur Verbesserung von Vorträgen, von der Lehre und vom akademischen Werdegang lernen. In „Software for twin handling“ erhielt man einen Überblick über verschiedene Herangehensweisen an Zwillingkristalle, die im Forschungsalltag häufig auftreten und in deren Behandlung man sich verbessern kann. Das Symposium „Hot topics and structures in molecular chemistry“ beinhaltete viele interessante Vorträge, von denen beispielsweise der Vortrag von Marina A. Petrukhina von der University of Albany, New York auch thematisch mit meinem eigenen Forschungsgebiet verwandt ist.

INCOATEC

innovative coating technologies

Your Partner for X-ray Optics & Microfocus Sources

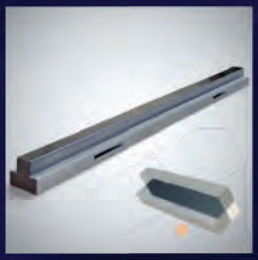
Göbel mirrors

Multilayer X-ray optics

10 years of innovations

made in Germany

IμS High Brilliance



NEW

Montel optics

XRF

X-ray Multilayer

Synchrotron optics

Göbel mirrors

Multilayer up to 50 cm

Scatter-free pinholes

SCATEX

XRD High resolution

High pressure

Charge density

SAXS

PX/MX

IμS High Brilliance

for Cu, Mo, Ag, Cr and Co

www.incoatec.de

MODERNES KONGRESSWESEN – WISSENSCHAFT ODER GESCHÄFT?

Als ich vor Jahrzehnten als junger Wissenschaftler anfing, auf nationale oder internationale Kongresse zu gehen, um meine Forschungsergebnisse vorzustellen bzw. Ergebnisse anderer Gruppen kennenzulernen, war das Kongresswesen noch sehr übersichtlich. Es gab einige wenige Fachtagungen, die in den einschlägigen wissenschaftlichen Zeitschriften oder von den wissenschaftlichen Gesellschaften angekündigt bzw. veranstaltet wurden. Es gab ein wissenschaftliches Komitee, das die Beiträge sichtete und auswählte und ein lokales Organisationskomitee, das für einen ordentlichen Ablauf sorgte.

Natürlich gibt es Tagungen dieser Art immer noch, aber es hat sich daneben ein Tagungsmarkt etabliert, bei dem die Seriosität mindestens in Frage gestellt werden muss und wo kommerzielle Interessen nicht ausgeschlossen werden können. Begünstigt wird diese Entwicklung dadurch, dass heute jeder Organisator jedem Wissenschaftler quer über den Globus eine Werbe-E-Mail problemlos und kostenfrei schicken kann. Erkennbar sind solche Tagungen unter anderem daran, dass sie häufig in exotischen Orten mit gewissem touristischem Reiz stattfinden und zu sehr allgemeinen Tagungsthemen einladen, die mit dem Fachgebiet des Adressaten kaum zu tun haben. Zusätzliche Merkmale sind, dass die Einladungen zum Teil sehr kurzfristig erfolgen, Deadlines ständig verlängert werden, und auch eingeladenen Referenten keine finanzielle Kompensation, etwa in Form eines Nachlasses bei den in der Regel hohen Kongressgebühren angeboten wird. Geködert werden die potentiellen Teilnehmer noch durch den Hinweis, dass eine Reihe von Nobelpreisträgern Vorträge bereits zugesagt haben. Wer die Veranstalter sind, ist nicht leicht erkennbar. Manchmal bin ich mir nicht einmal sicher, ob solche Tagungen überhaupt stattfinden. Ich kriege Einladungen dieser Art regelmäßig, häufig mehrmals in der Woche. Ich lösche derartige E-Mails sonst immer, habe allerdings unlängst eine Ausnahme gemacht, wovon hier die Rede sein soll.

Weil der angebotene Kongress zu einem Thema stattfand, an dem ich durchaus interessiert war und zu dem ich auch etwas beitragen konnte, habe ich zugesagt. Bereits im Vorfeld waren die o. g. Merkmale erkennbar. So wurde nach Einsenden des Abstracts mein Beitrag sofort angenommen, eine wissenschaftliche Beurteilung konnte also gar nicht stattgefunden haben. Einer meiner Mitarbeiter erhielt noch 3 Wochen vor Tagungsbeginn ebenfalls eine Einladung. Auch wurde das Programm ständig geändert.

Wie auch immer, die gute Nachricht vorab: Die Tagung fand wie vorgesehen statt mit Teilnehmern aus vermeintlich 35 Ländern, und die avisierten Nobelpreisträger waren auch da. Allerdings hielten sie ihre Vorträge direkt hintereinander im Rahmen der „Opening Ceremony“ und waren danach nicht mehr gesehen. Ich will das nicht weiter kritisieren. Nobelpreisträger sind gefragte Leute. Aber besonders jüngere Teilnehmer hätten sicher gern die Gelegenheit genutzt, den einen oder anderen Laureaten persönlich zu sprechen.

Kommen wir nun zu den schlechten Nachrichten. Die Tagung fand in einem riesigen Convention Center statt, in dem es eigentlich hinreichend Platz gab. Soweit ich das beobachten konnte, fanden mehrere Veranstaltungen gleichzeitig statt, darunter eine Industriemesse in einer großen Halle im Erdgeschoss. Unglücklicherweise hatten die Veranstalter unsere Tagung genau in diese Halle gelegt, indem in der Nacht vor Tagungsbeginn in einer Ecke mit Pappwänden mehrere Boxen abgetrennt wurden, die als

Vortragsräume dienen sollten. Auf eine Abdeckung war verzichtet worden, die Räume waren also nach oben hin offen.

Da die benachbarten Industrieausteller mit Musik und anderen Lautsprecheransagen auf ihre Stände aufmerksam machen wollten und deshalb mit der Lautstärke nicht eben zimperlich waren, und weil auch Vorträge und Diskussionen aus den benachbarten Boxen deutlich herüberkamen, war ein ordentlicher Tagungsbetrieb bei dieser Akustik kaum möglich. Auch die technische Betreuung hielt sich in Grenzen. Während es sonst üblich ist, dass ein „Technical Staff" existiert, der sich zum Beispiel um die Überspielung der Beiträge auf die tagungseigenen Laptops kümmert und bei individuellen Problemen behilflich ist, erschien diesmal 10 Minuten vor Beginn der Sitzung ein Jüngling, stellte einen PC auf das Podium und verschwand sofort. Nicht einmal einen Laserpointer brachte er mit.

Es war auch eine Postersession vorgesehen, die allerdings von den Veranstaltern auch nicht so ernst genommen wurde. Jedenfalls mussten die Poster irgendwo an eine der Außenwände der Boxen gehängt werden, wo, war nicht spezifiziert. Ein sonst übliches Zeitfenster für die Posterpräsentation gab es ebenfalls nicht. Ich habe dann auch kaum einen Interessenten vor einem der Poster gesehen. Mir taten die Teilnehmer leid, die dafür ein Poster vorbereitet hatten.

Milde formuliert, die internationalen Teilnehmer waren „not amused". Vertreter des Tagungsbüros, sofern sie überhaupt sichtbar wurden, beschwichtigten, dass sie über eine Verbesserung der Bedingungen beraten würden, ohne dass bis zum Ende der Tagung etwas passierte.

Mein Fazit aus dieser Erfahrung ist wie folgt: Offensichtlich etabliert sich ein grauer Markt im Kongresswesen, von dem nicht ganz klar wird, welche Ziele verfolgt werden, d. h. ob hier nicht kommerzielle Aspekte mit der Wissenschaft konkurrieren, sie sogar dominieren. Hat man eine hinreichend große Zahl von Teilnehmern, kann man über die üppigen Tagungs- und Aufenthaltskosten Geld verdienen. Gegen diesen Trend sollte die „Scientific Community" sich wehren und auf das Einhalten wissenschaftlicher Standards achten. Das „Peer Review"-Verfahren, bei Zeitschriften-Publikationen die Regel, wird bei guten Tagungen über das Programmkomitee durchaus wirksam sein und für die Qualität der Beiträge sorgen. Dabei muss es unbedingt bleiben. Deshalb mein Hinweis, vor allem an die jüngeren von Ihnen. Sie können sich zwar geschmeichelt fühlen, wenn Sie persönlich zu einem Vortrag irgendwo auf dem Globus eingeladen werden. Passen Sie aber auf, dass anständige wissenschaftliche Standards am Konferenzort zu erwarten sind. Wir alle, besonders auch die internationalen wissenschaftlichen Gesellschaften sind aufgerufen, das Tagungswesen wachsam zu beobachten und ggf. die Stimme zu erheben.

Übrigens, mein Tagungsbesuch hat sich doch noch gelohnt. Zwar hat wohl kaum einer der Zuhörer meinen Vortrag akustisch verstehen können, aber ich habe danach im privaten Kreis nicht nur interessierte Diskutanten gefunden, sondern auch wissenschaftliche Kontakte neu und wieder geknüpft, aus denen spannende gemeinsame Forschung resultieren sollte. Das ist schließlich immer ein wesentlicher Aspekt einer Tagungsreise. Allerdings ist nunmehr meine E-Mail-Adresse wohl Gegenstand schwunghaften Adressenhandels, jedenfalls kriege ich jetzt doppelt so viele Kongresseinladungen wie früher.

Peter Luger, Berlin

Screens Are Our Passion!

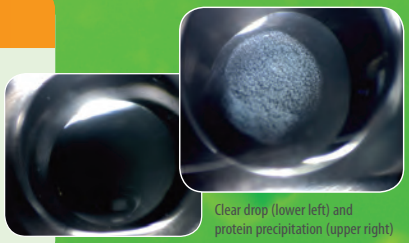
JBScreen Wizard

JBScreen Wizard is a highly effective random sparse matrix screen for crystallizing proteins, peptides, nucleic acids and macromolecular complexes. A large range of precipitants, buffers and salts allow a broad sampling of crystallization space at pH levels from pH 4.5 to pH 10.5.

Learn more about this prominent screen at:
www.jenabioscience.com/wizard

JBScreen Solubility HTS

JBScreen Solubility HTS, developed by Meindert Lamers from the MRC in Cambridge, is designed to quickly find suitable buffer components to purify and store protein in. Buffer, pH, salt and glycerol are tested at the same time and suitable conditions are found in a single assay. The results are visible after one hour.



Clear drop (lower left) and protein precipitation (upper right)

Check out the details of this screen here: **www.jenabioscience.com/solubility_hts**

1 **Memb-PASS™ Differential Filtration Detergent Assay**
Promising Detergent

2 **Memb-PASS™ Solubility Pre-Screen**
Appropriate Protein Concentration

3 **Memb-PASS™ Crystallization Screen**
Membrane Protein Crystals

Memb-PASS™ *Membrane Protein Crystallization*

The patent-pending **Memb-PASS™** technology allows a quick selection of the best detergent complex for your membrane protein and accelerates the process of crystallization.[1]

Comprising three simple steps, Memb-PASS™ helps you to save time and money!

For detailed manuals and screen compositions please refer to: **www.jenabioscience.com/memb-pass**

Reference

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

Jena Bioscience GmbH
Loebstedter Str. 80
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

20 Jahre
Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK)

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE 1991–2012

RÜCK- UND AUSBLICK

1. Vorwort des Vorsitzenden (Wolfgang Schmahl, München)

Einundzwanzig Jahre Deutsche Gesellschaft für Kristallographie. Ein junges Datum für eine Wissenschaft, die auf Wurzeln in der Steinzeit Anspruch erheben kann, deren Erkenntnisse schon für die Erzgewinnung über Kupfer-, Bronze- und Eisenzeit unabdingbar waren, und die allerspätestens seit Johannes Kepler's „*Vom sechseckigen Schnee*" (1611) im neuzeitlichen Wissenschaftsgefüge präsent ist. Aber dieses junge Datum hat nichts mit Wissenschaft, sondern mit Politik zu tun – einer kulturellen Aktivität, die im Allgemeinen weit kurzlebigeren Paradigmen folgt, als Wissenschaft (was nicht heißen soll, dass es keine langlebigen ethischen Maßstäbe gäbe, denen man folgen könnte). Politisch veränderte sich in Deutschland in den Jahren um 1989 sehr viel zum Besseren. Und nach der überraschend schnellen Wiedervereinigung der beiden Teile Deutschlands mit Hilfe der „Beitrittslösung" bemühten sich auch alle kulturellen Einrichtungen um ein Zusammenkommen nach Jahrzehnten einer politischen, physischen und unmenschlichen Teilung. Und da gab es durchaus auch andere strukturelle Modelle als den „Beitritt", und es gab die Hoffnung, dass das Ganze mehr als die Summe seiner beiden Teile werde. Für die Kristallographie – wie für manche andere kulturelle Einrichtung – entstand damals auch ein „Sachzwang". Das Weltbild, das die Menschheit als Menge von Nationalstaaten definiert, machte es unumgänglich: Die beiden existierenden „Adhering Bodies" der International Union of Crystallography im Deutschland des Jahres 1991 mussten und wollten sich zur Einheit finden. Denn „es kann nur einen geben" – bei der IUCr. Der Vereinigungsprozess gestaltete sich schwierig. Gegen die Vereinigung war niemand. Nur die Struktur ließ sich mit direkten Methoden nicht lösen. Es hätte weitergehen können wie vorher im Westen: als interdisziplinäre Arbeitsgemeinschaft Kristallographie (AGKr), ein *Joint Venture* dreier größerer naturwissenschaftlicher Gesellschaften – der Gesellschaft Deutscher Chemiker, der Deutschen Physikalischen Gesellschaft und der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft. Oder – wie im Osten – als wissenschaftlich eigenständige kleine, feine „Vereinigung für Kristallographie" (VFK), sogar mit eigenem Studiengang, worum so mancher Wessi die Ostdeutschen beneidete. In zum Teil hitzigen, ja bis zu gemeinen Wort- und Schriftbeiträgen diskutierte man damals die verschiedenen denkbaren Modelle. Ich erinnere mich präzise, dass ein damals gebrauchtes „Argument" wörtlich lautete: *Ein Standpunkt ist ein Gesichtskreis vom Radius Null.* Diese Weisheit ist – aus feiner kristallographischer Sicht betrachtet – eine triviale Eigenschaft eines euklidischen Realraums; man hätte damals schon wissen müssen, dass auch quasi bei Kristallen nicht alles euklidisch zugeht. Das Beitrittsmodell der hohen Politik wurde für die Kristallographie mit knapper Mehrheit verworfen, es kam zur Gründung der DGK als eigenständige Gesellschaft, bei der Elemente der AGKr-Struktur und der VFG-Struktur auf Augenhöhe verknüpft und vereinigt wurden.

Sind wir nun volljährig?

Schauen wir auf die Themen und Beiträge unserer Jahrestagungen, muss man sagen, dass sich die Kristallographie in der DGK sehr stark methodisch definiert. Aber die wenigsten der

Menschen, die weltweit diese Methode für ihre Forschung einsetzen – wenn auch mit mehr oder weniger Tiefgang – würden sich als Kristallographen bezeichnen. Versteht man Naturwissenschaft als ein komplexes, heterogenes, (thermo)dynamisches System, so ist man geneigt, es nach Komponenten, Phasen und Freiheitsgraden zu analysieren. Kristallographie als Komponente ist in vielen Phasen dieses Systems präsent – in den Geowissenschaften, in der Chemie, der Biologie, der Physik, der Werkstoffkunde (Materialwissenschaft ist ein Gefüge, das viele dieser Phasen enthält). Die eigene Phase „Kristallographie" ist ein kleiner Zwickel im Phasenraum, der sich nur dann stabil im System hält, wenn die großen Phasen dafür genug Substanz übrig lassen. Und Prozesse, die an den Grenzen zwischen den Phasen ablaufen, sind wissenschaftlich zwar sehr reizvoll – und vielleicht die interessantesten überhaupt – aber hier sind ja die Freiheitsgrade stets eingeschränkt, wie man aus der Phasenregel weiß. Volljährig im Sinne von unabhängig können wir in diesem Gefüge nur mühsam werden, denn wir bleiben abhängig von den Prozessen in den angrenzenden Phasen, wie die Wahl der DFG-Fachkollegien kürzlich gezeigt hat. Die Kristallographie hat also nicht allein das berühmte Phasenproblem bei den Interferenzmethoden. Die Arbeitskreise der DGK sind ein starker Motor bei der empirischen Lösung unseres Phasenproblems im Wissenschaftsraum, die unsere Sichtbarkeit systematisch erhöhen (können).

Mit dem Ausruf des „International Year of Crystallography 2014" durch die Vereinten Nationen erfuhr die Kristallographie einen Ritterschlag, der natürlich Anerkennung und Mahnung zugleich ist, denn wir stehen nun auf Augenhöhe mit Stichworten wie z. B. „Chemistry" (Intl. Year 2011) und „Gorilla" (Intl. Year 2009). Also verstehen wir – die DGK – uns nun wirklich als volljährig.

Besonders Peter Paufler sei gedankt für die Zusammenstellung dieses Überblicks über 20(+1) Jahre Geschichte der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, und ebenso Norbert Sträter für die Ermittlung und Bereitstellung des sehr umfangreichen Datenmaterials, sowie Leonore Wiehl, Bernd Müller, Wolfgang Neumann, Helmuth Zimmermann, Hartmut Fueß, Wulf Depmeier, die beigetragen haben.

Wolfgang W. Schmahl
München, im Dezember 2012

2. Vom schweren Anfang (Heinz Schulz, München)

Heinz Schulz war der erste Vorsitzende der DGK. Sein Beitrag erscheint in einem der folgenden Hefte der DGK-Mitteilungen.

3. Über das Zusammenwachsen (Peter Paufler, Dresden)

3.1 Von den Anfängen

So wie die Jahrestage der staatlichen Wiedervereinigung Deutschlands regelmäßig zum Anlass genommen werden, die Überwindung jener Unterschiede zu beurteilen, die erst nach 1945 zwischen Ost und West durch die willkürliche Teilung entstanden waren, so kann man sehr speziell auch nach der Annäherung der Berufsgruppe der Kristallographen in den vergangenen mehr als 20 Jahren unter dem Dach der DGK fragen. Und da stellt sich naturgemäß zunächst die Frage nach den Anfängen deutscher kristallographischer Vereinsbildung überhaupt und der unterschiedlichen Entwicklung in West und Ost.

Den Anstoß gab die Gründung der International Union of Crystallography (IUCr) am 07.04.1947, denn Länder, die in der IUCr mit Stimmrecht vertreten sein wollten, mussten eine Körperschaft (‚Adhering Body') bilden, die die Vertreter des Landes zur Generalversammlung der IUCr bestimmte. Als solche wurde am 25.08.1950 in Göttingen die ‚Sektion Kristallkunde' innerhalb der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) eingerichtet. Die Gründung einer Deutschen Gesellschaft für Kristallographie wurde zu diesem Zeitpunkt bewusst vermieden. Für Hintergründe und weitere Einzelheiten des historischen Geschehens sei auf Berichte von Horst Küppers verwiesen [1]. Man musste aber nicht Mitglied der DMG sein, um als Mitglied der Sektion Kristallkunde (SK) aufgenommen zu werden.

3.2 Kristallographen in West und Ost zunächst vereint

Auf der III. Generalversammlung vom 21.bis 28.07.1954 in Paris wurde die Bundesrepublik Deutschland in die IUCr mit dem ‚Adhering Body' SK aufgenommen [2]. Obwohl es zu diesem Zeitpunkt bereits zwei deutsche Staaten gab, fanden sich die Kristallographen aus West und Ost noch über die SK in der IUCr gemeinsam repräsentiert. Das widersprach dem Bestreben der DDR-Regierung nach eigener staatlicher Anerkennung. Von nun an wurde die Fachwelt der Kristallographen zunehmend dadurch in den Kalten Krieg hinein gezogen, dass die DDR-Regierung trotz mancher Fehlschläge das Ziel der vollständigen Trennung ost- und westdeutscher Wissenschaftsorganisationen beharrlich verfolgte und dieses dann auch 15 Jahre später 1969 mit der Aufnahme der Deutschen Vereinigung für Kristallographie (DVK) der DDR als getrenntes Mitglied der IUCr durch die VIII. Generalversammlung in Stony Brook (USA) erreichte.

Eine wichtige Etappe auf diesem Weg war die organisatorische Teilung der deutschen Kristallographen auf Vereinsebene durch Gründung der DVK, die sich ab 1973 Vereinigung für Kristallographie der DDR (VFK) nannte, im Jahre1965. Darüber liegt ein Bericht aus der Sicht unseres Ehrenmitglieds Ursula Steinike vor [3]. Für Einzelheiten der z. T. komplexen Vorgänge vgl. auch [1]. Da diese Gründung ein Auftragswerk der DDR-Politik war, behielt diese auch die Kontrolle über ihr Instrument mittels einer hauptberuflichen Verwaltung der Gesellschaft für Geologische Wissenschaften in Ostberlin. Der zuständige Sekretär J. Lamprecht hat 1990 einen Bericht zur Gründung der DVK/VFK aus Sicht der Sozialistischen Einheitspartei Deutschlands (SED) gegeben, der die Arbeit von 25 Jahren bilanziert und in den die damals üblichen ideologischen Bewertungen der politischen Lage einflossen [4]. Vom gleichen Standpunkt aus hat H. Neels nach 20 Jahren des Bestehens der VFK den jüngeren Mitgliedern die politischen Argumente der SED vorgetragen [5].

3.3 Politisch induzierte Trennung 1969, Entwicklung in der DDR

Mit der eigenständigen Vertretung in der IUCr ab 1969 erreichte eine politisch motivierte Kampagne ihr vorläufiges Ziel, die Zweistaatlichkeit für das Ausland als Normalzustand darzustellen, mit dem sich die Wissenschaftler beider Teile Deutschlands arrangiert haben. Tatsächlich wuchs die Unzufriedenheit der DDR-Wissenschaftler über die Abgrenzungsfolgen, wie Beschränkungen der Reisefreiheit, des Brief- und Telefonkontaktes, des Presseaustauschs bis hin zu Importbeschränkungen von Computertechnik in den 70er und 80er Jahren ständig weiter an.

Der Eiserne Vorhang, seit 1961 streckenweise auch buchstäblich realisiert, hatte nicht nur die bekannte Entfremdung in allgemeinen Lebensgewohnheiten der Deutschen zu beiden Seiten

zur Folge, sondern führte auch zu unterschiedlicher Entwicklung der kristallographischen Landschaft, die man zunächst als systemunabhängig anzusehen geneigt wäre. Er grenzte aber ein Gebiet freier Marktwirtschaft von dem zentraler Planwirtschaft und eine Zone hoher Meinungsfreiheit von einer solchen mit stark eingeschränkter ab. Und das greift tief in das Wissenschaftsleben ein. Während das Fach Kristallographie in der BRD in den 60er Jahren dank großzügiger Förderprogramme bei der Einrichtung und Ausrüstung neuer Lehrstühle [1] bald den Anschluss an die internationale (d. h. vor allem angelsächsische) Forschung fand, mussten die Fachvertreter in der DDR mit Einschränkungen wegen Nichtkonvertierbarkeit der Währung (Importe von Geräten, Fachliteratur), mit Beschränkungen von Reisen ins westliche Ausland, mit Behinderungen wissenschaftlicher Veranstaltungen im Inland und des wissenschaftlichen Austauschs mit dem Ausland (durch politische Kontrollgremien) usw. zurechtkommen. Embargobestimmungen des Westens (die für strategische Fragen umgangen wurden) trafen den zivilen Forscher zusätzlich.

Wenn unter diesen erschwerten Bedingungen dennoch niveauvolle Wissenschaft betrieben werden konnte, dann ist das vor allem folgenden Umständen zuzuschreiben: (i) Wissenschaft diente als willkommener Rückzugsraum für diejenigen, die der permanenten politischen Vereinnahmung entfliehen wollten. Materieller Mangel stimulierte Improvisation und forderte Einfallsreichtum heraus. (ii) Die DGK/VFK und verwandte wissenschaftliche Körperschaften entfalteten im Bewusstsein der momentanen Ohnmacht gegenüber dem Eisernen Vorhang ein reges breit gefächertes Veranstaltungsleben unter Einbeziehung von Partnern aus Ländern des Ostblocks. Thematisch bestand eine enge Rückkopplung mit Schwerpunktthemen im Westen, dennoch bildeten sich auch allmählich eigene Schwerpunkte heraus (vgl. dazu auch [6]). (iii) Studien- und Weiterbildungsaufenthalte für Studenten und Wissenschaftler fanden an Hochschulen und Forschungsinstituten der gleichen Länder statt, vorwiegend aber der damaligen Sowjetunion, Polens, der Tschechoslowakei, Ungarns und Bulgariens. Sie erfüllten die Funktion der Auslandsstudien, Postdoc-Aufenthalte und Sabbaticals im Westen mit der Einschränkung, das Englische als internationale Wissenschaftssprache nur aus zweiter Hand vermittelt zu haben. (iv) Der Eiserne Vorhang hatte in Wahrheit zahlreiche Löcher, die zum einen von Verwandten und Freunden im Westen zur Versorgung ihrer Partner im Osten mit Mangelartikeln aller Art etwa auf dem Postweg oder über direkte Besuche genutzt wurden, die zum anderen Rundfunk und Fernsehen sowie den in den wissenschaftlichen Bibliotheken in begrenztem Umfang vorhandenen Fachzeitschriften des Westens zum Informationstransfer dienten.

Dass die Entwicklung der kristallographischen Landschaft in der DDR teilweise eigene Züge annahm und von daher nach der Wiedervereinigung überhaupt nach dem Zusammenwachsen gefragt werden kann, sei an Beispielen charakterisiert. Das Fach Kristallographie war nach dem Kriege im Osten traditionsgemäß über die mineralogischen Lehrstühle an den Universitäten (Ost)Berlin, Leipzig, Halle, Jena, Rostock, der Bergakademie Freiberg und der TH Dresden vertreten mit der Einschränkung, dass einige Lehrstühle längere Zeit unbesetzt blieben und die Kristallographie eher auf dem Niveau der Kristallbeschreibung für die ‚Allgemeine Mineralogie' stattfand. Das änderte sich nach 1952 mit Berufung von Will Kleber an die Humboldt-Universität in mehrfacher Hinsicht. Einmal fasste er das Gebiet der Kristallographie sehr weit, stellte mit dem Lehrbuch ‚Einführung in die Kristallographie' (ab 1956 mit zahlreichen Überarbeitungen [7]) ein das Fach definierendes sowie über die Mineralogie hinaus bekannt machendes Hilfsmittel für die Lehre bereit und öffnete die kristallographische Forschung in Richtung Materialwissenschaft. Er schuf innerhalb der Mineralogie zwei Ausbildungsrichtungen: die Kristallographie und die spezielle Mineralogie. Für Einzelheiten der Entwicklung sei auf einen Bericht von Manfred Schenk verwiesen [8]. Mit der Berufung von Hermann Neels auf den Lehrstuhl für Mineralogie der Universität

Leipzig im Jahre 1960 hatte W. Kleber einen wissenschaftspolitisch aktiven Partner in Sachen Öffnung der kristallographischen Forschung für die industrielle Produktion gewonnen. Die III. Hochschulreform der DDR 1968/69, in deren Verlauf das Mineralogie-Studium in der DDR eingestellt werden musste, eröffnete andererseits die Chance der Einrichtung eines fünfjährigen Grundstudiengangs Kristallographie mit dem Abschluss des Diplom-Kristallographen, wenn auch nur auf die Humboldt-Universität zu Berlin (Kleber) und die (Karl-Marx-)Universität Leipzig (Neels) beschränkt. An der Konzeption wirkte Kleber bis zu seinem Tode 1970 noch mit. 1975 bestätigte das zuständige DDR-Hochschulministerium das Konzept der Kristallographie als materialwissenschaftlich orientierter Naturwissenschaft mit den Lehrgebieten ‚Geometrisch-strukturelle Kristallographie', ‚Chemische Kristallographie', ‚Physikalisch-chemische Kristallographie', ‚Physikalische Kristallographie', ‚Technische Kristallographie' und ‚Kristallographische Praktika' [8]. Der mathematisch-physikalische Anspruch war vergleichsweise hoch, ohne dass etwa die spezielle Mineralogie und Petrographie vernachlässigt worden wären. Mit dem Diplomthema konnten die Studierenden dann ihrer Neigung zu dem einen oder anderen Teilgebiet Ausdruck verleihen. Die Zahl der Studierenden mit diesem Abschluss war planmäßig auf etwa 10 pro Jahr in Berlin und Leipzig begrenzt. Nicht nur die Studienplätze waren staatliche Plangrößen, sondern auch die Arbeitsstellenangebote für die Absolventen.

Zu den ‚kristallographisch arbeitenden' Wissenschaftlern in Lehr- und Forschungseinrichtungen gehörten neben Geowissenschaftlern wie auch im Westen Fachkollegen aus Chemie, Physik, Werkstoffwissenschaft u. a. Es fand eine lebhafte Lehrbuch- und Monographien-Produktion zu kristallographischen Themen mit rund 160 Titeln statt, die Joachim Bohm für den Zeitraum bis 1990 akribisch zusammengestellt hat [9] und die teilweise auch Leser und Verleger außerhalb der DDR fanden.

Die Veröffentlichung wissenschaftlicher Ergebnisse in Zeitschriften des Westens wurde für DDR-Wissenschaftler nach 1961 zunehmend genehmigungspflichtig und eingeschränkt, so dass die Gründung der Fachzeitschrift ‚Kristall und Technik' (später unter dem Titel ‚Crystal Research and Technology') im Akademie-Verlag (Ost-)Berlin durch W. Kleber und H. Neels eine wichtige Verbesserung der Situation für Kristallographen brachte, die bald auch von Autoren aus dem RGW genutzt wurde. Sie ist heute unter der Chefredaktion unseres Mitglieds Wolfgang Neumann international etabliert.

Betrachtet man die Forschungsaktivitäten in der DDR während der vollständigen Trennung 1961–1990, dann fällt die Dominanz jener Institute auf, die Kristallographie nicht im Titel führen. Im Kernbereich der Strukturaufklärung lag ein deutliches Übergewicht der Pulverdiffraktometrie vor. K. Boll-Dornberger hatte zwar 1958 eine frühe Initiative zur Etablierung der Einkristallstrukturanalyse durch Gründung eines Instituts für Strukturforschung unter dem Dach der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin gestartet [10], es blieb aber weitgehend allein. Seine Gründerin fiel politisch in Ungnade [11], was der Lobbyarbeit für diese Technik nicht gerade förderlich war. Sehr erfolgreich war sie wissenschaftlich mit ihren Arbeiten zur Beschreibung fehlgeordneter Strukturen durch partielle Deckoperationen. Sie hat auf diese Weise den Begriff und das Arbeitsgebiet der OD-Strukturen begründet [12].

Anders als im Westen wurden Entscheidungen über Forschungsförderung wesentlich von der Industrienähe abhängig gemacht. Unterstützung der Produktion erschien wegen deren chronischer Defizite Hauptziel der Forschung. Schon das Institut von Boll-Dornberger versuchte mit dem Bau von Geräten für die Einkristall-Diffraktometrie zu punkten [10]. Denn die erwähnten Valuta-Probleme behinderten die Anschaffung von Geräten westlicher

Herkunft und sorgten für eine starke Nachfrage nach Eigenbaugeräten von DDR-Werkstätten. Bald konnten auch Betriebe wie das Transformatoren- und Röntgen-Werk Dresden, die Freiberger Präzisionsmechanik, Carl-Zeiss-Jena u. a. für die Produktion von Geräten gewonnen werden, die man der kristallographischen Forschung und Lehre zuordnen kann. Infolge der geforderten Anwendungsnähe wurden ganz überwiegend Geräte für die Pulver- und Vielkristall-Diffraktometrie nachgefragt [13], die sich bald auch zu Exportschlagern (bzw. Tauschartikeln) in Länder des Rates für gegenseitige Wirtschaftshilfe (RGW) entwickelten. Die Hochschulen beteiligten sich an der Geräteentwicklung. Qualifizierungsarbeiten waren oft methodischen Inhalts.

Die VFK bildete 13 Arbeitsgruppen (Idealstruktur, Realstruktur und Dynamische Interferenztheorie, Mathematische Kristallographie, Ferroelektrika, Chemische Kristallographie, Kristallisation, Industrielle Kristallisation, Grenzflächen und dünne Schichten, Nichtkristalline und partiellkristalline Strukturen, Polarisationsmikroskopie, Texturen, EDV in der Kristallographie, Polykristallanalyse), die Diskussions- und Weiterbildungsveranstaltungen zwischen den insgesamt 25 Jahrestagungen im Zeitraum 1966 bis 1991 durchführten [3, 14]. Die Jahrestagungen standen jeweils unter einem thematischen Schwerpunkt, zu dem in der Regel auch ausländische Referenten eingeladen wurden. Die Zahl der Mitglieder der DGK/VFK stieg von 121 im Jahre 1965 auf 516 im Jahre 1991 [3].

Besonders rasant verlief (und verläuft noch) die internationale Entwicklung auf dem Gebiet der elektronischen Datenverarbeitung für die Kristallographie. Hier war der Hard- und Software-Stau am Eisernen Vorhang besonders dramatisch. Insofern verdient die ‚International Summer School on Crystallographic Computing' Erwähnung, die als erste dieser Art im Osten von der IUCr (11.–20.08.1986) an der Universität Leipzig durchgeführt wurde [15] und für die Teilnehmer aus der DDR und einigen angrenzenden RGW-Staaten zu einem sehr nachhaltigen Erlebnis wurde. Der Leiter der Schule, Prof. Henk Schenk (Amsterdam), hatte alle namhaften Fachvertreter als Tutoren für die Vorträge und Seminare verpflichtet, wobei die Schwerpunkte Pulvermethoden, Computer-Graphik und Datenbanken den Wünschen des lokalen Veranstalters besonders nahe kamen [16]. Die DDR-Behörden mussten gleich mehrfach über ihren Schatten springen: 1. Freie Einreise für Jedermann guten Willens (Knackpunkt damals: die Israeli), 2. Einreiseerlaubnis mit Personalcomputern (zu diesem Zeitpunkt für den Zoll höchst suspekt und mit Verpflichtung, die Hardware wieder auszuführen), 3. Erlaubnis der ‚On-line'-Datenübertragung zur ICSD nach Karlsruhe!

Dass am 19.08.1986 nach langwieriger Vorarbeit zu diesem Punkt 3 Günter Bergerhoff (Bonn) während der Übungen die Verbindung zwischen seinem Personalcomputer in Leipzig und dem Großrechner in Karlsruhe für drei Stunden über Modem bzw. Akustikkoppler und Telefonleitung aufrechterhalten konnte, war nicht nur ein Erfolg für die Veranstaltung, sondern darüber hinaus eine Pioniertat für die weitere Tunnelung des Eisernen Vorhangs. Dazu muss man wissen, dass die Genehmigung dafür vom Zentralkomitee der SED eingeholt werden musste und sich die Vorbehalte seitens der Staatssicherheit offenbar gegen die Unlesbarkeit der übertragenen Signale richtete. (Auf folgenden Kompromiss einigte man sich noch im Vorfeld der Auseinandersetzungen: Man nutze eine bereits bestehende Datenleitung des Rechenzentrums der Uni-Leipzig zur (damals politisch unbedenklichen) TU Wien und gehe von dort nach Karlsruhe. So hat es die zuständige Überwachung der Telefonleitungen des Grenzübergangs zur BRD weiterhin nur mit normalen Sprachsignalen zu tun.)

Die während der Schule geknüpften persönlichen Kontakte können als Musterbeispiel für eine sehr nachhaltige Forschungsförderung junger Mitarbeiter des Ostens durch Fachkollegen aus dem Westen auf individueller Basis gelten. Die stimulierende Wirkung der Schule lässt sich

auch später noch nachweisen. Der Besuch von Vortragenden westdeutscher kristallographischer Institute im Leipziger Kristallographischen Kolloquium erfuhr in den folgenden Jahren eine lebhafte Zunahme (waren es ab 1981 bis zur Computing School 1986 W. Fischer, H. Follner, E. Koch und S. Haussühl, während der Schule G. Bergerhoff und C. Krüger, so durften zwischen 1987 und 1990 noch vor der staatlichen Wiedervereinigung P. Böttcher, K. Fischer, W. Fischer, H. Wondratschek, E. Tillmanns, H. Schulz, W. Depmeier, Th. Hahn und H. Klapper einreisen.) Diese Vorboten des Zusammenwachsens auf unterer Ebene profitierten von der vergleichsweise liberaleren Atmosphäre in den Amtsstuben der Messestadt.

3.4 Wiedervereinigung auf internationaler Bühne und im nationalen Rahmen

So bedurfte es nach den ersten freien Wahlen im März 1990 in der DDR keines Beschlusses einer Partei, das Stimmverhalten der Vertreter des Nationalkomitees (NK) der DDR in der XV. Generalversammlung der IUCr (19.–28.07.1990) in Bordeaux [17] mit denen des NK der BRD zu harmonisieren. Und die widernatürliche Trennung beider NKs fand während der XVI. Generalversammlung (21.–29.08.1993), also nach 24 Jahren, in Beijing endgültig ihr Ende [18]. Die gemeinsame Vertretung in der IUCr und in der zwischenzeitlich gegründeten Euopean Crystallographic Association (ECA) kann in der Folgezeit auf eine gedeihliche Zusammenarbeit mit diesen internationalen Körperschaften zurückblicken. Dazu sei auf die Berichte von Wulf Depmeier [19] und Hartmut Fueß [20] verwiesen.

Eine förmliche Voraussetzung war die Bildung einer gemeinsamen nationalen Körperschaft. Schon 1990 nahmen die Vorsitzenden der AGKr und der VFK Wolfram Saenger und Ursula Steinike deshalb Kontakt zur Bildung einer Kommission zur Erarbeitung des Entwurfs eines Statuts für die neue Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) auf. Neben den Vorsitzenden gehörten ihr Jürgen Felsche, Heinz Schulz (beide AGKr), Joachim Bohm und Hans-Reiner Höche (beide VFK) an. Nach intensiver Arbeit und teilweise kontroversen Diskussionen wurde am 12.03.1991 auf einer gemeinsamen Versammlung von Mitgliedern der AGKr und der VFK in München das Statut angenommen und die neue Gesellschaft DGK gegründet (vgl. auch [21]). Zum ersten Vorsitzenden wurde Heinz Schulz gewählt, der unter hohem persönlichem Einsatz die zahlreichen subjektiven und juristischen Hürden überwinden konnte [22]. Zusammengefunden hatten sich von den 978 AGKr- und 516 VFK-Mitgliedern in der DGK 1065 neue Mitglieder. Eine Ursache für den Schwund war die stärkere materialwissenschaftliche Orientierung der VFK-Mitglieder, von denen sich einige unter den neuen gesamtdeutschen Möglichkeiten anderen Gesellschaften anschlossen (z. B. DGM, DPG).

Bei der Beurteilung dieses Vereinigungsprozesses von Wissenschaftlern aus West und Ost darf man nicht außer Acht lassen, dass sich im Osten gleichzeitig eine grundlegende Transformation des Staatswesens vollzog, was insbesondere von der Wiedereinführung der Länder und der Restrukturierung aller Hochschulen begleitet wurde. Die DDR war dem Grundgesetz beigetreten, und die Strukturänderungen im Hochschulwesen orientierten sich quantitativ an Vergleichsdaten aus dem Westen. Damit wurden zwar an den Universitäten rund 50 % der Mitarbeiterstellen gestrichen, aber – dem gestörten Fächerkanon zuliebe – zugleich neue Professuren eingerichtet. Das betraf auch die Mineralogie/Kristallographie [23]. Im Zuge der umfangreichen Neustrukturierungen des außeruniversitären Bereichs beim Zusammenwachsen von West und Ost gelang es indessen nicht, dem Forschungsgebiet Kristallographie einen gebührenden Platz zuzuweisen, etwa als Max-Planck-Institut. Vielmehr fand sich die kristallographische Forschung in materialwissenschaftlichen oder biochemischen Institutionen als Juniorpartner wieder. Die beiden Universitätsinstitute in

Berlin und Leipzig, die in der DDR das Fachgebiet Kristallographie repräsentierten, verstanden sich ausdrücklich als den Materialwissenschaften nahestehend [23, 24].

Die Unterschiede in den Studiengängen Kristallographie in West und Ost verlangten 1990 ebenfalls nach einer Vereinheitlichung, denn die Fortführung des bisherigen Grundstudiengangs Kristallographie an nur zwei Universitäten und damit in Deutschland das Angebot zweier unterschiedlicher Wege zum Diplom schien von vornherein unzweckmäßig. Aber auch die Alternative, mit der einige westdeutsche Kollegen einverstanden gewesen wären, einen gesamtdeutschen Grundstudiengang Kristallographie neben dem Grundstudiengang Mineralogie (dann ohne Kernfach Kristallographie) einzuführen, hatte keine Aussicht auf Realisierung, weil einmal zur gleichen Zeit die Nachfrage nach dem Mineralogie-Studium zu sinken begann und zusätzlich Konkurrenz gefürchtet war und zum anderen der wesentliche Unterschied des neuen Studiengangs in dem höheren Anteil an Mathematik und Physik bestehen sollte, dem die Mehrzahl der mineralogisch geprägten Fachkollegen misstrauisch gegenüber stand. So blieb es zunächst weitgehend bei dem Zugang über das Mineralogie-Studium. Die wachsende Bedeutung der Forschung an biologischen Molekülen lenkte Seiteneinsteiger aus den Biowissenschaften zur Kristallographie ebenso wie der schnell wachsende Bedarf an neuen Materialien Studierende von Physik, Chemie und Materialwissenschaft, ohne die Bezeichnung ‚Kristallographie' immer zu gebrauchen. Die sich aus dieser besonderen Stellung des Faches ergebenden Zukunftsperspektiven bzw. Herausforderungen an die Jugend und DGK-Mitgliedschaft hat Karl Fischer in einem ausführlichen Beitrag dargestellt [25]. Die Diskussion darüber hält an und wird von der nachfolgenden Generation aufgriffen [26].

Blickt man auf die vergangenen 20 Jahre, dann lässt sich das Zusammenwachsen überall deutlich wahrnehmen. Aus den Daten in Abschnitt 13 kann man ablesen, dass die Vorstands- und die Arbeitskreis-Tätigkeit sowohl von Vertretern der ehemaligen AGKr als auch der VFK und, besonders erfreulich, inzwischen zunehmend von Nachgeborenen übernommen wird. Mit der Wahl von Freiberg als Tagungsort 2013 sind die neuen Bundesländer auch hier in die Lastenverteilung angemessen integriert (30 %).

[1] H. Küppers: Chronologischer Abriß der Entwicklung der Sektion Kristallkunde der DMG zur Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (Tagungen und Vorsitzende). Mitteilungen d. DGK 6 (1993) 33–35. Die Geschichte der „Sektion Kristallkunde der DMG". Mitteilungen d. DGK 22 (2001) 20–28.
[2] Acta Crystallographica 7 (1954) 609.
[3] U. Steinike: Zur Geschichte der Vereinigung für Kristallographie (VFK) (1965 bis 1991). Mitteilungen d. DGK 22 (2001) 29–39.
[4] J. Lamprecht: Zur Entwicklung der Vereinigung für Kristallographie (VFK). Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft 1–2, 54–94.
[5] H. Neels: Zur Vorgeschichte der Gründung der VFK. Mitteilungen d. VFK 20 (1985) Heft 3, 3–7.
[6] Entwicklung der Kristallographie in der DDR. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft1–2, 5–94.
[7] W. Kleber, H.-J. Bautsch, J. Bohm, D. Klimm: Einführung in die Kristallographie. 19. Aufl., Oldenbourg, München 2010.
[8] M. Schenk: Ausbildung und Einsatz von Kristallographen. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft 1–2, 7–11.
[9] J. Bohm: Kristallographische Literatur. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft 1–2, 71–83.
[10] E. Höhne, L. Kutschabsky: Röntgenstrukturanalyse von Einkristallen. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft 1–2, 24–27.
[11] U. Steinike: Katharina Boll-Dornberger geb.Schiff. Mitteilungen d. DGK 24 (2002) 62–75.
[12] K.-O. Backhaus, H. Grell: Zur Entwicklung der OD-Struktur-Theorie. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft1–2, 32–34.
[13] H. Oettel: Zur Entwicklung der röntgendiffraktometrischen Vielkristallanalyse. Mitteilungen d. VFK 25 (1990) Heft 1–2, 35–39.
[14] Mitteilungen d. VFK 20 (1985) Heft 3, 8–23.

[15] Acta Crystallographica A44 (1988) 595.
[16] Crystallographic Computing. Proceedings of the International Summer School on Crystallographic Computing held in Leipzig, 11–20 August 1986. Ed. by P. Paufler, V. Geist and D. Klimm. Karl-Marx-Universität Leipzig 1986.
[17] Acta Crystallographica A48 (1992) 353–405.
[18] Acta Crystallographica A51 (1995) 596–648.
[19] W. Depmeier: Beitrag in diesem Heft (20 Jahre DGK, Abschnitt 10.1).
[20] H. Fueß: Beitrag in diesem Heft (20 Jahre DGK, Abschnitt 10.2).
[21] P. Paufler: 10 Jahre Deutsche Gesellschaft für Kristallographie. Mitteilungen d. DGK 22 (2001) 11–19.
[22] H. Schulz: siehe gesonderter Bericht in Vorbereitung (20 Jahre DGK, Abschnitt 2).
[23] P. Paufler: Zum Neuaufbau materialorientierter kristallographischer Forschung in Sachsen. Mitteilungen d. DGK 5 (1993) 18–19.
[24] M. Schenk: Kristallographie-Ausbildung an der Humboldt-Universität zu Berlin. Mitteilungen d. DGK 5 (1993) 20.
[25] K. F. Fischer: Bemerkungen zu Zukunftschancen der Kristallographie in Deutschland. Mitteilungen d. DGK 22 (2001) 40–55.
[26] U. Heinemann, D. Meyer: 2. Diskussionsforum zur Zukunft der Kristallographie. Mitteilungen d. DGK 38 (2009) 29–32.

4. Die Arbeitskreise der DGK (Bernd Müller, Jena)

Die Gründermütter und -väter der DGK haben den Arbeitskreisen eine hohe Bedeutung für die Verwirklichung der wissenschaftlichen Aktivitäten zugemessen, indem diese in die Satzung schrieben (§ 14): *In der DGK bestehen Arbeitskreise, die sich bestimmten Gebieten der Kristallographie widmen. Die Arbeitskreise sollen die wissenschaftliche Entwicklung auf ihrem Gebiet eigenverantwortlich vorantreiben; hierzu gehört die Organisation eigener Veranstaltungen.*

Nach der aktuellen Satzung regelt eine Ordnung die Tätigkeit der Arbeitskreise: *Die Arbeitskreise erfüllen auf ihrem Gebiete der Kristallographie im weitesten Sinne die Zwecke der DGK gemäß § 2 der Satzung und dienen somit insbesondere dem wissenschaftlichen Erfahrungs- und Gedankenaustausch, der Weiter- und Fortbildung auf ihren Gebieten der Kristallographie, der Förderung von Forschung und Lehre der Kristallographie. Die Arbeitskreise können ihre Veranstaltungen durchführen als Kurse und Workshops zur Weiter- und Fortbildung insbesondere von jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern auf ihrem jeweiligen Gebiet, als wissenschaftliche Foren und Tagungen zum Erfahrungs- und Gedankenaustausch, in Form nationaler und internationaler Colloquien bzw. Workshops unter Beteiligung von Mitgliedern der DGK.*

Damit kommt den Arbeitskreisen – neben den Jahrestagungen – die wesentliche Aufgabe zu, das wissenschaftliche Leben der DGK zum Wohle der Kristallographie und der Allgemeinheit auszufüllen.

Die Arbeitskreise der DGK sind hauptsächlich aus den Arbeitskreisen der AGKr hervorgegangen, bis auf die Arbeitskreise Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen und Mikroskopie, die aus der VFK übernommen wurden. Zur Zeit wirken in der DGK 18 Arbeitskreise, die sich in die strukturell und fachlich orientierten Arbeitskreise Biologische Strukturen (AK 1), Nichtkristalline, Partiellkristalline und Nanokristalline Strukturen (AK 4), Kristallphysik (AK 5), Molekülverbindungen (AK 6), Theoretische Kristallographie (AK 9), Mineralogische und Technische Kristallographie (AK 15), Aperiodische Kristalle (AK 16), Grenzflächen (AK 18) und Kristallchemie (AK 19) sowie in die methodisch orientierten Arbeitskreise Hochdruck-Kristallographie (AK 2), Elektronenmikroskopie (AK 3), Neutronenstreuung (AK 7), Mikroskopie (AK 10), Hochauflösende Röntgenstreuung und

Synchrotronstrahlung (AK 11), Spektroskopie (AK 12), Pulverdiffraktometrie (AK 13), Computerkristallographie (AK 14) und Kristallographie in der Lehre (AK 17) einteilen lassen.

In der folgenden Tabelle werden einige Daten zu den Arbeitskreisen kurz zusammengefasst. Die Anzahl der Mitglieder (in Klammern) steht für die Jahre 2011 und 2008. Sie zeigt das Interesse der Mitglieder zu dem Thema des jeweiligen Arbeitskreises an und die Differenz zwischen beiden die Interessentendenz neuer Mitglieder.

Das meiste Interesse besteht bei den methodischen Arbeitskreisen an der Pulverdiffraktometrie (213), der wohl am meisten benutzten Methode der Kristallographie, gefolgt von der Neutronenstreuung (161) und der Synchrotronstrahlung (94), also den Strahlungsarten, welche in den Großforschungszentren betrieben und angeboten werden und im Wesentlichen auch der Diffraktometrie dienen. Die meisten Interessenbekundungen bei den strukturell-fachlich orientierten Arbeitskreisen liegen für die Kristallphysik (156), Mineralogische und Technische Kristallographie (136) sowie die Biokristallographie (122) vor, wobei die beiden ersten die konventionellen und beständigen Anwendungsbereiche der Kristallographie repräsentieren und letzterer die modernen der Lebenswissenschaften. Die neuen Mitglieder bekunden ihr Interesse insbesondere an der Kristallchemie (+17), Synchrotronstrahlung (+15) und Kristallographie in der Lehre (+10).

Für die finanziellen Mittel, welche die Arbeitskreise für ihre Aktivitäten benötigen, wird auf Punkt 7.1 verwiesen.

Arbeitskreise der DGK (1991–2012) (Stand Dezember 2012)		
Nr./Bezeichnung (Mitgliederzahl 2011; 2008)	**Sprecher**[1]	**Aktivitäten**
AK 1 Biologische Strukturen (122; 115)	Yves Muller, Udo Heinemann, Hans D. Bartunik, Dirk Heinz, Manfred Weiss, Ralf Ficner	Eigene Arbeitskreistagungen: Zweijährlich Workshop „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ mit 20 bis 30 Teilnehmern. Auf den Jahrestagungen jährlich AK-Treffen als Mikrosymposien.
AK 2 Hochdruck-Kristallographie (54; 55)	Ulrich Schwarz, Hans Ahsbahs, Stefan Werner	Unregelmäßig Treffen auf den Jahrestagungen.
AK 3 Elektronenmikroskopie (58; 54)	Hans-Joachim Kleebe, Matthias Rodewald	Eigene Arbeitskreistagungen werden nicht durchgeführt.
AK 4 Nichtkristalline, Partiellkristalline und Nanokristalline Strukturen (91; 86) In den AK 4 wurde der AK Fehlordnungen der AGKr (Martin Trömel) integriert. Erweiterung auf das Fachgebiet Nanokristalline Strukturen erfolgte im Jahre 2010.	Jürgen Horbach, Bernd Müller	Eigene Arbeitskreistagungen werden regelmäßig jährlich zu bestimmten Themen nichtkristalliner Strukturen mit 20 bis 40 Teilnehmern durchgeführt. Mikrosymposien unregelmäßig auf Jahrestagungen.
AK 5 Kristallphysik (156; 150)	Eiken Haussühl, Siegfried Haussühl, Ladislav Bohatý, Wolfgang Schmahl, Jürgen Schreuer	Eigene Arbeitskreistagungen werden seit 2002 nicht mehr durchgeführt. Auf Jahrestagungen unregelmäßig Mikrosymposien.
AK 6 Molekülverbindungen (99; 103)	Christian Lehmann, Gerhard Müller	Unregelmäßig Mikrosymposien auf Jahrestagungen (mit AK 19). Beteiligung an Tagungen: jährlich an „Kieler Workshop über Fehler, Fallen und Probleme in der Einkristallstrukturanalyse“

		(Christian Näther), Sommerschulen und Workshops des AK ChemKrist der GDCh FG Analytische Chemie.
AK 7 Neutronenstreuung (161; 163)	Martin Meven, Werner F. Kuhs, Götz Eckold	Zweijährlich eigene Arbeitskreistagungen an Neutronenstrahlquellen mit 20 bis 30 vorwiegend Jungwissenschaftlern zu Grundlagen und Experimenten. Zu Jahrestagungen unregelmäßig Satelliten-Workshops.
AK 8 Synchrotron-Strahlung (0; 0) 2004 mit dem AK 11 vereinigt	Kurt Hümmer, Holger L. Meyerheim, Rolf Köhler	
AK 9 Theoretische Kristallographie (78; 80)	Sibylle Gemming, Peter Paufler, Wolfgang Neumann, Elke Koch, Helmuth Zimmermann	Eigene Arbeitskreistagungen bis 2000 meist zweijährlich zur theoretischen und mathematischen Kristallographie mit 30 bis 40 Teilnehmern. Lehr- und Weiterbildungsmaterialen dieser Workshops sind nicht mehr erhältlich. Veranstaltung von Mikrosymposien unregelmäßig zu Jahrestagungen.
AK 10 Mikroskopie (44; 43)	N. N. (seit 2010), Jörg Trempler	Bis 2010 regelmäßig Einführungen in die Mikroskopie mit der Firma Carl Zeiss für 10 bis 20 Teilnehmer.
AK 11 Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung (94; 79) AK Realstruktur und dynamische Interferenztheorie der AGKr ist in den AK Hochauflösende Röntgen-Diffraktometrie, -Reflektometrie und -Topographie umbenannt worden und bei der Vereinigung mit dem AK 8 in Synchrotron-Strahlung und Topographie	Carsten Paulmann, Hans-Reiner Höche, Ulrich Pietsch, Dirk C. Meyer	Keine Arbeitskreistagungen. Unregelmäßig Mikrosymposien zu Jahrestagungen. Bis 2009 Beteiligung an der zweijährlichen Schule „High resolution diffraction“ in Smolenice (Slovak. Rep.), seit 2010 Beteiligungen an Workshops zur „Chemical Crystallography Beamline“ an der Petra III-Erweiterung.
AK 12 Spektroskopie (58; 59)	Michael Fechtelkord, Michael Fechtelkord	Regelmäßige Mikrosymposien zu den Jahrestagungen. Jährliche Beteiligung an den DMG-Doktorandenkursen zur Spektroskopie für Jungwissenschaftler mit 10 bis 20 Teilnehmern.
AK 13 Pulverdiffraktometrie (213; 210)	Robert E. Dinnebier, Walter Eysel, Jörg Peter Ihringer,	Keine Arbeitskreistagungen. Auf Jahrestagungen unregelmäßig Mikrosymposien. Beteiligung an Tagungen z. B. am Fraunhofer-ICT Pfinzstal Zeit- und temperaturaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie für In-situ-Untersuchungen.
AK 14 Computational Crystallography (82; 75)	Gerhard Raabe, Björn Winkler	Eigene Arbeitskreistagungen werden jährlich mit 20 bis 30 Teilnehmern durchgeführt. Mikrosymposien unregelmäßig auf Jahrestagungen. Beteiligung an Tagungen z. B. The Joint DMG, DGK and HVI Workshops.
AK 15 Mineralogische und Technische Kristallographe (136; 129) AK ist eine Vereinigung des AK Mineralogie und des AK Technische Kristallographie der AGKr	Herbert Pöllmann, Wolfgang Hofmeister, Walter Eysel, Horst Pentinghaus	Eigene Arbeitskreistagungen regelmäßig bis 2006. Mikrosymposien unregelmäßig auf Jahrestagungen. Beteiligung an Tagungen zur Baustoffanalytik zweijährlich seit 2006 mit 20 bis 30 Teilnehmern.

AK 16 Aperiodische Kristalle (75; 76) Wurde als AK Quasikristalle gegründet, umfasst seit vielen Jahren auch die inkommensurabel modulierte Strukturen und die Kompositkristalle.	Sander van Smaalen, Walter Steurer	Eigene Arbeitskreistagungen: International Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals, zweijährlich mit 20 bis 30 Teilnehmern. Regelmäßig Mikrosymposien auf Jahrestagungen.
AK 17 Kristallographie in der Lehre (48; 38)	Reinhard Neder, Reinhard Neder	Keine Arbeitskreistagungen. Unregelmäßig Mikrosymposien auf den Jahrestagungen.
AK 18 Grenzflächen (43; 40) AK wurde auf der Jahrestagung 2004 in Jena neu gegründet, da der AK Oberflächen, Grenzflächen und dünne Schichten (Wolfgang Moritz) der AGKr wegen Schwerpunktverlegungen seine Aktivitäten eingestellt hatte.	Guntram Jordan, Guntram Jordan	Eigener Workshop Oktober 2008 in München. Auf Jahrestagungen regelmäßig Mikrosymposien. Beteiligung an Tagungen: Short-Course (2006) in Hannover, Sommerschule (2008) in München.
AK 19 Kristallchemie (69; 52) AK wurde auf der Jahrestagung 2004 in Jena neu gegründet, da der AK Anorganische Verbindungen (Hans-Jörg Deiseroth) der AGKr nicht mehr funktionierte.	Thomas Schleid, Rainer Pöttgen	Eigene Arbeitskreistagungen werden nicht durchgeführt. Auf Jahrestagungen unregelmäßig Mikrosymposien (mit AK 6).

[1] Erste Zeile: Gegenwärtiger Sprecher. Darunter: Frühere(r) Sprecher.

5. Die Jahrestagungen (Norbert Sträter, Leipzig, Wolfgang Schmahl, München)

Jahrestagungen und Mitgliederversammlungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie					
Lfd. Nr. der Jahrestagung	**Zeit der Tagung**	**Ort der Tagung**	**Tagungsleiter**	**Vorsitzender der DGK**	**Teilnehmerzahl**
0	10.03. – 13.03. **1991**	Gemeinsame Tagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie und der Vereinigung für Kristallographie			
		München	Heinz **Schulz**	Heinz **Schulz**	500
1	09.06. – 12.06. **1992**	Mainz	Horst **Böhm**	Heinz **Schulz**	
2	10. 3. – 12.03. **1993**	Bochum	Hermann **Gies**	Heinz **Schulz**	400
ECM 15	28.08 – 02.09. **1994**	Dresden	Peter **Paufler**	Heinz **Schulz**	775
		(30.08.1994 Mitgliederversammlung)			
3	06.03. – 08.03. **1995**	Darmstadt	Hartmut **Fueß**	Hans **Burzlaff**	
4	11.03 – 14.03. **1996**	Marburg	Peter **Buck**	Hans **Burzlaff**	
5	10.03. – 12.03. **1997**	Hamburg	Ulrich **Bismayer**	Hans **Burzlaff**	402
6	02.03. – 05.03. **1998**	Karlsruhe	Kurt **Hümmer**	Gernot **Heger**	
7	08.03. – 10.03. **1999**	Leipzig	Klaus **Bente**	Gernot **Heger**	420
8	13.03. – 16.03. **2000**	Aachen	Gernot **Heger**	Gernot **Heger**	450
9	12.03. – 15.03. **2001**	Bayreuth	Sander **van Smaalen**	Peter **Paufler**	436

10	04.03. – 07.03. **2002**	Kiel	Wulf **Depmeier**	Peter **Paufler**	400
11	10.03. – 13.03. **2003**	Berlin	Wolfgang **Neumann**	Peter **Paufler**	440
12 mit DGKK	15.03. – 18.03. **2004**	Jena	Eckhart **Förster**, Bernd **Müller**, Rolf **Hilgenfeld**	Wulf **Depmeier**	693
13 mit DGKK	28.02. – 03.03. **2005**	Köln	Ladislav **Bohatý**	Wulf **Depmeier**	510
14	06.04. – 12.04. **2006**	Freiburg	Arne **Cröll**	Wulf **Depmeier**	412
15 mit DGKK	05.03. – 09.03. **2007**	Bremen	Reinhard X. **Fischer**	Wolfgang **Neumann**	473
16	03.03. – 06.03. **2008**	Erlangen	Andreas **Magerl**	Wolfgang **Neumann**	405
17	09.03. – 12.03. **2009**	Hannover	Josef-Christian **Buhl**, Claus **Rüscher**	Wolfgang **Neumann**	490
ECM 26	29.08. – 02.09. **2010**	Darmstadt	Hartmut **Fueß**	Udo **Heinemann**	1012
19 mit DMG und ÖMG	20.09. – 24.09. **2011**	Salzburg	Georg **Amthauer**	Udo **Heinemann**	456
20	12.03. – 15.03. **2012**	München	Wolfgang **Schmahl**	Udo **Heinemann**	456
21	19.03. – 22.03. **2013**	Freiberg	Dirk C. **Meyer**	Wolfgang **Schmahl**	

6. Die Mitglieder (Norbert Sträter, Leipzig)

Die DGK hat gegenwärtig 1096 Mitglieder (Tabelle 6.1). Kurz nach ihrer Gründung hatte die DGK im Februar 1993 1065 Mitglieder und die Mitgliederzahl ist über die Jahre sehr konstant geblieben (Tabelle 6.2). Man muss dabei allerdings berücksichtigen, dass einige Mitglieder nach Umzug an eine neue Arbeitsstätte der DGK verloren gehen und es nur in einigen Fällen gelingt, zu einem „verlorenen Mitglied“ später wieder Kontakt herzustellen.

Die Altersverteilung der Mitglieder (Tabelle 6.1) zeigt sehr erfreulich, dass die älteren Mitglieder der DGK die Treue halten und häufig auch nach dem Eintritt in den beruflichen Ruhestand weiter aktiv tätig sind. Offensichtlich ist aber auch, dass ein Defizit bei den Jungmitgliedern (20–40 Jahre) besteht. Es muss allerdings berücksichtigt werden, dass Mitglieder in der Regel erst zur Promotionsarbeit beitreten, häufig im Alter ab etwa 25 Jahre. Dennoch erscheint der Anteil der Doktoranden und Studenten mit 6,5 % (71 Mitglieder) erstaunlich gering. Die Zahl der Doktoranden, die sich mit kristallographischen Fragestellungen beschäftigt, dürfte sicherlich eine Größenordnung darüber liegen. Hier muss die Gesellschaft aktiver werden, um einen Beitritt für Doktoranden attraktiver zu gestalten. Der Mitgliedsbeitrag ist mit 10 € so gering, dass dort keine geeignete Stellschraube zu sehen ist. Es erscheint zum einen sinnvoll, für studentische DGK-Mitglieder eine ermäßigte Teilnahmegebühr für die Jahrestagungen anzusetzen, um auch finanzielle Anreize zu schaffen (wenn auch zuvorderst für die Reisebudgets der Arbeitsgruppenleiter). Auf der anderen Seite sollten vermehrt attraktive Angebote für Jungmitglieder in Form von Workshops angeboten werden. Die Gründung eines eigenen Arbeitskreises für Jungmitglieder könnte helfen, diese stärker in die DGK einzubinden und eigene Aktivitäten zu entfalten.

In Tabelle 6.3 ist der Besuch der letzten beiden Jahrestagungen der DGK statistisch analysiert worden. Der Besuch dieser Tagungen durch Studierende und Doktoranden ist erfreulich hoch: An der Tagung in München haben 114 studentische Teilnehmer im Vergleich zu 263 Vollzahlern teilgenommen. Allerdings waren nur 20 (18 %) der Studenten und Doktoranden auch Mitglied der DGK. Von den Vollzahlern waren dagegen 150 (57 %) DGK-Mitglied. Die DGK hat etwa 20 % weibliche Mitglieder. Die Teilnahme von Frauen an den DGK-Tagungen entspricht etwa diesem Anteil. Der Frauenanteil ist bei den Jungmitgliedern deutlich höher (Abbildung 6.1), so dass eine Steigerung des Anteils weiblicher Mitglieder in Zukunft zu erwarten ist.

Tabelle 6.1: *Altersstatistik der DGK-Mitglieder*[1]

	Mitglieder
Gesamtzahl	1096
unbekanntes Alter[2]	97
bekanntes Alter	999
0–20	0
20–25	11
26–30	51
31–35	80
36–40	69
41–45	143
46–50	164
51–55	108
56–60	96
61–65	60
66–70	75
71–75	74
76–80	42
81–85	14
86–90	9
91–95	2
96–100	1
>100	0
Durchschnittsalter	52,1
Doktoranden/Studenten	71 (6,5 %)
Vollmitglieder	882 (80,4 %)
Dauermitglieder	22 (2,0 %)
Pensionäre	93 (8,5 %)
Arbeitslose	11 (1,0 %)
Ehrenmitglieder	6 (0,5 %)
unpersönliche Mitglieder	3 (0,3 %)
Institute	8 (0,7 %)
weiblich	217 (19,8 %)
männlich	868 (79,1 %)

[1] Erstellt auf der Grundlage der Daten der DGK-Mitgliederdatenbank vom 01.10.2012.
[2] Unpersönliche Mitglieder oder Alter nicht in Datenbank gespeichert.

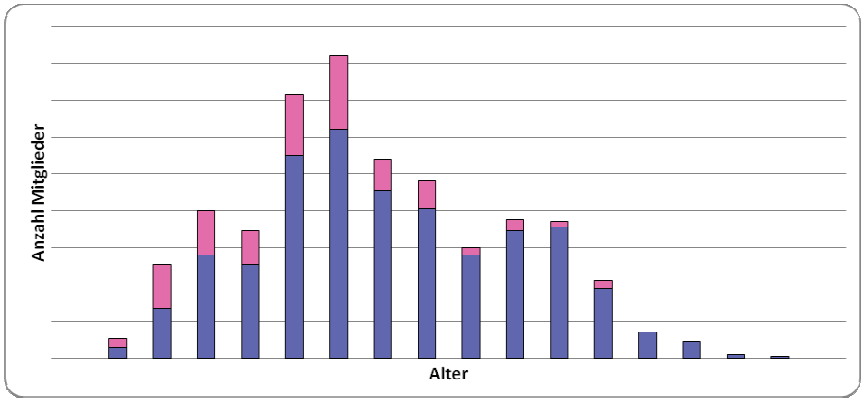


Abbildung 6.1: *Altersverteilung der DGK-Mitglieder: Die Anzahl der männlichen Mitglieder ist in blau und die der weiblichen Mitglieder in magenta dargestellt.*

Tabelle 6.2: *Entwicklung der Mitgliederzahlen*

Jahr	Zahl der Mitglieder
1992 (Dez.)	1070
1993 (Febr.)	1065
1993 (Okt.)	1092
1994 (Dez.)	1025
1995 (Nov.)	1046
1996 (Okt.)	1055
1997 (Dez.)	1062
1998 (Okt.)	1051
1999 (Nov.)	1060
2000 (Apr.)	1048
2001 (März)	1079
2002 (Feb.)	1068
2004 (März)	1041
2005 (März)	1072
2007 (März)	1073
2008 (März)	1076
2009 (März)	1043
2010 (Aug.)	1089
2011 (Sept.)	1096
2012 (März)	1088

Tabelle 6.3: *Besuch der letzten zwei DGK-Tagungen*[1]

	München 2012	**Salzburg 2011**
Teilnehmer	456	456
Aushilfen	5	6
Aussteller	40	39
Chairs/VIP	5	23
lokale Organisatoren	13	11
Vollzahler Mitglied	150	150
Vollzahler Nicht-Mitglied	113	92
Student Mitglied	114	50
Student Nicht-Mitglied		76
Referenten	16	9
davon DGK-Mitglieder	187 (41,0 %)	134 (29,4 %)
unbekanntes Alter	8	9
bekanntes Alter	176	125
1-20	0	0
20-25	4	2
26-30	17	16
31-35	12	11
36-40	15	7
41-45	22	17
46-50	30	25
51-55	19	12
56-60	19	13
61-65	12	4
66-70	14	6
71-75	5	7
76-80	4	1
81-85	2	2
86-90	1	1
91-95	0	1
96-100	0	0
>100	0	0
Durchschnittsalter	49,3	48,4
Doktoranden/Studenten	20 (10,7 %)	18 (13,4 %)
Vollmitglieder	151 (80,7 %)	108 (80,6 %)
Dauermitglieder	5 (2,7 %)	2 (1,5 %)
Pensionäre	4 (2,1 %)	2 (1,5 %)
Arbeitslose	0	0
Ehrenmitglieder	4 (2,1 %)	3 (2,2 %)
unpersönliche Mitglieder	0	0
Institute	0	0
weiblich	32 (17,1 %)	29 (21,6 %)
männlich	152 (81,3 %)	105 (78,4 %)

[1] Diese Statistik wurde anhand der Daten von Conventus und der Daten der DGK-Mitgliederdatenbank erstellt. Die Daten der ersten zehn Zeilen wurden alleine der Teilnehmerliste von Conventus entnommen. Die Teilnehmerlisten von Conventus wurden dann gegen die DGK-Mitgliederdatenbank verglichen, um weitere Informationen zu erhalten, insbesondere über die Altersverteilung. Für die Salzburg-Tagung liegt die Zahl der „Members“ der Teilnehmer deutlich höher als die der ermittelten DGK-Mitglieder (Studenten wie Vollmitglieder). Dies ist wahrscheinlich auf die Mitglieder anderer Gesellschaften zurückzuführen (gemeinsame Jahrestagung). Für die Tagung in München entsprechen sich die Zahlen deutlich besser.

7. Die DGK aus der Sicht des Schatzmeisters (Bernd Müller, Jena)

7.1 Die Finanzen der DGK

Die DGK finanziert ihre Tätigkeit durch die Beiträge der Mitglieder, das Vermögen und dessen Erträge, durch Zuschüsse und Spenden sowie Einnahmen aus der Tätigkeit und dem Wirken der DGK. Die finanziellen Mittel der DGK dienen zur Erfüllung ihrer Zwecke gemäß der Satzung, insbesondere derjenigen, die die Gemeinnützigkeit der DGK bewirken.

Die wesentlichen Einnahmen der DGK in den Jahren 1991 bis 2011 sind in Tabelle 7.1, sortiert nach den Einnahmearten, summarisch aufgeführt (Zur Erleichterung der Vergleichbarkeit sind alle Angaben in Euro ausgewiesen).

Tabelle 7.1: *Wesentliche Einnahmen der DGK 1991 bis 2011 in Euro.*

Ideeller Geschäftsbereich		**Vermögens-verwaltung**	**Zweckbetrieb**		**Wirtschaftlicher Geschäfts-betrieb**	**Summe Einnahmen**
Mitglieds-beiträge	Spenden	Zinsen	Berichte, Broschüren	Jahres-tagungen	Anzeigen	
294053,53	20088,92	16126,02	9383,74	48714,18	93273,54	499054,15
58,9%	4,0%	3,2%	1,9%	9,8%	18,7%	100,0%

Nach fiskalischen Vorgaben unterscheiden sich die Einnahmen nach dem ideellen Geschäftsbereich (Mitgliedsbeiträge, Spenden), der Vermögensverwaltung (Zinsen), dem Zweckbetrieb (Jahrestagungen, Berichte aus den Arbeitskreisen, Broschüre Kristallographie) und dem wirtschaftlichen Geschäftsbetrieb (Anzeigen in den Mitteilungen). Die Verteilung der Einnahmen in den Jahren 1991 bis 2011 ist der Abbildung 7.1 zu entnehmen.

Die normalen Mitgliedsbeiträge wurden 1993 auf 30 DM erhöht und 2005 auf 30 €. Der Jahresbeitrag von 2004 wurde mit im Jahre 2005 erhoben. Das Maximum der Beitragszahlungen im Jahre 2008 ergibt sich durch Nachzahlungen, da in diesem Jahr erstmalig Erinnerungen an die Mitglieder versandt wurden. Infolge der versandten Erinnerungen erhöhten sich die jährlichen Einnahmen aus den Mitgliedsbeiträgen ab 2008 um durchschnittlich 4000 € gegenüber den Jahren 2005 bis 2006.

Die Zuwendung von Spenden an die DGK hat seit etwa dem Jahre 2000 nachgelassen, wobei deren Anteil von 4,0 % auf die in den Anfangsjahren größere Bedeutung derselben hinweist. Der Zinsertrag – im Mittel 3,2 % der Einnahmen – ist durch den Rückgang der Zinsraten seit 2000 fast zu vernachlässigen.

Ab dem Jahre 2004 wurde die Organisation der Jahrestagungen vorwiegend der Firma Conventus übertragen, so dass nur noch ein geringer Ertrag aus den Jahrestagungen zu erwarten ist. Es sei auf die hohen Erträge der Jahrestagungen 2001, 2002 und 2003 hingewiesen und den Veranstaltern gedankt.

Hervorzuheben sind die Einnahmen aus den Anzeigen für die Mitteilungen, die etwa 19 % der Gesamteinnahmen entsprechen und der Initiative des jeweiligen Redakteurs zu verdanken sind.

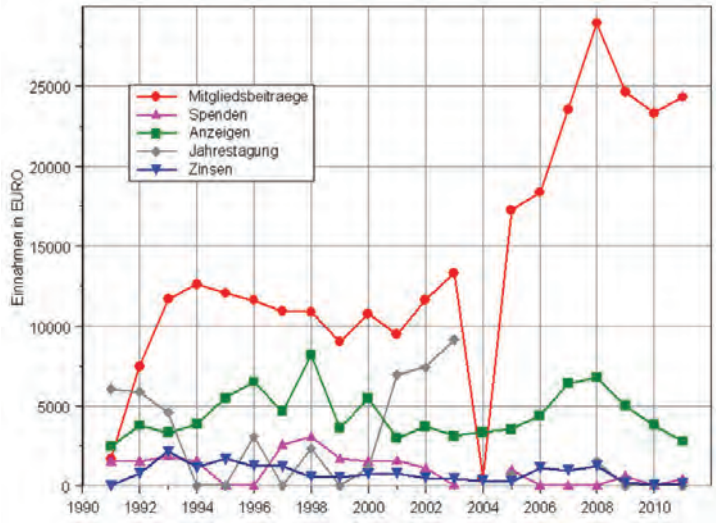


Abbildung 7.1: *Die wesentlichen Einnahmen der DGK von 1991 bis 2011.*

Die wesentlichen Ausgaben der DGK in den Jahren 1991 bis 2011 sind in der Tabelle 7.2 ausgeführt. Die Ausgaben im eigentlichen ideellen Geschäftsbereich (ohne Administration und Reisekosten) betragen 79 % der Gesamtausgaben. Reisekosten und Administration nehmen weniger als 10 % der Ausgaben ein. Mit diesen Werten kann sich die DGK rühmen, ihren Auftrag zur Verwirklichung gemeinnütziger Zwecke sehr vorbildlich wahrzunehmen.

Die finanzielle Unterstützung der Arbeitskreise stellt eine der Hauptaufgaben zur Erfüllung der Zwecke der DGK dar. Dafür gibt die DGK mehr als ein Viertel ihrer Ausgaben (26,2 %) aus, oder anders ausgedrückt, fast die Hälfte der Einnahmen aus den Mitgliedsbeiträgen (46 %). Dieser Anteil der Ausgaben könnte bei entsprechender Arbeitsweise der Arbeitskreise jedoch noch höher sein.

Tabelle 7.2: *Wesentliche Ausgaben der DGK von 1991 bis 2011 in Euro.*

Ideeller Geschäftsbereich							
Arbeits-kreise	**Laue-Kapital**	**Reise-stipendien**	**Ehrun-gen**	**Mittei-lungen**	**Gesell-schaften**	**Admini-stration**	**Reise-kosten**
136209,73	39557,65	31990,40	10952,63	180480,97	10426,53	27270,01	24003,01
26,2%	7,6%	6,2%	2,1%	34,8%	2,0%	5,3%	4,6%

Zweckbetrieb		**Summe Ausgaben**
Jahrestagung	**Berichte, Broschüren**	
12674,64	20114,17	519162,26
2,5%	3,9%	100,0%

Für die Ehrungen der Mitglieder – Carl-Hermann-Medaille und Will-Kleber-Gedenkmünze – werden etwa 2 % der Mittel verwendet, ein angemessener Anteil. Das Max-von-Laue-Preis-Kapital wurde aufgrund der Beschlüsse der Mitgliederversammlung aus den Mitgliedsbeiträgen mit etwa 7,5 % aufgestiftet.

Ab 2008 können aufgrund der höheren Einnahmen aus den Mitgliedsbeiträgen Reisestipendien vergeben werden – vorwiegend an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zu den Tagungen der IUCr und der ECA, unabhängig von der Mitgliedschaft in der DGK. Diese Aktivität der DGK weist weiterhin auf die zielgerichtete Erfüllung gemeinnütziger Zwecke der DGK hin.

Die Mitgliedschaften der DGK in ECA, DVT sowie MATV kosten der DGK 2 % ihrer Mittel, ob das auch einen entsprechenden Nutzen für die DGK bringt, sollte sorgfältig überprüft werden. Die DFG fördert die Mitgliedschaft der DGK in der IUCr jährlich (auf Antrag) mit 10000 Schweizer Franken. Sollte die DFG diese Förderung einstellen, so müsste entsprechend der Mitgliedsbeitrag um 10 € erhöht werden.

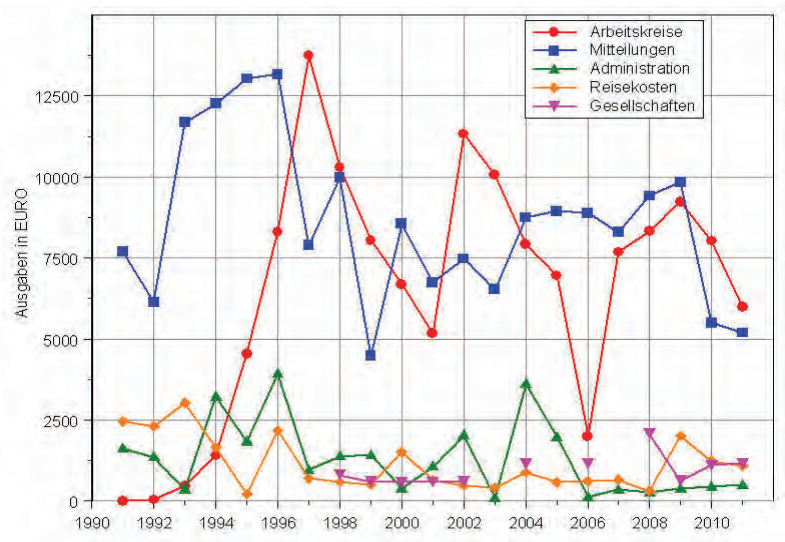


Abbildung 7.2: *Die wesentlichen Ausgaben der DGK von 1991 bis 2011.*

Die Verteilung der wesentlichen Ausgaben der DGK in den Jahren 1991 bis 2011 ist in der Abbildung 7.2 aufgeführt. Die anfänglich recht hohen Aufwendungen für die Herstellung und den Versand der Mitteilungen sind seit dem Jahre 2000 normalisiert. Die Kosten für die Herstellung und den Versand der Mitteilungen werden durch die Einnahmen aus den Anzeigen (einziger wirtschaftlicher Geschäftsbetrieb der DGK zu diesem Zwecke) um etwa 50 % gesenkt, so dass effektiv zur Zeit ein Exemplar der Mitteilungen (einschließlich Versand) die DGK 2,30 € kostet.

Die finanzielle Unterstützung der Arbeitskreise beträgt jährlich etwa 7500 €. Besonders hohe Beträge für die Arbeitskreise sind in den Jahren 1997 und 2002 zu verzeichnen. Sie dienten unter anderem auch dem Abbau des sehr hohen Eigenkapitals der DGK in diesen Jahren. Das Jahr 2006 stellt eine Ausnahme in der Tätigkeit der Arbeitskreise dar.

Die Ausgaben für die Herstellung der Berichte aus den Arbeitskreisen sowie für die Broschüre Kristallographie konnten zu etwa 47 % aus den entsprechenden Einnahmen beim Verkauf derselben gedeckt werden, was vom verantwortlichen Umgang mit den finanziellen Mitteln der DGK zeugt.

Der gesamte Verlauf der Einnahmen und Ausgaben sowie das jährliche Kapital der DGK zum 31.12. zwischen 1991 und 2011 sind in Abbildung 7.3 ersichtlich.

Das jährliche Kapital der DGK zum 31.12. sollte kleiner als die Einnahmen durch die Mitgliedsbeiträge sein, da Einnahmen zeitnah bis zum 31.12. des nächsten Jahres zu verbrauchen sind. Ab dem Jahre 2008 ist diese fiskalische Forderung erreicht. Das Maximum der Ausgaben im Jahre 2008 ist mit dem Ansammeln der Spende der Mitglieder für das Max-von-Laue-Preis-Kapital verbunden. Aus dem Verlauf von Einnahmen und Ausgaben in Abbildung 3 ist zu erkennen, dass diese im Mittel sich recht kongruent verhalten, also von der DGK ein ausgeglichener Haushalt geführt wird.

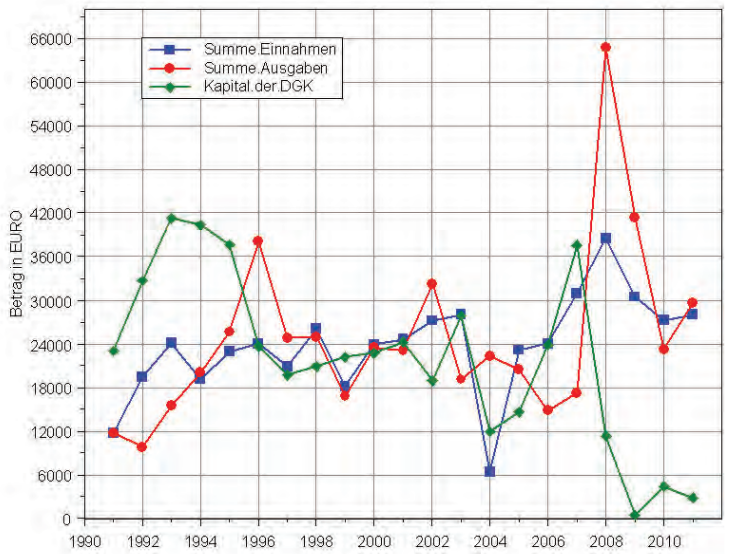


Abbildung 7.3: *Verlauf der jährlichen Einnahmen sowie Ausgaben und des Kapitals von 1991 bis 2011.*

Insgesamt belaufen sich im Zeitraum von 1991 bis 2011 die Einnahmen der DGK auf 499054,15 € und die Ausgaben auf 519162,26 €. Die Differenz zwischen Ausgaben und Einnahmen von 20108 € lässt sich dadurch erklären, dass die DGK im Jahre 1991 von dem

AGKr ein Kapital von etwa 23000 € übernahm, so dass die DGK bisher mehr ausgeben als einnehmen konnte. Das Kapital der DGK am 31.12.2011 hat somit folgerichtig einen Wert von 2848,32 €.

Mit dem gegenwärtigen Jahresbeitrag von 30 €, was einem Anteil der Mitgliedsbeiträge an den Einnahmen von etwa 60 % ausmacht, lassen sich – wie die Erfahrung der letzten Jahre zeigt – die anfallenden Ausgaben der DGK zur Erfüllung ihrer satzungsmäßigen Zwecke problemlos begleichen.

7.2. Das Max-von-Laue-Preis-Kapital

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

Bei diesem Preis ist hervorzuheben, dass das Preisgeld (zur Zeit 1500 €) aus den Erträgnissen des Max-von-Laue-Preis-Kapitals entnommen wird. Das Preis-Kapital ist durch Zustiftungen der Mitglieder der DGK angesammelt worden. Die Mitglieder der DGK können sich rühmen, ein solches Kapital aus eigenem Interesse durch ihre Zuwendungen für die Förderung von Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftlern geschaffen zu haben.

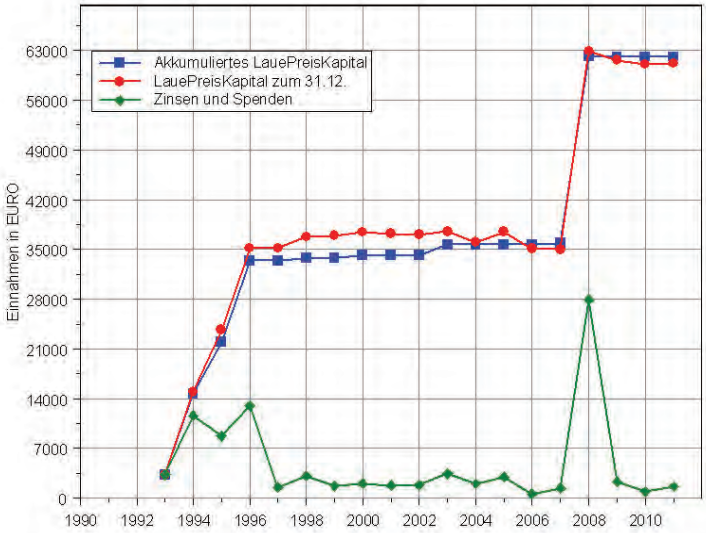


Abbildung 7.4: *Das Max-von-Laue-Kapital von 1993 bis 2011.*

In der Abbildung 7.4 ist der Verlauf des Max-von-Laue-Preis-Kapitals sowie der Zinsen und Spenden von 1993 bis 2011 dargestellt.

In den Jahren 1993 bis 1996 stifteten etwa 70 Mitglieder der DGK den Grundstock des Max-von-Laue-Preis-Kapitals in einer Gesamthöhe von 28000 €. Ab 1996 wird der Max-von-Laue-Preis fast regelmäßig jährlich vergeben.

Infolge der seit dem Jahre 2000 jährlich sinkenden Zinserträgnisse – der Betrag des Laue-Preis-Kapitals (rote Kurve) zum 31.12. des laufenden Jahres bewegt sich unter den Wert des akkumulierten Wert des Laue-Preis-Kapitals (blaue Kurve) – wurden die Ausgaben größer als die Einnahmen. Deshalb beschloss im Jahre 2007 die Mitgliederversammlung, mittels Mitgliedsbeiträgen eine Aufstiftung in Höhe von 28000 € im Jahre 2008 so vorzunehmen, dass der Kapitalstock etwa 60000 € beträgt, damit bei einem zu erwartenden Zinssatz von 3 % das jährliche Preisgeld gewährleistet ist. Leider erweist sich infolge weiter fallender Zinsen auch dieser Kapitalbetrag noch nicht groß genug, um aus den Erträgnissen das Preisgeld tatsächlich zu erwirtschaften, wie der Verlauf beider Kurven seit 2008 in der Abbildung zeigt.

Die DGK hatte die Absicht, das Max-von-Laue-Kapital im Jahre 2008 in eine Stiftung überzuführen, so dass der Max-von-Laue-Preis von dieser Stiftung vergeben werden kann. Jedoch stimmte das zuständige Finanzamt einer solchen Stiftung nicht zu, aber das Max-von-Laue-Kapital kann jetzt wie ein Stiftungskapital mit Zustiftungen usw. geführt werden, ohne dass es dem Vermögen der DGK explizit zugerechnet wird. Eine Ordnung regelt die Aufgaben zur Verleihung des Max-von-Laue-Preises sowie die Verwaltung des Max-von-Laue-Kapitals.

Es soll hervorgehoben werden, dass jedes Mitglied der DGK im Mittel einen Beitrag zum Max-von-Laue-Kapitalstock in Höhe von 60 € geleistet hat, wobei die Breite der Spenden sich von 30 € bis 5000 € erstreckt.

Also, herzlichen Dank an die Mitglieder der DGK!

8. Nationale Vernetzungen

8.1 **Die Beziehung zu den Müttern** (Peter Paufler, Dresden)

1972 wurde die Arbeitsgemeinschaft Kristallographie (AGKr) von den Trägergesellschaften Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG), Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) und Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) gegründet [1], die die Rolle von Muttergesellschaften übernahmen. Dies geschah absichtsvoll im Hinblick auf den Wunsch des Fortbestands enger Kooperation mit der inzwischen erwachsenen Tochter. Die Gründung der DGK 1991 kam nun einer förmlichen Lösung von den Müttern gleich, weshalb sehr bald Assoziierungsvereinbarungen geschlossen wurden [2], damit die weiterhin wünschenswerte Nähe erhalten bliebe. Diese Vereinbarungen sehen u. a. die Etablierung wechselseitiger Vertreter in den Vorständen, Regelungen über Doppelmitgliedschaften, Beteiligungen an gemeinsamen Veranstaltungen usw. vor. Auf diesem Wege kann eine Gesellschaft unmittelbar an der Arbeit der anderen mitwirken. Unabhängig von formalen Regelungen dieser Art sorgte aber in der Folgezeit die bloße Mitgliedschaft zahlreicher Wissenschaftler in verschiedenen Fachgesellschaften gleichzeitig für die praktische Verbindung der Gesellschaften auf unterer Ebene wie auf der Ebene der Vorstände.

Im Folgenden soll die Situation für die DPG und die DMG geschildert werden. Mit Fachvertretern der GDCh bestehen gemeinsame Interessenfelder vor allem auf den Gebieten der Kristallstrukturanalyse und der Kristallchemie fort. Seitens der GDCh hält der

Arbeitskreis Chemische Kristallographie innerhalb der Fachgruppe Analytische Chemie Verbindung und auf Seiten der DGK sind vor allem die Arbeitskreise Molekülverbindungen und Kristallchemie Träger des gegenseitigen Austauschs.

Außerdem sind für die DGK neue Partner mit fachlicher Nähe auf den Plan getreten, mit denen eine Vernetzung zweckmäßig erschien. Auch darüber wird berichtet.

8.1.1 Beziehung zur DPG (Auszug aus einem Bericht von Leonore Wiehl, Frankfurt/M.)

Schon 1951 wurde in der DPG ein Fachverband Kristallographie (FV KR) gebildet, dessen Leiter nun seit Gründung der DGK die DPG im DGK-Vorstand vertritt. Bis 2006 war Hans-Reiner Höche (Univ. Halle-Wittenberg) Leiter des FV KR und seit 2006 hat Leonore Wiehl (Univ. Frankfurt/M.) die Leitung übernommen. Umgekehrt haben Kurt Hümmer (Univ. Erlangen) und anschließend bis heute Markus Braden (Univ. Köln) die DGK im Vorstandsrat der DPG vertreten. Dem FV KR in der DPG, der die Kristallographie-nahen Physiker vereint, entspricht umgekehrt der Arbeitskreis Kristallphysik in der DGK, der sich um physikalische Fragen in der Kristallographie kümmert.

Man muss sich also bewusst sein, dass der FV KR keine Organisationseinheit der DGK ist, sich vielmehr gegenüber 30 anderen Fachverbänden innerhalb der DPG behaupten muss. Die Existenzberechtigung eines DPG-Fachverbandes leitet sich von der Aktivität der Mitglieder über die bloße Tagungsteilnahme hinaus ab. Nun ist zwar die Zahl der bekennenden Kristallographen unter den DPG-Mitgliedern im Zeitraum 2006 bis 2012 (20.07.) stetig von 167 auf 239 gestiegen, erreichte aber, gemessen an der Gesamtmitgliederzahl der DPG von 61547 im Jahre 2012, nur 4 Promille dieser Gesellschaft! Das hat der DPG-Vorstand 2010 zum Anlass genommen, trotz schriftlicher Einwände des DGK-Vorstands den Status des FV KR auf den einer Fachgruppe Kristallographie (FG KR) ohne Stimmrecht der Vertreterin im Vorstandsrat herabzustufen. Die FG KR ist bisher die einzige Fachgruppe der DPG.

Um trotz kleiner Mitgliederzahlen sichtbar zu bleiben, hat sich die FG KR in die sehr teilnehmerstarken DPG-Frühjahrstagungen der Sektion Kondensierte Materie (SKM) eingebracht, die als Zusammenschluss aller festkörperphysikalisch orientierten Fachverbände der DPG an wechselnden Orten organisiert werden. Seit dem 02.07.2011 ist die FG KR auch formal Mitglied der SKM.

Die erste aktive Mitgestaltung des Programms gelang zur DPG-Tagung 21.–26. März 2010 in Regensburg. Die eingebrachten Themen vermitteln einen Eindruck davon, was unter der Flagge Kristallographie noch punkten kann und welche DPG-Fachverbände der FG KR nahe stehen. Die veranstalteten Fachsitzungen (Sessions) waren: Tutorium „Functional (oxide) single crystals and epitaxial films – from growth to function“, gemeinsam mit dem Fachverband Dielektrische Festkörper (DF); „Crystallography in Nanoscience“ (KR allein); „Photovoltaic Materials“, gemeinsame Sitzung mit dem Fachverband Metall- und Materialphysik (MM) und der Bundesvereinigung Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (BVMatWerk); „Multiferroics“, gemeinsam mit den Fachverbänden Magnetismus (MA), Dielektrische Festkörper (DF) und Dünne Schichten (DS), Organisation bei MA.

Auch zur nächsten DPG-Tagung, veranstaltet von der SKM gemeinsam mit der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (SAMOP) 13.–18. März 2011 an der TU Dresden, war die FG KR wie folgt am Programm beteiligt: Eigene Fachsitzung

„Crystallography in Materials Science“ sowie gemeinsame Sitzung „Multiferroics“ der Fachverbände Magnetismus (MA), Dielektrische Festkörper (DF), Dünne Schichten (DS) und FG KR.

Im Laue-Jahr hat sich die FG KR an der DPG-Tagung 25.–30. März 2012 in Berlin für einige besondere Programmpunkte zum 100-jährigen Jubiläum des Laue-Experiments engagiert. Das kristallographische Highlight war sicher das fachverbandsübergreifende Symposium „100 years of X-ray diffraction: from the Laue-experiment to new frontiers“, das sehr gut besucht war. Es wurde von der FG KR organisiert, gemeinsam mit den FV Biologische Physik (BP), Chemische Physik und Polymerphysik (CPP), Dielektrische Festkörper (DF), Geschichte der Physik (GP), Magnetismus (MA) und Metall- und Materialphysik (MM). Fachverbands-übergreifende Symposien haben auf den DPG-Tagungen eine hervorgehobenen Position, da sie ohne Überschneidungen im Audimax stattfinden und bereits ein halbes Jahr vor der Tagung im Physikjournal angekündigt werden. Das Laue-Symposium 2012 bestand aus fünf eingeladenen Vorträgen, für die wir prominente Redner gewinnen konnten.

In unmittelbarem Zusammenhang damit standen zwei Fachsitzungen mit eingereichten Beiträgen (Kurzvorträge und Poster) zur (i) Materialforschung und zu (ii) biologischen Themen: (i) „100 years since the Laue experiment: Topical aspects of diffraction and scattering“, Joint Session (KR, BP, CPP, DF, GP, MA, MI, MM) organisiert von KR und (ii) „New Perspectives of Scattering at Soft Matter“ (CPP).

Weitere von der FG KR unterstützte Sessions waren: „Soft X-ray Resonant Scattering for Complex Structural and Magnetic Investigations“ (MA zusammen mit KR); „Multiferroics“ (MA zusammen mit DF, DS, KR, TT) und das Symposium „Resistive Switching“ des Fachverbandes DS zusammen mit DF, KR und HL (Halbleiter).

Fast schon Tradition geworden ist die von der FG KR alleine organisierte Session „Crystallography in Nanoscience“.

In den letzten Jahren ist ein weiteres Forum hinzugekommen, in dem die FG KR Flagge zeigen kann, nämlich die Homepage im Internet, auf der auch die aktuellen Tagungs-ankündigen zu finden sind. Leider wird dieses Forum noch viel zu wenig genutzt.

[1] H. Küppers: Die Geschichte der „Sektion Kristallkunde der DMG“. DGK-Mitteilungen 22 (2001) 20–28.
[2] DGK-Mitteilungen 4 (1992) 24–27.

8.1.2 Beziehung zur DMG (Peter Paufler, Dresden)

Auch die ‚Urmutter‘ DMG suchte nach Abnabelung der Tochter DGK den Zufluss vor allem an neuen experimentellen Erkenntnissen zur Diffraktometrie, an theoretischen Ergebnissen über aperiodische Strukturen und an Fortschritten zur Lehrmethodik zu erhalten. Relevante Ansprechpartner seitens der DGK für gemeinsame Veranstaltungen bzw. Ziele für Besuche sind die Arbeitskreise Hochdruckkristallographie, Neutronenstreuung, Synchrotronstrahlung, Pulverdiffraktometrie, Mineralogische und Technische Kristallographie, Aperiodische Kristalle und Kristallographie in der Lehre (Gesamtübersicht siehe *http://dgk-home.de/aks*). Umgekehrt finden sich zahlreiche DGK-Mitglieder thematisch von Veranstaltungen der Sektion für Chemie, Physik und Kristallographie der Minerale der DMG angesprochen. Auf der Vorstandsebene wird die Verbindung zwischen beiden Gesellschaften seit dem Jahr 2000 von Ulrich Bismayer (Hamburg) hergestellt. Ab 1991 hatten diese Funktion der Reihe nach vorübergehend Ekkehart Tillmanns, Theo Hahn, Gernot Heger und Peter Paufler inne.

In größeren Zeitabständen, wie zuletzt im September 2011 in Salzburg, werden gemeinsame Jahrestagungen von DGK und DMG veranstaltet, ggf. unter Einbeziehung weiterer Gesellschaften. So treffen sich auch jene Vertreter, die gewöhnlich nur eine von beiden besuchen. Die traditionelle fachliche Nähe von Mineralogie und Kristallographie in Deutschland schlägt sich bis heute auch in der Struktur der Fachkollegien der Deutschen Forschungsgemeinschaft nieder, wo gemeinsame Kandidaten zum Kollegium ‚Organische und Anorganische Geochemie, Biogeochemie, Mineralogie, Petrologie, Kristallographie, Lagerstättenkunde (316-01)' nominiert wurden [1]. Neuerdings sorgt das Grenzgebiet zwischen Mineralogie und Biologie für unkonventionelle Fragestellungen und eine veränderte Sicht auf die Definition des Minerals [2]. Hier darf man neue Impulse für ein jahrhundertealtes Fach erwarten.

Die DMG führt seit Jahren regelmäßig Doktorandenkurse zur Vertiefung der Ausbildung auf besonders aktuellen Gebieten durch, an denen sich die DGK zunehmend beteiligt. Sie stehen auch Diplomanden, Masteranden, Postdoktoranden und sonstigen Interessierten offen (siehe *http://www.dmg-home.de/kursprogramm.html*).

Kostendruck und Globalisierung haben sich auch auf die Zeitschriften ausgewirkt, die die DMG neben dem bereits etablierten European Journal of Mineralogy zur PR-Arbeit nutzt. Gemeinsam mit 6 anderen deutschen geowissenschaftlich orientierten Körperschaften werden die ‚Geowissenschaftlichen Mitteilungen GMIT' herausgegeben, die die direkte Verbindung mit den Mitgliedern aufrechterhalten sollen. Auf internationaler Ebene beteiligt sich die DMG an der Zeitschrift ‚Elements', an der außerdem noch mineralogische Gesellschaften der USA, Canadas, Großbritanniens und Irlands, Frankreichs, Italiens, Spaniens, Polens, der Schweiz und Japans mitwirken.

Seit einigen Jahren ist die Diskussion um die Außenwirkung der DMG und der übrigen Geowissenschaften entbrannt, weil insbesondere die DPG mit gegenwärtig rund 60 000 und die GDCh mit rund 30 000 Mitgliedern im öffentlichen Raum offensichtlich deutlich mehr Einfluss ausüben können. Ein geeigneter Ausweg scheint vielen in der Bildung einer Dachorganisation aller Geowissenschaften zu bestehen, die für eine sehr viel größere Zahl von Wissenschaftlern sprechen könnte als bisher, die DMG inklusive [3]. Zusammenschlüsse dieser Art sind zwangsläufig mit Verlusten an Eigenständigkeit der Bestandteile verknüpft, was zu entsprechenden Bedenken hinsichtlich des Verschwindens des Mineralogen geführt hat. Auch wenn der Prozess noch im Gange ist, deutet sich gegenwärtig eine Mehrheit für den Zusammenschluss an. Dieser administrative Akt wird auch Konsequenzen sowohl für die Lehrangebote der Bachelor- und Master-Kurse als auch für künftige Forschungsverbünde haben. In beiden Fällen werden sich kristallographische Professuren (so es sie noch gibt) deutlich zu geowissenschaftlichem oder materialwissenschaftlichem Profil bekennen müssen.

[1] DGK-Mitteilungen 41 (2012) 12
[2] Elements 8 (2012) No. 2
[3] GMIT 47 (2012) 47-48

8.2 Bundesvereinigung Materialwissenschaft und Werkstofftechnik e. V. (BV MatWerk) (Wolfgang Neumann, Berlin)

Die DGK gehörte zu den 25 wissenschaftlichen Organisationen, die im Oktober 2007 in Berlin die BV MatWerk (*http://www.matwerk.de*) gründeten, nachdem durch die Tätigkeit der Arbeitsgemeinschaft „Materialwissenschaft und Werkstofftechnik" (M&W) unter der Schirmherrschaft der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung die notwendigen

organisatorischen Voraussetzungen dafür geschaffen worden waren (siehe Berichte in den DGK-Mitteilungen Heft 32 (2006) 37–38, Heft 35 (2008) 25–27). Gegenwärtig hat die BV MatWerk 29 Vollmitglieder und 6 beobachtende Mitglieder.

Ziel der BV MatWerk ist es, die Interessen der Mitgliedsorganisationen auf den Gebieten der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik zu bündeln und besser interdisziplinär zu vernetzen. Dabei knüpft die BV MatWerk Kontakte zu Wissenschaft, Wirtschaft und Politik. Eine wesentliche Aufgabe besteht in der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses, wobei hier eine enge Zusammenarbeit und Abstimmung mit dem „Studientag Materialwissenschaft und Werkstofftechnik“ (*http://www.stmw.de*) hinsichtlich der Studieninhalte und Lehrangebote erfolgt. Der Studientag versteht sich als *Fakultätentag*, welcher für die materialwissenschaftlichen und werkstofftechnischen Fächer in der Ausbildung als interdisziplinäre Fachrichtungen, ein eigenständiges Profil entwickeln soll. Mitglieder des Studientages, der als eingetragener Verein wirkt, sind 37 Hochschulen mit materialwissenschaftlich bzw. werkstofftechnisch orientierten Studiengängen bzw. derartige Studien- oder Vertiefungsrichtungen im Lehrplan anbieten.

Auf Initiative der BV MatWerk wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) eine BV MatWerk Nachwuchsakademie ins Leben gerufen, die in diesem Jahr bereits zum zweiten Mal gestartet wurde. Im Rahmen dieser Nachwuchsakademie haben junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler nach ihrer Promotion die Gelegenheit, einen Projektantrag zu einem aktuellen materialwissenschaftlichen Forschungsthema zu entwerfen und zu bearbeiten. Über diese Möglichkeit einen Antrag auf „Eigene Stelle“ bei der DFG zu stellen, hat der Vorstand der DGK regelmäßig auf den Mitgliederversammlungen hingewiesen.

Die DGK hat sich seit der Gründung der BV MatWerk an den Aktivitäten der Bundesvereinigung beteiligt. In diesem Zusammenhang sei auf die Mitgestaltung der internationalen Tagungen „Materials Science and Engineering (MSE)“ hingewiesen, wo Mikrosymposien von DGK-Mitgliedern organisiert wurden.

Um die DGK noch besser innerhalb der BV MatWerk zu präsentieren, sollte unsere Gesellschaft sich auf deren Internetseite mit einem Kurzprofil darstellen, wie dies bereits von einigen Mitgliedsorganisationen getan wird. Damit ergeben sich zusätzliche Möglichkeiten einer möglichen Zusammenarbeit mit anderen Mitgliedsorganisationen.

Für die zukünftige Mitarbeit bietet das *Internationale Jahr der Kristallographie 2014* eine gute Gelegenheit, um auf die Bedeutung der Kristallographie als interdisziplinäres Fach für Materialwissenschaft und Werkstofftechnik hinzuweisen.

Unsere Gesellschaft sollte mit der DFG und der BV MatWerk eine Vereinbarung treffen, damit im *Internationalen Jahr der Kristallographie 2014* zum dritten Mal eine BV MatWerk Nachwuchsakademie gestartet werden kann, die eine aktuelle Forschungsthematik der materialwissenschaftlichen Kristallographie beinhaltet.

8.3 Deutscher Verband Technisch-Wissenschaftlicher Vereine

(Wolfgang Neumann, Berlin)

Die DGK ist seit dem Jahre 2008 Mitglied im DVT, dem Dachverband der Fachgesellschaften auf den Gebieten Technik und Naturwissenschaften in Deutschland. Dem DVT gehören gegenwärtig 45 Fachgesellschaften an. Der DVT fungiert als Bindeglied zwischen den

einzelnen Mitgliedsvereinen und den Wirtschaftsverbänden und politischen Instanzen, soweit technisch-naturwissenschaftliche und berufspolitische Themen von übergeordneter Bedeutung betroffen sind. Arbeitsschwerpunkte des DVT sind:

- Förderung von Technik und Naturwissenschaften,
- Internationale Aktivitäten,
- Bildung und Nachwuchssicherung,
- Dienstleistungen.

Über die Ziele, Arbeitsschwerpunkte und die zahlreichen Aktivitäten des DVT wurde ausführlich im DGK-Mitteilungsheft 36 (2008) 43–44 berichtet (siehe auch *http://www.dvt-net.de*).

Der DVT bietet verschiedene Aktivitäten und Dienstleistungen an, die von der DGK genutzt werden sollten, um die Stellung der Kristallographie, insbesondere für die Nachwuchssicherung, nachhaltig zu verbessern. Der DVT unterstützt Stellungnahmen zu aktuellen Themen der Forschungs- und Bildungspolitik, hilft bei der Erstellung von Positionspapieren, gibt entsprechende Pressemitteilungen dazu heraus und veranstaltet zu aktuellen Forschungsthemen parlamentarische Abende.

Die DGK sollte das *Internationale Jahr der Kristallographie 2014* zum Anlass nehmen, um die Erfolge der kristallographischen Forschung in Deutschland über den DVT öffentlichkeitswirksam zu verbreiten. Andererseits sollte ein Positionspapier erarbeitet werden, wo auf den dramatischen Abbau des Faches „Kristallographie“ an den Universitäten hingewiesen wird. Nach der im Auftrag der Hochschulrektorenkonferenz durchgeführten „Kartierung der sog. Kleinen Fächer“ gehört die Kristallographie zu den „Kleinen Fächern“ bei denen ein überaus deutlicher Abbau bezüglich der Professuren und der Studienstandorte zu verzeichnen ist:

Jahr	1997	2011
Professurenentwicklung	42	23,5
Studienstandorte	26	17

Dieses Memorandum „Zur Stellung der Kristallographie in Deutschland“ sollte, ausgehend von der o. g. negativen Entwicklung, Wege aufzeigen, die zu einer Verbesserung für das Fach „Kristallographie“ führen (z. B. durch Zentrenbildung, Verbund-Studiengänge, internationale Studiengänge, Nachwuchsakademie der DFG etc). Bei diesem Vorhaben kann die DGK vom DVT unterstützt werden und den notwendigen Zugang zu den wissenschaftspolitischen Gremien finden.

Die Mitgliedschaft der DGK im DVT ist nur dann für unsere Gesellschaft sinnvoll, wenn wir die vom DVT angebotenen Dienstleistungen und möglichen Unterstützungen auch für die Ziele der DGK nutzen.

9. Vertretung in DFG-Fachgremien (Wolfgang Schmahl, München)

Diese Übersicht folgt in der nächsten Ausgabe der Mitteilungen.

10. Internationale Vernetzungen

10.1 Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, DGK, und ihre Beziehungen zur International Union of Crystallography, IUCr (Wulf Depmeier, Kiel)

Die im Jahr 1948 gegründete IUCr vertritt die Interessen von weltweit mehr als 10.000 Kristallographen und kristallographisch arbeitenden Wissenschaftlern benachbarter Disziplinen. Mitglieder der IUCr sind die sogenannten *Adhering Bodies*, die nationale oder regionale Gruppierungen von Kristallographen vertreten. Zu den gegenwärtig mehr als 40 *Adhering Bodies* zählt auch die DGK. Der IUCr gehören auch drei *Regional Associates* an, die im Wesentlichen zwar die gleichen Ziele wie die IUCr verfolgen, aber eine besondere Rolle in einem kontinentalbezogenen Nord-Süd-Dialog spielen. Die DGK ist Teil der *European Crystallographic Association*, ECA, die das Interesse der europäischen und afrikanischen Kristallographen bündelt und koordiniert. Die Geschichte der Beziehungen zwischen DGK und ECA wird von H. Fueß in seinem Beitrag für dieses Heft geschildert (siehe Abschnitt 10.2). Ähnliche Aufgaben wie die ECA erfüllen die AsCA für den asiatischen und ozeanischen Raum sowie die ACA für die beiden amerikanischen Kontinente. Die IUCr ist mit weiteren Organisationen assoziiert, deren wissenschaftliche Interessen sich partiell mit denen der IUCr überschneiden. Hier sind die *International Organization of Crystal Growth* (IOCG) und das *International Centre for Diffraction Data* (ICDD) zu nennen. Es ist besonders wichtig, dass die IUCr Mitglied der ICSU (*International Council of Scientific Unions*) ist und somit von der UNESCO anerkannt wird. Das ist unter anderem die Voraussetzung dafür, dass die Zahlung des jährlichen Mitgliedbeitrags der DGK an die IUCr von der DFG übernommen werden kann und nur aufgrund der Mitgliedschaft der IUCr in der ICSU konnte die Generalversammlung der UN am 3. Juli 2012 das Jahr 2014 zum *International Year of Crystallography*, IYCr, erklären, für dessen Durchführung die UNESCO unter bestimmten Bedingungen begrenzte finanzielle Unterstützung gewähren kann.

Jedes Mitglied der IUCr, so auch die DGK, bildet ein Nationalkomitee, zu dessen Aufgaben es gehört, die Beziehungen dieses Mitglieds sowohl mit der IUCr als auch mit der ECA zu pflegen. Die Mitglieder der IUCr werden auf Antrag einer von fünf Kategorien I–V zugeordnet, wobei abhängig von der Einordnung gestaffelte Mitgliedsbeiträge zu zahlen sind und eine unterschiedlich große Anzahl stimmberechtigter Delegierter in die Vollversammlung der IUCr (*General Assembly*, GA) entsendet werden kann. Die DGK gehört zur Kategorie IV und hat dementsprechend vier Stimmberechtigte in der GA. Die GA bestimmt die Politik der IUCr und tagt alle drei Jahre im Zusammenhang mit dem internationalen wissenschaftlichen Kongress der IUCr. Der nächste, *23rd Congress and General Assembly* ist für die Zeit vom 5. bis 12. August 2014 in Montreal, Kanada, geplant. Zur Durchführung der laufenden Geschäfte zwischen den Vollversammlungen wählt die GA ein Exekutivkomitee, dem gegenwärtig außer dem Präsidenten (G. Desiraju), dem Vizepräsidenten (C. Lecomte), dem Generalsekretär und Schatzmeister (L. van Meervelt), der Präsidentin der vorausgegangenen Legislaturperiode (S. Larsen), noch sechs *Ordinary Members* angehören (E. Boldyreva, H. Dabkovska, W. Depmeier, M. Guss, M. Hackert, J. M. Perez-Mato). Die *Ordinary Members* werden von der GA in einem kompliziert anmutenden, aber annähernde regionale Gleichverteilung garantierenden Verfahren gewählt. Gewisse technische Aufgaben werden vom Exekutivkomitee auf *Subcommittees* übertragen, wie z. B. dem Finanzkomitee oder dem *Subcommittee on the Union Calendar*. Letzteres hat die wichtige Aufgabe, Anträge auf finanzielle Unterstützung von wissenschaftlichen Veranstaltungen nach bewährten Standards zu überprüfen und dem Exekutivkomitee zur Annahme oder ggf. Ablehnung zu empfehlen.

Die wissenschaftliche Arbeit der IUCr wird hauptsächlich von den zur Zeit 19 wissenschaftlichen Kommissionen geleistet. Sie bringen ihr spezifisches Fachwissen in die IUCr ein, organisieren oder unterstützen spezialisierte Tagungen, Schulen oder Workshops, publizieren Lehrmaterial und wirken in den internationalen Programmkomitees für die dreijährlichen Kongresse der IUCr mit. Die Mitglieder der wissenschaftlichen Kommissionen werden von der GA bestellt, wobei unter Berücksichtigung von Gleichheitsgrundsätzen auf Vorschläge aus den jeweiligen Kommissionen selbst und aus denen der Nationalkomitees zurückgegriffen wird. Die Kommissionen können zusätzlich Konsultanten ernennen, aus deren Reihen dann häufig zukünftige Kommissionsmitglieder stammen. Die Kommissionen sind mit ihrer Arbeit dem Exekutivkomitee und der GA gegenüber verantwortlich.

Zum Selbstverständnis der IUCr gehört der Dienst für die internationale kristallographische Gemeinschaft. Über die Arbeit der wissenschaftlichen Kommissionen und die Durchführung der Kongresse hinaus geschieht das durch rege Publikationstätigkeit. So werden zur Zeit acht wissenschaftliche Journale publiziert (sechs Ausgaben der *Acta Crystallographica*-Familie, *Journal of Applied Crystallography*, *Journal of Synchrotron Radiation*) und acht Bände der *International Tables for Crystallography* herausgegeben. Darüber hinaus werden Monographien zu speziellen kristallographischen Themen verlegt. Weitere sehr nützliche Dienstleistungen der IUCr sind das sich im stetigen Ausbau befindliche *Online Dictionary of Crystallography* (*http://reference.iucr.org*), das Sponsoring des CIF (*Crystallographic Information File*) für den Austausch und die Archivierung von kristallographischen Daten sowie der Unterhalt des *World Directory of Crystallographers*. Informationen über weitere „gute Werke“ der IUCr findet man auf ihrer vorzüglichen Internetseite (*www.iucr.org*). Generelle Informationen über Vorgänge in der internationalen Kristallographiegemeinde werden über die *IUCr Newsletters* verbreitet.

Im Unterschied zu kommerziellen Verlagen ist die IUCr eine nicht profitorientierte Organisation. Der durch den Verkauf der Journale und Bücher erzielte, relativ bescheidene Gewinn wird nach Abzug der Unkosten – insbesondere für die Finanzierung des vorzüglich und professionell arbeitenden Exekutivsekretariats in Chester, UK – für die finanzielle Unterstützung von Kongressen, Tagungen und Workshops mit dem besonderen Ziel verwendet, jungen Kristallographen die Teilnahme an solchen Veranstaltungen zu ermöglichen. Die verschiedenen Möglichkeiten und zu beachtende Regelungen finden sich unter *http://www.iucr.org/iucr/sponsorship*. Gegenwärtig gibt der Zustand der *Acta Crystallographica*, insbesondere der Sektionen A, B und C, der IUCr einigen Grund zur Sorge. Wachsende Konkurrenz durch andere Zeitschriften und vergleichsweise hohe Qualitätsanforderungen seitens der IUCr-Journale hat die Zahl der Beiträge in diesen Organen stark sinken lassen. Das lässt wegen der erwähnten finanziellen Abhängigkeit der IUCr vom Erfolg ihrer Journale Besorgnisse über das künftige Wohlergehen der IUCr aufkommen. Erste Maßnahmen zur Verbesserung der Situation sind eingeleitet worden und weitere werden zweifellos folgen.

Die Beziehungen zwischen der IUCr und der deutschen Kristallographie waren bis zur Gründung der DGK im Jahre 1991 und ihrer Aufnahme in die IUCr alles andere als unkompliziert. Die Existenz zweier deutscher Staaten und daraus resultierende politische Zwänge und Befindlichkeiten führten zu allerlei Irritationen und Problemen, die von P. Paufler in seinem Beitrag für dieses Heft beschrieben werden (siehe Abschnitt 3). Interessierte Leser seien zudem auf einen historischen Rückblick von H. Kamminga (Acta Crystallogr. A45 (1989) 581–601) sowie auf die Beiträge von H. Küppers, P. Paufler und U. Steinike in den Heften 22 und 23 der Mitteilungen der DGK verwiesen. Seit der Aufnahme der DGK in die IUCr sind die beiderseitigen Beziehungen problemlos und deutsche

Kristallographen arbeiten erfolgreich in den verschiedenen Komitees und Kommissionen der IUCr mit.

Nachdem – notwendigerweise nur auszugsweise – über verschiedene gute Werke der IUCr im Dienst sowohl der internationalen als auch der deutschen kristallographischen Gemeinschaft berichtet wurde, soll nun abschließend aufgezeigt werden, wie möglicherweise DGK-Mitglieder, insbesondere auch die jüngeren, ihrerseits zum Wohle der internationalen Kristallographie wirken können.

Seit der Entdeckung der Beugung von Röntgenstrahlung vor hundert Jahren hat sich die moderne Kristallographie zu einer strukturbezogenen Querschnittswissenschaft entwickelt. Es gibt wohl kaum einen Bereich der Wissenschaften der kondensierten Materie, der nicht einen direkten oder indirekten Bezug zur Kristallographie hätte. Fallbeispiele lassen sich in beliebiger Zahl finden und jedes DGK-Mitglied kann seine Umgebung darauf hinweisen. Man wird sicher auch keinen Fehler begehen, wenn man auf die mittlerweile 25 Nobelpreise verweist, die bislang im Zusammenhang mit kristallographischen Themen oder Methoden verliehen worden sind.

Wie erwähnt, werden wichtige Aufgaben innerhalb der IUCr durch ihre wissenschaftlichen Kommissionen geleistet. Das Nationalkomitee der DGK kann der GA mögliche Mitglieder vorschlagen. Einmal gewählt, sollte es für Mitglieder eigentlich selbstverständlich sein, aktiv an den Aufgaben der jeweiligen Kommission mitzuarbeiten. Das ist bedauerlicherweise nicht immer und überall der Fall.

Auch ohne Kommissionsmitglied zu sein, kann sich jedes DGK-Mitglied aktiv in die Arbeit der seinen Fachinteressen nahestehenden Kommissionen einbringen. Eine wichtige Möglichkeit ist die Organisation von Fachtagungen, Schulen oder Workshops, die, von der jeweiligen Fachkommission unterstützt, auch finanzielle Zuschüsse von der IUCr erhalten können. Jedes DGK-Mitglied ist aufgerufen, hier Initiative zu zeigen.

Es wurde bereits erwähnt, dass die IUCr als Organisation finanziell vom Verkauf der von ihr publizierten Journale und Bücher abhängt. Die Journale, allen voran die *Acta Crystallographica*-Familie, können nur verkauft, d. h. von Bibliotheken abonniert werden, wenn einerseits aktiv darin publiziert wird und wenn andererseits den Bibliotheken verdeutlicht wird, dass die *Acta Crystallographica* unverzichtbar ist.

Jedes Mitglied der DGK sollte sich in das *World Directory of Crystallographers* (WDC) eintragen und die Angaben wenn nötig aktualisieren. Das WDC erleichtert die Kommunikation mit anderen Kristallographen auf sehr effiziente Weise.

Der letzte Punkt ist ein Appell: Nachdem die UN das Jahr 2014 zum *International Year of Crystallography* ausgerufen hat, sind wir alle aufgerufen, aktiv und unter Einsatz aller Kräfte und aller Fantasie tätig zu werden, damit dieses, zu unseren Lebzeiten aller Wahrscheinlichkeit nach nicht wiederkehrende, besondere Ereignis ein Erfolg für die Kristallographie wird.

10.2. Die Beziehung der DGK zur European Crystallographic Association, ECA

(Hartmut Fueß, Darmstadt)

Vor ca. 50 Jahren war „Europa“ eine positiv besetzte Wunschidee vieler junger Leute, so auch der Kristallographen. Ca. 1970 gründete sich eine recht lose Gruppe, die sich *European Crystallographic Committee* (ECC) nannte. Jede nationale kristallographische Vereinigung war durch einen Vertreter repräsentiert. Einziges Ziel war die Organisation von *European Crystallographic Meetings* (ECM). Eine kleine Gruppe von drei Personen (Chair, Vice-chair und Secretary) sorgte für die Organisation von Zusammenkünften. Die erste Tagung ECM 1 fand in Bordeaux 1973 statt unter der Leitung von André Authier und M. Hospital. Authier war auch Chairman des ECC, gab diese Aufgabe aber 1975 an Olga Kennard, die den *Cambridge Crystallographic Database* (CCDB) gegründet hatte, ab. Vertreter der AGKr waren in Bordeaux Kurt Molière, dann längere Zeit Heinz Schulz und Walter Eysel.

Irgendwann Anfang der achtziger Jahre fragte mich Walter Eysel, ob ich die Vertretung übernehmen wolle. Mein ungebrochener Enthusiasmus für Europa ließ mich sofort zusagen.

Eine wichtige Regel des ECC im damals zweigeteilten Europa war der ständige Wechsel zwischen West und Ost. Tagungen in Budapest, Wroclaw waren ebenso normal wie Oxford, Turin oder Jerusalem. Der Umbruch 1989/90 traf das ECC ganz direkt. ECM 13 war für 1991 in Lubljana im damaligen Jugoslawien vorgesehen. Die Kämpfe an der österreichischen Grenze verschreckten das ECC so sehr, dass kurzfristig nach Triest in Italien ausgewichen wurde. Natürlich litt unter der kurzfristigen Änderung der Besuch, auch machte die Gruppe der Kristallographen, die vordringlich Pulverbeugung betrieben, den Wechsel nicht mit. Anstelle der geplanten Satellitenkonferenz in Lubljana wurde eine erste *European Powder Diffraction Conference* als Satellit zur Kristallographentagung in München gehalten. EPDIC war geboren und entwickelte sich als eigene Gruppe, die seither 13 EPDIC-Konferenzen mit kristallographischem Inhalt abgehalten hat. Nur 2010 gelang es, eine Tagung von EPDIC 12 und ECM 26 an einem Ort (Darmstadt) zu organisieren.

Um die gleiche Zeit verschwand auch die Ost/West-Konfrontation. Peter Paufler, der lange Jahre die VFK im ECC vertrat und ich als Vertreter der AGKr hatten beide zu ECM-Tagungen eingeladen, die 1992 und 1994 stattfinden sollten, da waren wir aber bereits in einem Staat. Konsequenz war, wir einigten uns auf Enschede 1992 und für 1994 zunächst Leipzig, dann schließlich Dresden. Ich war 1990 bis 1994 Vice-Chairman, Secretary war Paul Beurskens, Chair der Ost/West-Regel folgend Karel Huml aus Prag. Die erfolgreichen Tagungen einerseits, die neue europäische Lage andererseits führten zu wiederholten Wünschen nach einer straffen Organisation. Zusammen mit Joel Bernstein als Vice-Chairman bereitete ich ab 1994 die Umwandlung in eine Gesellschaft vor, die allerdings auf erheblichen Widerstand einiger altgedienter ECC-Vertreter stieß. Der Trick war eine „Probeabstimmung“ genanntes Stimmungsbild auf der ECM 16 in Lund (Schweden), die 14:3 für die Gründung einer Association ausging. Lissabon brachte dann den formalen Beschluss auf der Grundlage weniger Prinzipien, die Satzung zu nennen überheblich wäre.

Wesentliche Punkte waren drei Gruppen von Mitgliedern: Neben den Vertretern der nationalen Vereinigungen wurden Einzelmitglieder und Firmenmitglieder (*Corporative members*) eingeführt. Ein ausführlicher Satzungsentwurf (*Statutes and Bylaws*) wurde von Guiseppe Filippini ausgearbeitet und von Paul Beurskens übersetzt. Paul erreichte damit die Registrierung der ECA in Nijmegen in den Niederlanden. Vielleicht ist eine Bachelorarbeit eines Juristen erforderlich, um zu definieren, ob ECA nun eine europäische oder eine niederländische Gesellschaft ist.

Wie funktioniert nun diese *European Crystallographic Association* in Theorie (*Statutes*) und Praxis? Auf der europäischen Landkarte gibt es leider einige weiße Flecken (Baltikum, Rumänien, Albanien u. a.), die Türkei und Israel gehören wissenschaftlich zu Europa. Kurz nach 1990 führten einige Gespräche mit südafrikanischen Kollegen zur Aufnahme Südafrikas. In der Folge gesellten sich zu dem Gründungsmitglied Ägypten weitere nordafrikanische Länder. Marokko und Südafrika waren bereits ECM-Veranstalter. Endziel ist eine eigenständige Gesellschaft für Afrika.

Erfreulich die Mitgliedschaft von Institutionen und Firmen (*Corporative members*). Nicht ganz einfach ist die Rekrutierung von Einzelmitgliedern (*Individual membership*), da viele Kollegen keine Vorteile sehen, Mitglied in zwei Vereinen (Beispiel DGK und ECA) zu sein. Wie allgemein zu erkennen, war hier die Hoffnung auf ein Europa und auf ein Bekennen zu Europa zu optimistisch. Trotzdem bietet der größere Rahmen erhebliche Vorteile im wissenschaftlichen Austausch. Die Programme in Brüssel erfordern Kooperation, ein Studienprogramm für einen *European Master in Crystallography* ist in Vorbereitung. All dies sollte jedem Kollegen 10 Euro im Jahr wert sein, die durch Ermäßigung im Tagungsbeitrag überkompensiert werden. Höhepunkte sind die ECM-Tagungen. Viele amerikanische und japanische Kollegen kommen regelmäßig, weil sie die Vielfalt der europäischen (und afrikanischen) Landschaften bewundern und schätzen. Durch die Umwälzungen in Mittel- und Osteuropa ist dort die Wissenschaft allgemein und die Kristallographie im Speziellen in den Hintergrund getreten, ein ECM in diesem Rahmen sollte mal wieder stattfinden.

Durch die sehr erfolgreichen Tagungen konnten auch Rücklagen gebildet werden, die in einem Fonds angelegt werden. Durch die gegenwärtige Bankenkrise reichen die Zinserträge leider noch nicht aus, die Gelder für die beiden Wissenschaftspreise der ECA zu erwirtschaften. Der Preis für verdiente Wissenschaftler wurde ursprünglich als ECA-Preis verliehen und erstmals 1998 an die spätere Nobelpreisträgerin Ada Yonath verliehen. 2004 erhielt die Auszeichnung den Namen Max Perutz-Preis. Die Auszeichnung für Nachwuchswissenschaftler wurde gemeinsam mit der *European Neutron Scattering Association* ENSA ins Leben gerufen und 2007 erstmals verliehen. Der Preis ist nach dem in Deutschland geborenen französischen Kristallographen und Neutronenstreuer Erwin Felix Lewy Bertaut benannt.

Die Finanzlage erlaubt, auch Zuschüsse zu Aktivitäten von nationalen Organisationen oder den Interessengruppen zu gewähren. Geleitet wird ECA durch ein Executive Committee, das zwischen 6 und 10 Personen umfasst und sich zweimal pro Jahr trifft. Im jetzigen Committee ist die DGK durch Christian Lehmann (Schatzmeister) und Udo Heinemann vertreten. Neben der Routine (Tagungen, Beiträge) werden auch Themen wie Studienpläne (*European Master*) oder die europäische Förderpolitik (7. Rahmenplan) behandelt. Durch die Mitgliedschaft in der *Initiative for Science in Europe* (ISE) ist ein direkter Zugang zu allen Informationen und ein direkter Zugang zum *European Research Council* (ERC) möglich.

Die wichtigsten Arbeitsebenen sind die 13 *Special Interest Groups* (SIG), in denen die Aktivitäten von Biokristallographen (SIG 1) oder „Pulverleuten“ (SIG 8) gebündelt werden. Auf Anregung junger Kristallographen (sehr aktiv dabei junge Damen aus Spanien und England) wurde eine *General Interest Group* (GIG) gegründet, die auf den letzten Tagungen nicht nur bei einer eigenen Abendveranstaltung („Bier und Tier“) sondern auch im wissenschaftlichen Programm eifrig mitgewirkt hat. Dieser Erfolg ließ einige ältere Mitglieder (ausschließlich ältere Herren) nicht ruhen. Auch sie haben nun ihr *GIG for senior scientists*. Unter *www.ecanews.org* hat man Zugang zu allen aktuellen Informationen die ECA betreffend.

So umfasst die *European Crystallographic Association* geographisch jetzt Europa und Afrika, alle Altersstufen sind vertreten, die Kristallographie wird in all ihrer Breite repräsentiert. Instrumentelle Entwicklungen und neue Quellen (Synchrotron und Neutronen) haben ebenso ihren Platz wie Rechenprogramme und Modellrechnungen. Die experimentellen Ergebnisse sind längst über die Bekanntgabe von Strukturparametern („Angströmfanatiker") hinausgewachsen. Die Korrelation wichtiger Eigenschaften von Proteinen oder Viren einerseits, von Funktionsmaterialien andererseits, leitet die kristallographische Forschung. Dazwischen liegt das weite Feld der chemischen Forschung an neuen Substanzen.

Durch ECA ist unser Fach auch international sichtbar geworden und bildet den wichtigsten Eckpfeiler der International Union for Crystallography IUCr als *Regional Associate*. Im *Year of Crystallography* 2014 wird dieser Erfolg vertieft werden.

11. Der Privatgelehrte und die DGK oder GRAPH KRISTALLO

(Helmuth Zimmermann, Erlangen)

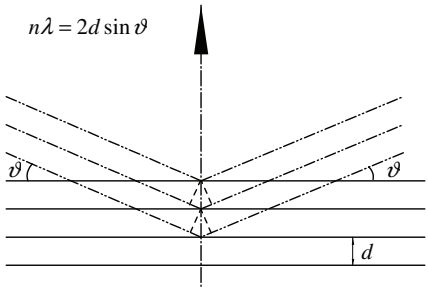
Wo wäre die Wissenschaft heute ohne ihre Privatgelehrten. Eine Zahlentheorie ohne PIERRE DE FERMAT ist unvorstellbar, überhaupt: Was wäre die Mathematik ohne ihre Winkeldreiteiler und Kreisquadrierer? Wie hätte sich die Thermodynamik entwickelt, wäre sie nicht vom grenzenlosen, uneigennützigen Fleiß der Konstrukteure eines „Perpetuum mobile" angetrieben worden. Und erst die Chemie: Ohne BÖTTGERs alchimistische Arbeiten im Hochsicherheitslabor auf der ALBRECHTSburg zu Meißen wüssten wir bis heute nicht, wie „Bliemchengaffee" schmeckt. Solche Leute haben ihren SCHILLER gelesen und schauen mit distanziertem Blick auf die „Brotgelehrten", die ihre Wissenschaft im Rahmen von FRAUNHOFER-Instituten, der MAX-PLANCK-Gesellschaft und Universitäten bei bescheidener Besoldung und trüben Zukunftsperspektiven betreiben und damit das Laufrad des Fortschritts mit Mühe in Gang halten. Der NOBELpreis, der neuerdings aber auch schon durch sinkende Zinsgewinne seinen Tribut an die Gewinn schöpfende Spekulationswirtschaft leistet, ist vielleicht noch eben ein Anreiz für die privaten Teilnehmer am Wissenschaftsprozess.

So war es verdienstvoll, dass sich doch wenigstens die DGK-Mitteilungen vor vielen Jahren dem Tun eines diese Privatgelehrten geöffnet haben[1] – gut: zur Gründung eines Arbeitskreises hat es nicht gereicht, aber das hängt vielleicht auch an den oft autistischen Neigungen dieser Wissenschaftler. So hat es nur GRAPH KRISTALLO VON MÜNCHHAUSEN bis auf diese Bühne wissenschaftlicher Öffentlichkeit geschafft.

Neue Nachrichten von GRAPH KRISTALLO

Als GRAPH KRISTALLO VON MÜNCHHAUSEN beim Kaffee in der Gartenlaube der Seniorenresidenz auf Schloss GUTTENBERG lustlos auf einem Stück vertrocknetem Blätterteig herumstocherte, erinnerte ihn diese Situation an ein Bild aus seinem alten Physikbuch, in dem die BRAGGsche Gleichung mit einem sehr ähnlichen Bild erklärt wurde.

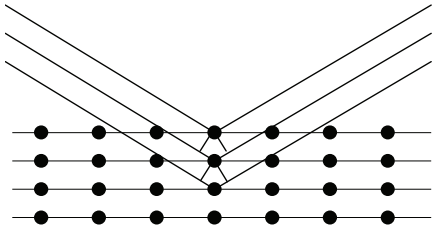
[1] Vgl. auch Mitt. d. DGK 9 (1995) 44–47; 11 (1995) 52–58; 12 (1996) 64–66, 68–71; 14(1997) 83.



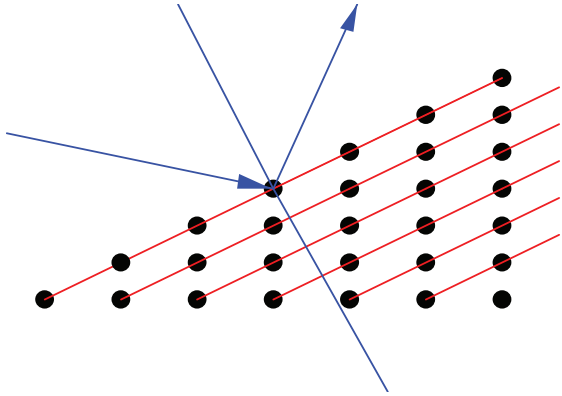
Er hatte das nie wirklich eingesehen, weil im Buch vorher überzeugend nachgewiesen wurde, dass die Wechselwirkung zwischen RÖNTGEN-Strahlen (-Wellen, -Quanten) und dem Kristall an den Elektronen stattfindet.

Als gebildeter Kristallograph können Sie sicher erklären, wie die Elektronen in die dünnen Blätter des Teigs (Netzebenen eines Gitters) und nur dorthin kommen, wo sich dann die RÖNTGEN-Strahlen spiegeln.

Hinweis: Das Anbringen von grünen Pünktchen (Elektronen) auf den Linien hilft nur dem Bachelor, der noch aus Kastanien mit Zahnstochern einfache Strukturen synthetisiert.



Im Master-Studiengang werden auch Netzebenen betrachtet, in denen die Pünktchen nicht senkrecht übereinander liegen, siehe nächste Abbildung.



Ratlos klopfte GRAPH KRISTALLO heftig mit der Kuchengabel auf den Blätterteig, woraufhin ein Material entstand, das einem (texturierten) Kristallpulver ähnelt. Dies erklärt, warum man obige Bilder gern in Einführungen in die Pulverdiffraktometrie findet, gibt aber keine erschöpfende Antwort auf die obige Frage.

12. Blick voraus (Wolfgang Schmahl, München)

Der Blick unmittelbar voraus zeigt gutes und sicheres Fahrwasser vor dem Bug, denn wir steuern zu auf das *International Year of Crystallography* 2014. Das gegenwärtige Jahr 2013 wird geprägt sein von den Vorbereitungen für öffentlichkeitswirksame Maßnahmen in 2014. Nichtsdestotrotz fährt unser Schiff durch Strudel und über Felsenriffe: Die Schrumpfung der Zahl der Professuren im ehemaligen Kernbereich des Universitätsfachs „Kristallographie", das meist, aber nicht ausschließlich, in geowissenschaftlichen Fakultäten angesiedelt war, schreitet weiter fort. Trotzdem hat die DGK seit ihrer Gründung eine recht konstante Mitgliederzahl, mit geringer Tendenz nach oben. Kristallographie findet also zunehmend in anders bezeichneten Bereichen statt, die sich auch zunehmend diversifizieren. Ein starker Wachstumszweig in der DGK ist natürlich die biomolekulare Strukturforschung, die sich ohne Zweifel – und wie international längst geschehen – zum dominierenden Wissenschaftsbereich auch in der deutschsprachigen Kristallographie-Landschaft entwickelt. Ein anderes Wachstumsgebiet ist die Strukturforschung, die an einer zunehmenden Zahl von außeruniversitären (Groß-)Forschungseinrichtungen etabliert ist – ob mit biochemischer, materialwissenschaftlicher oder auch geowissenschaftlicher Ausrichtung. Hierzu gehören nicht zuletzt die Neutronen-, Synchrotron- und bald auch FEL-Strahlungsquellen. Diese Einrichtungen beschäftigen eine sehr aktive und deutlich sichtbare Untergruppe der DGK-Mitglieder. Die Hoffnung auf die weitere Existenz solcher Forschungseinrichtungen im deutschsprachigen Raum lässt alles andere als Pessimismus in Bezug auf unsere Mitgliederzahlen und lebendige kristallographische Wissenschaft in der überschaubaren Zukunft aufkommen. Auch der Bedarf der Großforschungs-Institute an kristallographisch geschulten jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern stimmt mich zuversichtlich für die Zukunft unserer Gesellschaft. Mit dem Schwinden des kristallographischen Kernfachs an den Universitäten fällt unseren Arbeitskreisen eine wichtige Zukunftsaufgabe zu: Die Verankerung der Kristallographie in den verschiedenen noch oder wieder existierenden Schubladen-„Fächern" der Universitäten. Über die Arbeitskreise oder analoge Task-Forces müssen wir noch viel mehr Präsenz auf großen Tagungen anderer „Fächer" und in deren Ausbildungsprogramm aufbauen. Dass dies geht, zeigen verschiedene, gut positionierte

Arbeitskreise/Task-Forces immer wieder, im Laue-Jahr 2012 z. B. vorbildlich die Fachgruppe Kristallographie in der DPG. Es schmerzt, dass es der DGK (bzw. der Vorgängerin AGKr) in der Vergangenheit nicht gelang, einige strategisch wichtige kristallographische Kernkompetenzen so zu besetzen, dass sie sie für sich beanspruchen könnte: Nehmen wir Kristallzüchtung und Kristallisationsprozesse, nehmen wir Oberflächen- und Grenzflächen und die entsprechende Diffraktions- und Raster-Scanning-Methodik, nehmen wir Gefügeforschung an polykristallinen Materialien von Gesteinen bis Werkstoffen, nehmen wir den Komplex „Kristall und Technik". Und zu Dynamik bzw. Spektroskopie wäre hier noch einiges mehr zu sagen. Hier müssten wir fast überall Gelände zurückgewinnen. Heute ist die Leistungsfähigkeit von Elektronenmethoden in der Strukturforschung in rasanter Vorwärtsentwicklung begriffen; gleich ob SEM- oder TEM-basiert, wird hier nanoskalige Ortsabbildung mit Beugungsinformation und chemischer Information kombiniert, und in diesem Kernbereich von Strukturforschung droht bei der DGK der Anschluss verloren zu gehen.

Ein kurzer Blick voraus in den Rückspiegel auf die „Mütter" der DGK. Die wichtigste „Mutter" der AGKr war die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), und dieses Mutterband wurde 1992 durchschnitten, mit einer Reihe von Konsequenzen. Hier sehe ich dringenden strukturellen Handlungsbedarf in den kommenden Jahren. Die Biologie – wenigstens in molekularer oder materialwissenschaftlicher Ausprägung – ist inzwischen ebenso wie die alten „Mütter" ein Wissenschaftsgebiet von dem wir leben und dem wir geben. Auch hier sind formale Kooperationen in Zukunft denkbar.

Wissenschaftlich werden wir in der kommenden Dekade eine Konvergenz von Beugungsmethoden erleben, die die „Einkristall"- und die „Pulver"-Extreme aufgeben und sich im Bereich real existierender Materialien treffen. Das heißt wir können die Objekte messen, so wie sie sind, seien es Kristall-Agglomerate (oder gar keine Kristalle) bei der Strukturanalyse oder texturierte Kompositmaterialien u. a. biologischen Ursprungs, deren Gefüge die Eigenschaften und Reaktionen auf externe Bedingungen bestimmt. Dazu werden die verschiedenen, auch diffusen und inkohärenten Streubeiträge zunehmend quantitativ eingerechnet statt „gefittet", was firmere strukturelle Aussagen zu amorphen und nanoskaligen Stoffen zulässt. Die Flächendetektoren tragen wesentlich zu den neuen Möglichkeiten bei, ebenso wie die hoch-ortsauflösenden Methoden. Effiziente optische Elemente und Strahlenquellen im Labor, aber auch die schon im Bau bzw. konkreter Planung befindlichen Synchrotron-, FEL- und Spallations-Quellen einer jeweils neuen Generation werden vieles ermöglichen: nicht nur die Untersuchung stets kleinerer Objekte, sondern auch dass wir von der traditionellen Untersuchung statischer „Gleichgewichtsstrukturzustände" ein paar Schritte weiter gehen können in Richtung auf das Erforschen von (schnellen) Prozessen und transienten Strukturen. Auch für das theoretische Verständnis von Struktur und Eigenschaften werden skalenübergreifende Simulationen des Prozess-Verhaltens großer Systeme bis in die atomare Auflösung hinein ein wichtiges Desideratum für die kommenden 20 Jahre.

13. Weitere Daten zur Arbeit der DGK (Norbert Sträter, Leipzig)

13.1 Der Vorstand und die Ehrenmitglieder

Vorstand der DGK						
Jahr	**Vor-sitzender**	**Stellv. Vors.**	**Schrift-führer/in**	**Schatzmeister** (Kassenprüfer)	**Nationalkomitee**[1)2)]	**Vertreter von bzw. in assoziierten Gesellschaften**[3)]
1991–1993	Heinz **Schulz**	Wolfram **Saenger**	Ursula **Steinike**	Horst **Küppers** (Siegfried **Haussühl)**	Jürgen **Felsche**, Karl **Fischer,** Joachim **Bohm,** Hans-Reiner **Höche,** Bernt **Krebs,** Peter **Paufler**	Ekkehart **Tillmanns**, Theo **Hahn** (DMG in DGK)
1993	Heinz **Schulz**	Wolfram **Saenger**	Ursula **Steinike**	Horst **Küppers** (Rudolf **Allmann,** Siegfried **Haussühl)**	Jürgen **Felsche**, Karl **Fischer,** Joachim **Bohm,** Hans-Reiner **Höche,** Bernt **Krebs,** Peter **Paufler**	Hans-Reiner **Höche** (DGK in DPG), Jochen R. **Schneider** (DPG in DGK), Theo **Hahn** (DMG in DGK)
1994	Heinz **Schulz**	Wolfram **Saenger**	Ursula **Steinike**	Horst **Küppers** (Rudolf **Allmann**)	Jürgen **Felsche**, Karl **Fischer,** Joachim **Bohm,** Hans-Reiner **Höche,** Bernt **Krebs,** Peter **Paufler**	Hans-Reiner **Höche** (DGK in DPG), Jochen R. **Schneider** (DPG in DGK), Gernot **Heger** (DMG in DGK),
1994–1997	Hans **Burzlaff**	Heinz **Schulz**	Helmuth **Zimmer-mann**	Horst **Küppers** (Rudolf **Allmann,** Michael **Czank)**	Peter **Paufler,** Joachim **Bohm,** Udo **Heinemann** Hans-Reiner **Höche,** Wolfgang **Jeitschko** Gerhard **Müller**	Hans-Reiner **Höche** (DGK in DPG), Jochen R. **Schneider** [ab 1996:] Kurt **Hümmer** (DPG in DGK), Gernot **Heger** (DMG in DGK und DGK in DMG)
1997–2000	Gernot **Heger**	Hans **Burzlaff**	Georg **Roth**	Horst **Küppers** (Rudolf **Allmann,** Michael **Czank)**	Udo **Heinemann,** Wulf **Depmeier,** Friedrich **Frey,** Kurt **Hümmer,** Wolfgang **Jeitschko** Gerhard **Müller**	Hans-Reiner **Höche** (DGK in DPG), Kurt **Hümmer** (DPG in DGK), Peter **Paufler** (DMG)
2000–2003	Peter **Paufler**	Gernot **Heger**	Reinhard **Neder**	Horst **Küppers** (Rudolf **Allmann,** Michael **Czank)**	Wulf **Depmeier,** Hans-Dieter **Bartunik,** Ulrich **Bismayer**, Friedrich **Frey,** Peter **Luger,** Wolfgang **Neumann**	Hans-Reiner **Höche** (DGK in DPG), Kurt **Hümmer** (DPG in DGK), Ulrich **Bismayer** (DMG)
2003–2006	Wulf **Depmeier**	Peter **Paufler**	Karsten **Knorr**	Jürgen **Schreuer** (Helmuth **Zimmermann**, Leonore **Wiehl)**	Wolfgang **Neumann,** Thomas **Schleid**, Edgar **Weckert,** **Bartunik,** Ulrich **Bismayer**, Peter **Luger**	Markus **Braden** (DPG in DGK und DGK in DPG), Ulrich **Bismayer** (DMG)

2006–2009	Wolfgang **Neumann**	Wulf **Depmeier**	Holm **Kirmse**	Bernd **Müller**	Ullrich **Pietsch,** Wolfgang **Schmahl,** Manfred **Weiss,** Leonore **Wiehl,** Edgar **Weckert,** Thomas **Schleid**	Leonore **Wiehl** (DPG in DGK), Markus **Braden** (DGK in DPG), Ulrich **Bismayer** (DMG)
2009–2012	Udo **Heine-mann**	Wolfgang **Neumann**	Norbert **Sträter**	Bernd **Müller**	Ullrich **Pietsch,** Wolfgang **Schmahl,** Manfred **Weiss,** Leonore **Wiehl,** Reinhard **Fischer,** Dirk **Meyer**	Leonore **Wiehl** (DPG in DGK), Markus **Braden** (DGK in DPG), Ulrich **Bismayer** (DMG)
2012–	Wolfgang **Schmahl**	Udo **Heine-mann**	Norbert **Sträter**	Bernd **Müller**	Susan **Schorr,** Jürgen **Schreuer,** Ralf **Ficner,** Birger **Dittrich,** Reinhard **Fischer,** Dirk **Meyer**	Leonore **Wiehl** (DPG in DGK), Markus **Braden** (DGK in DPG), Ulrich **Bismayer** (DMG)

[1)] Ab 10.06.1992 gehört formal nur der Vorsitzende (unterstrichen) dem Vorstand an.
[2)] Weiteres Mitglied ist der DGK-Vorsitzende qua Amt.
[3)] Die Vertreter assoziierter Gesellschaften *im* DGK-Vorstand sind Mitglieder des Vorstands (ohne Stimmrecht).

Ehrenmitglieder der DGK	
Name	**Ehrenmitglied seit**
Karl **Fischer**	1997
Theo **Hahn**	1997
Heinz **Jagodzinski** †	1996
Friedrich **Liebau** †	1998
Heinz **Schulz**	2001
Ursula **Steinike**	2001
Gerhard **Hildebrandt** †	2003
Hartmut **Fueß**	2010

13.2 Die Preise der DGK

Max-von-Laue-Preisträger	
Jahr der Auszeichnung	**Preisträger**
1996	Edgar **Weckert**
1997	Björn **Winkler**
1998	Markus **Braden**
1999	Petra **Schiebel**
2000	Hartmut **Leipner**
2001	Helmut **Ehrenberg**
2002	Michael **Fechtelkord**
2003	Karsten **Knorr,** Wolf-Dieter **Schubert**
2004	Dirk C. **Meyer**
2005	Guenter **Schwarz**
2006	Birger **Dittrich**, Thomas **Höche**
2007	Dominik **Schaniel**
2009	Johan **Hattne,** Lars **Raue**
2010	Evgeny V. **Alekseev**
2011	Alexandra **Friedrich**
2012	Tilmann **Leisegang**

Träger der Carl-Hermann-Medaille	
Jahr der Auszeichnung	**Preisträger**
1996	Gerhard **Borrmann**
1997	Hartmut **Bärnighausen**
1998	Siegfried **Haussühl**
1999	George **Sheldrick**
2000	Heinz **Jagodzinski**
2001	Theo **Hahn,** Hans **Wondratschek**
2002	Friedrich **Liebau**
2003	Hans-Joachim **Bunge**
2004	Wolfram **Saenger**
2005	Peter **Paufler**
2006	Werner **Fischer**
2008	Hans **Burzlaff**
2009	Armin **Kirfel**
2010	Wolfgang **Jeitschko**
2011	Gernot **Heger**

Will-Kleber-Gedenkmünze	
Jahr der Auszeichnung	**Preisträger**
2008	Joachim **Bohm**
2009	Rudolf **Allmann**
2010	Hans **Boysen**, Friedrich **Frey**
2012	Helmuth **Zimmermann**

Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie	
Jahr der Auszeichnung	**Preisträger**
2010	Harry **Müller**

Im Folgenden sind die Mitglieder der Preiskomitees aufgeführt. Zusätzlich zu den genannten Personen ist der Vorsitzende der DGK Mitglied (*ex officio*) aller Preiskomitees.

Komitee für den Max-von-Laue-Preis	
1994–1997	Wulf **Depmeier,** Werner **Fischer,** Hans-Reiner **Höche ,** Bernt **Krebs**
1997–1999	Wulf **Depmeier,** Werner **Fischer**, Hans-Reiner **Höche ,** Bernt **Krebs**
1999–2000	Wulf **Depmeier**, Udo **Heinemann**, Hans-Reiner **Höche,** Bernt **Krebs**
2000–2003	Wulf **Depmeier** , Udo **Heinemann,** Hans-Reiner **Höche,** Bernt **Krebs**
2003–2006	Elke **Koch**, Ulrich **Bismayer**, Udo **Heinemann** und Armin **Kirfel**
2006–2009	Caroline **Röhr**, Ralf **Ficner**, Ulrich **Bismayer**, Armin **Kirfel**
2009–2012	Caroline **Röhr**, Ralph **Ficner**, Martin U. **Schmidt**, Rainer **Hock**
2012–	Thomas **Doert**, Reinhard **Neder**, Martin U. **Schmidt**, Manfred **Weiss**

Komitee für die Carl-Hermann-Medaille	
2002	Theo **Hahn**
2004	Theo **Hahn**, Wolfgang **Neumann**, Rolf **Hilgenfeld**, George M. **Sheldrick**
2006	Wulf **Depmeier**, Rolf **Hilgenfeld**, George M. **Sheldrick**, Leonore **Wiehl**
2011	Wulf **Depmeier**, Christian **Lehmann**, Sander van **Smaalen**, Leonore **Wiehl**

Komitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze	
2006	Ladislav **Bohatý**, Josef-Christian **Buhl**, Karl **Fischer,** Helmuth **Zimmermann**
2011	Petra **Becker**, Josef-Christian **Buhl**, Peter **Paufler**, Georg **Roth**

Komitee für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie	
2009	Wulf **Depmeier,** Yves **Muller,** Susan **Schorr**
2012	Wulf **Depmeier,** Yves **Muller,** Susan **Schorr**

13.3 Weitere Funktionen

Redaktion der Mitteilungen und der Homepage		
Zeitraum	**Mitteilungen**	**Homepage**
1991–1995	Ursula **Steinike**	
1995–1997	Ursula **Steinike,** Ladislav **Bohatý**, Roland **Fröhlich**	
1997–1999	Ladislav **Bohatý**, Roland **Fröhlich**, Ursula **Steinike,** Peter **Held**	Jürgen **Schreuer**
1999–2001	Ladislav **Bohatý,** Peter **Held**	Jürgen **Schreuer** bis 2004
2001–2005	Ladislav **Bohatý**	Silke **Rönnebeck** bis 2006
2005–	Dirk C. **Meyer**	Götz **Schuck**

Wissenschaftskolleg Kristallographie	
2002	Helmuth **Zimmermann**, Hans **Bartunik**, Ulrich **Bismayer**, Ladislav **Bohatý**, Hartmut **Fueß**, Wolfgang **Schmahl**, Björn **Winkler**
2006	Ulrich **Bismayer**, Kay **Diederichs**, Reinhard X. **Fischer**, Peter **Paufler**, Wolfgang **Schmahl**, Jürgen **Schreuer**, Heidrun **Sowa**

Öffentlichkeitsarbeit	
2002	Robert E. **Dinnebier**

Full line of components for science and industry

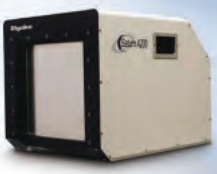
X-ray sources and beam modules

Leading With Innovation

MicroMax™-003 beam modules

Detectors for X-ray applications

Xsight™ Micron CCD
1 µm resolution



Saturn A200
200 x 200 mm field of view

Xsight+ CCD
easy monitoring of X-ray beam

Triton
multiwire detector

Rotary vacuum feedthroughs

UHV ferrofluidic seal in 'Hot-Wall' design

SuperseaL
the low-cost-optimized alternative

Multilayer and crystal optics 4 eV to 100 kEV

Remote controlled optics

Multilayer flat or curved
for laboratory or synchrotron

Multilayer
Schwarzschild optics

Please come and challenge us!

www.rigaku.com

Rigaku

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

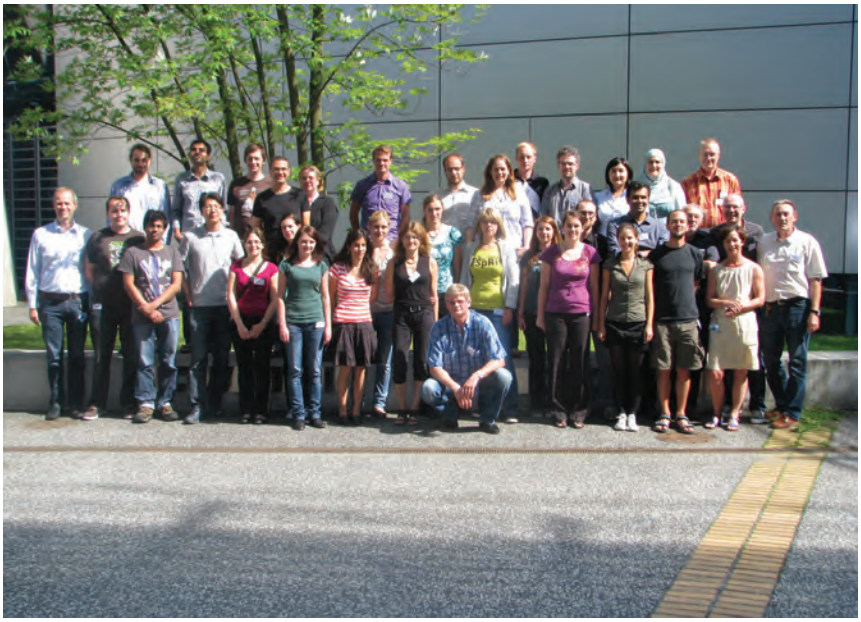
Die Arbeitskreise der DGK berichten

Bericht zum DGK-AK1-Workshop „X-ray Diffraction Data Collection using Synchrotron Radiation“

07. bis 09.07.2011, HZB Berlin-Adlershof

Im Rahmen der Aktivitäten des Arbeitskreises 1 „Biologische Strukturen“ der deutschen Gesellschaft für Kristallographie wurde dieses Jahr bereits zum 3. Mal nach 2007 und 2009 der Workshop „X-ray Diffraction Data Collection using Synchrotron Radiation“ organisiert und vom 7. bis 9. Juli in Berlin am BESSY II-Synchrotron des Helmholtz-Zentrums Berlin in Berlin-Adlershof durchgeführt.

Das Ziel des Workshops lag in der Vermittlung von theoretischem Wissen und praktischen Fertigkeiten auf dem Gebiet der Strukturbiologie bei der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung von Röntgenbeugungsexperimenten unter der Verwendung von Synchrotronstrahlung. Der Teilnehmerkreis bestand aus 20 jungen Strukturforschern (Masterstudenten, Doktoranden, Postdocs) aus Deutschland, Dänemark, Finnland, Israel, Norwegen, Österreich, Polen, Schweden, der Schweiz und der Tschechischen Republik, die aus insgesamt 68 Bewerbern ausgewählt wurden. Alle Teilnehmer besaßen kaum oder allenfalls begrenzte Kenntnisse auf dem Gebiet der Diffraktionsdatensammlung, die durch den Workshop vertieft werden sollten.



Teilnehmer, Tutoren und Gäste des DGK-AK1-Workshops 2011 am HZB in Berlin-Adlershof

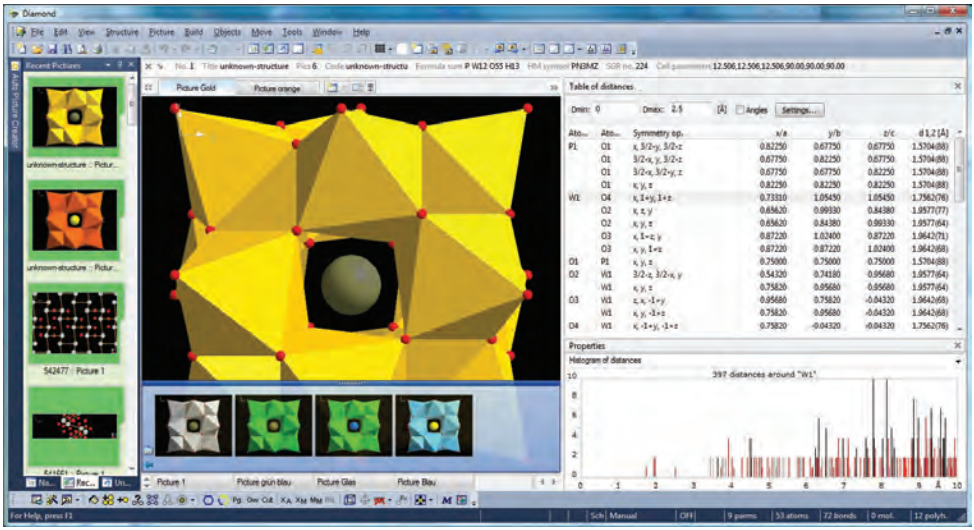
Der dreitägige Workshop (Informationen unter *http://www.helmholtz-berlin.de/events/bessy-mx-workshop/previous-workshops/2011*) untergliederte sich in die Vermittlung der wissenschaftlichen Grundlagen durch zehn Vorträge der sieben eingeladenen Betreuer zu den Themen Synchrotronstrahlung, Kristallvorbereitung, Sammlung und Auswertung von Diffraktionsdaten am Synchrotron, Qualitätskriterien von Diffraktionsdaten, Strahlenschaden sowie Phasenbestimmung. Weiterhin wurden die Studenten während der Durchführung von fünf Röntgenbeugungsexperimenten (je ein Experiment pro Gruppe von vier Studenten) an den HZB-Strahlrohren für Makromolekulare Kristallographie und bei der erfolgreichen Auswertung der Beugungsdaten durch die Betreuer unterstützt. Am Ende des Workshops hatten die Studenten Gelegenheit, ihre erzielten Ergebnisse als Präsentation den anderen Teilnehmern vorzustellen. Das wissenschaftliche Programm wurde durch eine Postersession mit Beiträgen der Workshopteilnehmer abgerundet und es wurde ein Posterpreis für das beste Poster vergeben. Diesen erhielt Maika Genz aus Leipzig für ihr Poster „Development of Novel Artificial Metallo-Enzymes for Enantioselective Catalysis“. Eine Besonderheit dabei war, dass die 20 teilnehmenden Studenten selbst das beste Poster auswählen durften.

Die Veranstaltung konnte durch die großzügige finanzielle Unterstützung der DGK und des HZB sowie durch Spenden der IUCr und von internationalen Firmen und einer Tagungsgebühr von 50 bzw. 60 € pro Teilnehmer vollständig finanziert werden. Die Organisatoren und auch die Teilnehmer schätzen diesen Workshop als sehr gelungen ein. Durch das große Engagement aller Mitwirkenden war es möglich, das anspruchsvolle Programm umzusetzen und somit ein Maximum an Wissensvermittlung zu erreichen. Aufgrund des überaus positiven Feedbacks von Seiten der Teilnehmer, wird der Workshop im Jahr 2013 erneut stattfinden.

Annette Faust (Universität Kiel), Uwe Müller (HZB) und Manfred S. Weiss (HZB)

DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Lernen Sie Diamond neu kennen!

Die demnächst verfügbare **Diamond Version 4** wird eine ganze Reihe von neuen Features beinhalten:

Der “Auto Picture Creator” erlaubt nun erstmals die Darstellung eines Strukturbilds auch ohne die bisher Diamond-typischen (manuellen) Aufbauoperationen: Das Strukturbild lässt sich optional einfach durch die An- oder Abwahl bestimmter Optionen gestalten. (Natürlich bleiben die bekannten Aufbauoperationen trotzdem jederzeit verfügbar!)

Oder nutzen Sie den neuen Modus für eine intuitivere Erkundung von Kristallstrukturen, z.B. durch eine Vorschau der Nachbaratome mit über das Mausrad variabler Größe der Suchsphäre, die automatische Analyse der Umgebung von Atomen basierend auf Dirichlet Domänen, oder die verbesserte Festlegung von Bindungssphären (Konnektivität).

Weitere herausragende Neuerungen sind:

- Einfachere und intuitivere Rotation und Zoom des Strukturbilds durch neuen “Grab”-Modus
- Vorschau der Nachbarn des Atoms unter dem Mauszeiger als halbtransparente Objekte
- Einbeziehung von H-Brücken und nichtbindenden Kontakten bei der Suche nach Nachbarmolekülen und beim Aufbau von Molekülclustern
- Benutzerdefinierbare Design-Schemata
- Undo mehrerer Operationen gleichzeitig, unterstützt durch Thumbnail-Previews
- Verbesserte automatische Generierung von Strukturbildern
- Nähere Informationen erhalten Sie unter: **http://www.crystalimpact.com/diamond/v4-preview.htm**

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

XXXIII. Arbeitstagung des AK 4 „Nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen“

18. bis 20.07.2012, Düsseldorf

Der Arbeitskreis führte die XXXIII. Arbeitstagung unter dem Titel „Bridging the scales in Glasses“ mit etwa dreißig Teilnehmern in Düsseldorf durch. Die Tagung war gemeinsam von Prof. Jürgen Horbach (Düsseldorf) und Dr. Bernd Müller (Jena) vorbereitet worden. Der thematische Schwerpunkt war auf die Struktur und die Dynamik struktureller Gläser gerichtet. Mikroskopische Mechanismen makroskopischer Prozesse wie diffusiver Transport, der nichtlineare Response von Gläsern auf äußere Felder bis hin zur Entwicklung von Scherbändern, sowie Bruch und Phasenseparation stellten den speziellen Fokus des Workshops dar. Tagungsprogramm, Teilnehmer und Kurzfassungen der Vorträge sind verfügbar unter *http://www2.thphy.uni-duesseldorf.de/briscagla/p_con.php*.

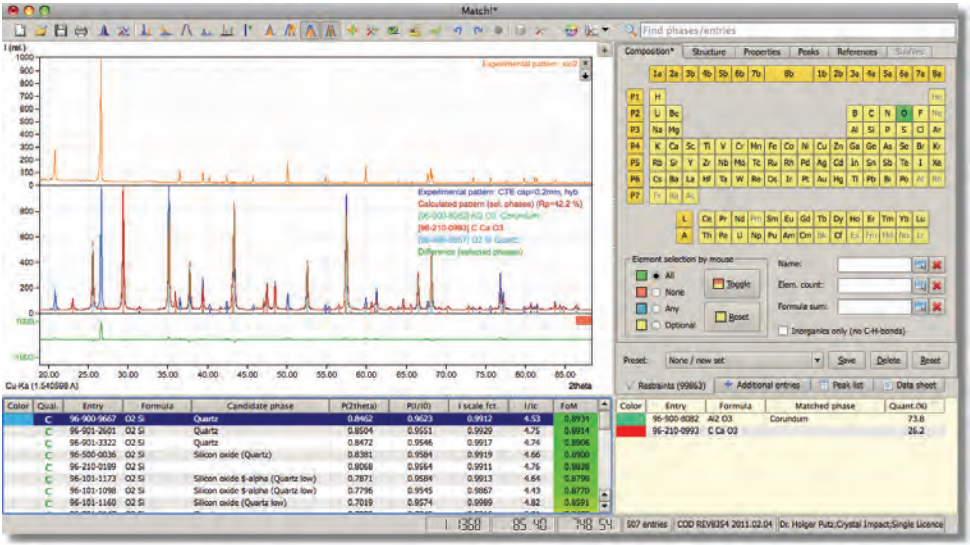
Mit diesem Tagungsprogramm wurde die auf der XXXI. Arbeitstagung im Jahr 2010 in Wolfersdorf eingeleitete thematische Erneuerung des Profils des Arbeitskreises weitergeführt. Die anwesenden Mitglieder des Arbeitskreises dankten dem aus dem Amt scheidenden Sprecher, Herrn Dr. Bernd Müller, sehr herzlich für seine über zwanzig Jahre hinweg kontinuierlich fortgesetzte Tätigkeit als Sprecher. Herr Dr. Müller hatte die Reorganisation des Arbeitskreises in der Zeit um 1990 im Rahmen der sich damals stark verändernden Bedingungen einschließlich der Strukturen der wissenschaftlichen Gesellschaften in der vergrößerten Bundesrepublik Deutschland äußerst erfolgreich und mit hohem persönlichen Einsatz bewältigt. Es entstand der von Herrn Dr. Müller geleitete Arbeitskreis 4 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, der sich den Problemen und Eigenheiten nichtkristalliner, partiellkristalliner und nanokristalliner Strukturen zuwendet.

Herr Prof. Jürgen Horbach (horbach@thphy.uni-duesseldorf.de), Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, wurde am 19.07.2012 einstimmig als Sprecher des Arbeitskreises gewählt. Herr Dr. Helmut Hermann (h.hermann@ifw-dresden.de), Leibnitz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden, wurde als Stellvertreter des Sprechers ebenfalls einstimmig wiedergewählt.

Jürgen Horbach, Helmut Hermann, Bernd Müller

MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction - Version 2



Neue Version 2 verfügbar!

Auch wenn Sie ein anderes Betriebssystem als Windows verwenden, können Sie in Zukunft unsere Software nutzen: Die neue Version 2 von Match! läuft neben Windows auch auf Mac OS X und Linux-Plattformen.
Wie Sie im obigen Screenshot sehen können, wurde außerdem die Benutzeroberfläche vollständig überarbeitet: Sie bietet nun die Möglichkeit, Restraints und zusätzliche Informationen sehr einfach und schnell auf der oberen rechten Seite auszuwählen. Desweiteren gibt es nun eine separate Tabelle für selektierte Phasen unten rechts. Schließlich ist es möglich, in der Grafik links mehrere Pulverdiffraktogramme übereinander darzustellen.
Versuchen Sie es! Eine voll funktionsfähige Testversion kann von der Crystal Impact Webseite **kostenlos** heruntergeladen werden.

Die wichtigsten Neuerungen sind:

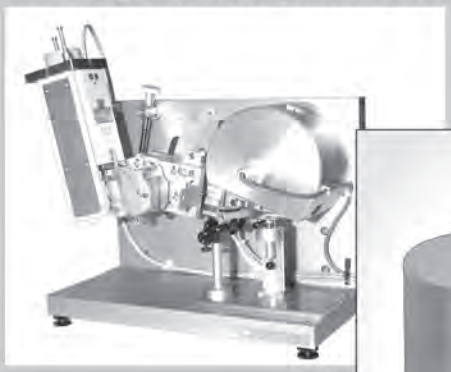
- Lauffähig auf Windows, Mac OS X und Linux
- Gestapelte Darstellung mehrerer Pulverdiffraktogramme, z.B. zum besseren Vergleich
- Direkte Suche nach bekannten Phasen
- Schnelle Nutzung zusätzlicher Informationen und Selektionskriterien ohne Umweg über den “Restraints” -Dialog
- Einfache Speicherung von Selektionskriterien unter benutzerdefinierten Namen
- Komfortable manuelle Modifikation des automatisch ermittelten Untergrundprofils
- Stark verbesserte Zoom-Funktionen
- Benutzerdefinierbare Automatikfunktionen
- **Kostenlose Testversion** sowie weitere Infos: **http://www.crystalimpact.com/match**

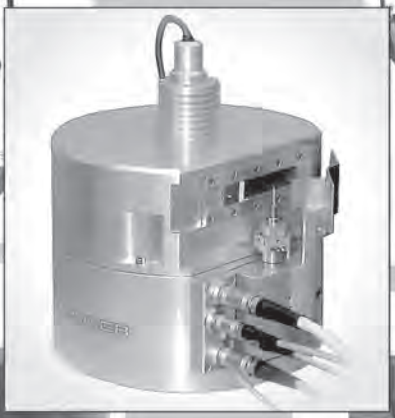
CRYSTAL IMPACT
CRYSTAL IMPACT
H. Putz & K. Brandenburg GbR
Kreuzherrenstr. 102
D-53227 Bonn

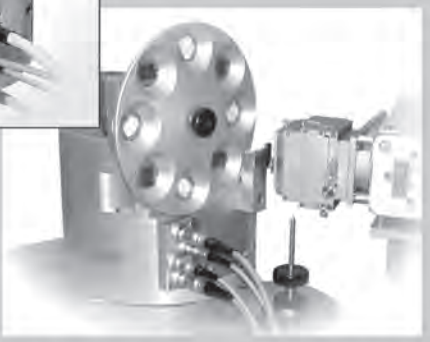
Tel.: +49 (228) 981 36 43
Fax: +49 (228) 981 36 44
E-mail: info@crystalimpact.com
http://www.crystalimpact.com

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

BERICHT DES AK 6 „MOLEKÜLVERBINDUNGEN“

Der Arbeitskreis Molekülverbindungen hat sich 2012 an der Jahrestagung der DGK in München beteiligt und den alle zwei Jahre stattfindenden Intensivkurs Einkristallstrukturanalyse unterstützt. Noch am Jahresende 2011 fand mit Unterstützung der DGK und unter Beteiligung des AK 6 ein Workshop zur geplanten ChemCryst-Synchrotronbeamline beim DESY statt.

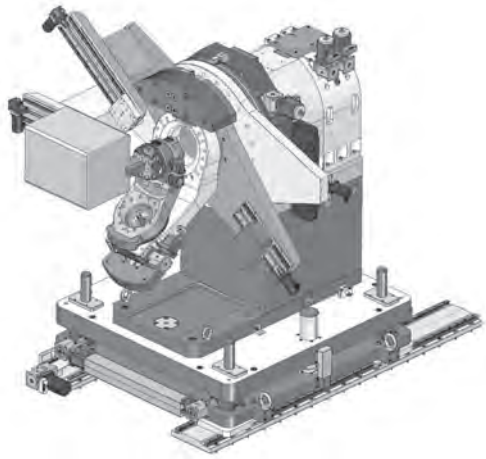
Anlässlich der Jahrestagung in München wurde das Mikrosymposium MS 5 „Electron Densities and Other Precision Studies“ ausgerichtet. Hier konnte neben Rednern von deutschen Universtäten (u. a. Peter Luger) auch Claude Lecomte (Nancy, Frankreich) für einen Vortrag über kombinierte Verfeinerung von Elektronendichte aus Röntgenbeugungsdaten und magnetischer Struktur aus Neutronenbeugungsdaten gewonnen werden. Neben den sechs Vorträgen konnte der 100. Geburtstag des Laue-Experiments mit weiteren Posterbeiträgen zum Themenschwerpunkt des Mikrosymposiums bereichert werden.

Die Kristallstrukturanalyse als analytisches Werkzeug hat in der präparativen Chemie eine nicht mehr wegzudenkende Rolle. Instrumentelle Weiterentwicklungen und nutzerfreundliche Software erlauben ein hohes Maß an Automatisierung, während gleichzeitig die Zahl der veröffentlichten Kristallstrukturen von Molekülverbindungen in der *Crystal Structures Database* des *Cambridge Crystallographic Data Centre* als zentrale Hinterlegungsstelle rapide zunimmt. Andererseits nimmt die Zahl der kristallographischen Lehrstühle und der kristallographisch orientierten Arbeitsgruppen in den Chemiefachbereichen weiter ab. Vor diesem Hintergrund ist die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses ein zentrales Anliegen des AK 6. Mit dem Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung“ der 2000 ins Leben gerufen wurde, haben der AK 6 und der mit dem AK 6 eng verbundene Arbeitskreis ChemKrist der GDCh-Fachgruppe „Analytische Chemie“ ein wichtiges Forum

geschaffen, um auch künftig die qualifizierte Anwendung der Einkristallstrukturanalyse in der präparativen Chemie zu unterstützen. Vom 10. bis 14. September versammelten sich 36 Teilnehmer und sechs Dozenten am traditionellen Veranstaltungsort, dem Kloster Hardehausen in der Nähe von Warburg, um mit Papier und Bleistift die Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung im Wechsel zwischen Vorlesungen und Übungen zu erarbeiten. Der anstrengende Unterricht wurde durch ein abendliches Rahmenprogramm (Kegeln, Volleyball, Hallenfußball, Schwimmen) aufgelockert. Die diesmal völlig verregnete Wanderung tat der guten Stimmung nur wenig Abbruch und das Gruppenfoto konnte am nächsten Tag wieder bei strahlendem Sonnenschein aufgenommen werden. Für September 2014 ist der nächste Kurs geplant und erste Anfragen liegen bereits vor.

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

Workshop zur „Chemical Crystallography“ Beamline P24 an der Petra III-Erweiterung (BMBF-Verbund, AK 6, AK 11)



Mit der endgültigen Abschaltung von Doris III (DESY, Hamburg) gehen eine Reihe erfolgreicher Beamlines außer Betrieb, die als Messplätze für einen breiten Bereich kristallographischer Fragestellungen, wie z. B. Studien diffuser Streuung, Elektronendichten, Phasenübergänge, modulierter und fehlgeordneter Strukturen bei hohen und tiefen Temperaturen, hohen Drücken oder unter externen Feldern, gedient haben. Im Rahmen eines BMBF-Verbundprojekts zum Aufbau einer dedizierten kristallographischen Beamline an der Petra III-Erweiterung und mehrerer Nutzer-Workshops in Kooperation mit den Arbeitskreisen 6 und 11 der DGK wurden die Spezifikationen und das Layout eines neuen Diffraktometers spezifiert und im Frühjahr 2012 eine europaweite Ausschreibung veröffentlicht. Das Diffraktometer (siehe Abbildung) ist derzeit im Fertigungsprozess und die Lieferung wird im Sommer 2013 erwartet.

Das Vierkreis-Diffraktometer (Kappa-Geometrie, ca. 3500 kg) besitzt zwei unabhängige Detektorkreise mit einer maximalen Belastbarkeit von 30 kg, ausgerüstet mit motorisierten Gegengewichten um maximale Detektortranslationen von 500 mm auszugleichen. Die Fehlerkugel der Theta- und Omegakreise bei Mehrachsenbewegungen beträgt weniger als 10 µm bei einer Reproduzierbarkeit von weniger als $2 \cdot 10^{-4}$ deg. Die inneren Kreise (Kappa, Phi) besitzen eine Fehlerkugel kleiner 25 µm für Probengewicht bis 5 kg bei einer maximalen Belastung von 10 kg. Der Phi-Kreis ist mit einem motorisierten xyz-Tisch mit einer Genauigkeit im Mikrometerbereich ausgerüstet. Der für Probenumgebungen verfügbare Platz beträgt 190 mm und lässt sich ohne xyz-Tisch auf maximal 250 mm erweitern.

Im Rahmen des BMBF-Verbundes und in enger Kooperation mit den AKs 6 und 11 fand am 18.01.2013 ein Workshop (DESY, Hamburg) statt, auf dem Details des Diffraktometers und Fragen der experimentellen Infrastruktur von Kontroll- und Experimentierhütten diskutiert wurden. In Diskussionen zu Vorträgen von Workshop-Teilnehmern (Hasylab, Universitäten Hamburg, Bayreuth, München, Freiberg und Göttingen, MPI Mülheim, MPI Düsseldorf, FZ Jülich, Röntgen-Anström-Cluster Schweden) wurden neue potentielle Forschungsgebiete und weitergehende infrastrukturelle Erfordernisse spezifiziert.

Carsten Paulmann, Hamburg

Satellite-Workshop „Neutronenstreuung für Kristallographen“ des AK 7 „Neutronenstreuung“ auf der DGK-Tagung 2012

15. bis 16.03.2012, München

Im Anschluss an die Jahrestagung der DGK im Laue-Jahr 2012 führte der Arbeitskreis „Neutronenstreuung“ vom 15. bis 16. März in München einen Satellite-Workshop durch mit dem Ziel, interessierten Studenten und Wissenschaftlern der verschiedenen Natur- und Materialwissenschaften eine Einführung in die Grundlagen und vielfältigen Anwendungen der Neutronenbeugung für die Strukturanalyse anzubieten.

Am ersten Tag des Workshops wurden den Teilnehmern an der Forschungsneutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) in Garching die verschiedenen Methoden am Beispiel mehrerer dort betriebener Instrumente vorgestellt. Dabei wurden auch die grundlegenden Unterschiede zwischen Röntgen- und Neutronenbeugung sowie der Zugang zu Instrumenten an Großforschungseinrichtungen diskutiert. Am zweiten Tag hörten die Teilnehmer Vorträge mit den Schwerpunkten Pulver- und Einkristalldiffraktion, Magnetismus, Spektroskopie, Textur- und Spannungsanalyse sowie Kleinwinkelstreuung von Dr. Gilles (TUM), Dr. Schneidewind (HZB), Prof. Dr. Braden (Uni Köln), Prof. Dr. Brockmeier und Prof. Dr. Willumeit (beide HZG) sowie Dr. Meven (RWTH Aachen). Zahlreiche Beispiele aus Kristallographie, Physik, Chemie, Biologie und Materialwissenschaften veranschaulichten die vorgestellten Grundlagen und Anwendungen.

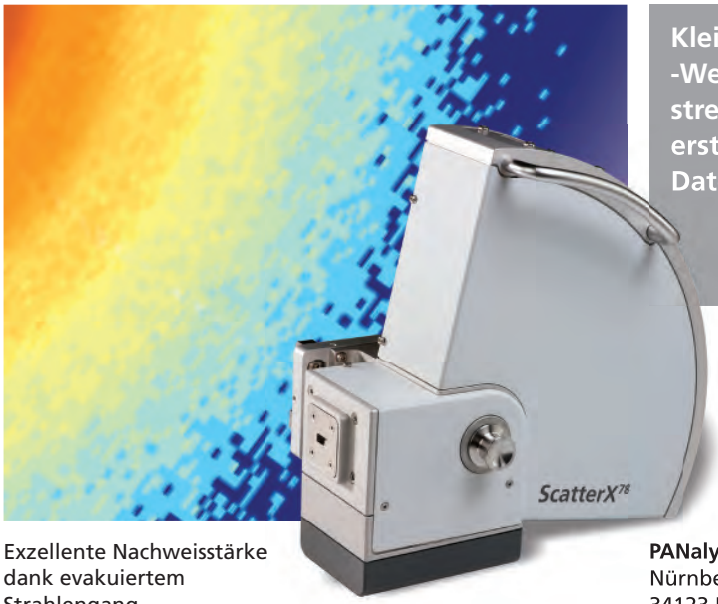
Mit rund 25 Teilnehmern aus Wissenschaft und Industrie war der Workshop gut besucht. Die zahlreichen Fragen und angeregten Diskussionen der Teilnehmer im Anschluss an die Vorträge und während der Führung zeigen das große Interesse an den vorgestellten Themen.

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

Martin Meven, München

SCATTERX78

SAXS/WAXS auf dem Empyrean-Multifunktions-Diffraktometer



Kleinwinkel und -Weitwinkel-streuung mit erstklassiger Datenqualität

Exzellente Nachweisstärke dank evakuiertem Strahlengang.
Winkelbereich 0.08-78 Grad.
2D-SAXS Option.

Entdecken Sie die Nanowelt mit Empyrean, der universellen XRD-Plattform.

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

The Analytical X-ray Company

PANalytical

BERICHT ZUM DOKTORANDEN-SHORTCOURSE

„ANWENDUNGEN DER FESTKÖRPER-NMR-SPEKTROSKOPIE IN DER MINERALOGISCHEN UND GEOWISSENSCHAFTLICHEN FORSCHUNG“

29.05. BIS 01.07.2012, BOCHUM

Auch in diesem Jahr fand in der Woche nach Pfingsten vom 29. Mai bis 1. Juni in Bochum wieder der DMG/DGK-Shortcourse zur NMR-Spektroskopie statt. Unter der Leitung von Dr. Michael Fechtelkord haben sich 14 Teilnehmer aus zahlreichen Universitäten sowohl aus Deutschland als auch der Schweiz und Österreich vier Tage lang intensiv mit den Möglichkeiten der Festkörper-NMR-Spektroskopie beschäftigt.

Nach dem Erarbeiten der physikalischen Grundlagen am Vormittag wurde das neue Wissen nachmittags an praktischen Beispielen selbst ausprobiert. So startete der Dienstagnachmittag mit den ersten Gehversuchen am Spektrometer beim Messen der ^{1}H-Spin-Gitter-Relaxation und Dynamik am Beispiel des Tetramethylammoniumjodids. Hierbei erhielten die Teilnehmer einen ersten Einblick in die Handhabung des Spektrometers sowie in die Präparation der Probe und den Aufwand einer Messung. Anschließend wurden die temperaturabhängigen Spektren ausgewertet und die Aktivierungsenergie sowie die Korrelationszeit bestimmt.

Nach diesem schwungvollen Einstieg in das Thema und dem Abbau der ersten Berührungsängste mit dem großen Magneten (siehe Foto) ging es am nächsten Tag weiter mit den Dipol- und chemischen Wechselwirkungen. Es wurde der Frage nachgegangen, wie man trotz Anisotropie-Effekten ein gutes Spektrum bekommen könne. Die Antwort ist simpel und faszinierend zugleich: mittels des magischen Winkels. Dass die Auswertung von eigentlich einfachen Spektren durchaus eine Herausforderung sein kann und auch Erfahrung hierbei eine große Rolle spielt, zeigte sich dann am Nachmittag bei der Auswertung und Einführung in das Programm DM2011.

Am Donnerstag erhielten die Teilnehmer einen weiteren Einblick in die Vielfältigkeit der NMR-Spektroskopie. Nachdem bereits eindrucksvoll demonstriert wurde, wie mittels NMR-Spektroskopie die lokale Verzerrung in Kristallgittern durch Dotierung sichtbar gemacht werden kann, widmete man sich heute dem Problem des ^{13}C und ^{29}Si, welche beide sehr selten in der Natur vorkommen jedoch von enormer Wichtigkeit sind.

Es ist wahrlich faszinierend zu sehen, welche Möglichkeiten in der Probenanalytik sich mit Hilfe der NMR-Spektroskopie ergeben und mit welch zahlreichen und raffinierten Lösungsansätzen Wissenschaftler es immer wieder schaffen, das was auf den ersten Blick nicht messbar ist, doch noch sichtbar zu machen. So wurde zum krönenden Abschluss das Phänomen der Quadrupolwechselwirkung demonstriert, welche es möglich macht Elemente wie Deuterium zu messen.

Last but not least hat der Kurs neben dem neu erworbenen Wissen dazu beigetragen, dass sich junge Wissenschaftler in entspannter Atmosphäre austauschen konnten. So war für den ersten Abend ein gemeinsames Abendessen organisiert, bei dem sich die Teilnehmer bei sehr gutem Essen näher kennenlernen konnten. Am Donnerstag wurde es dann sportlich, denn es ging auf zum Kegeln. Mit diesem Bild der praktischen Suche nach der Resonanz beenden wir den diesjährigen Bericht über einen wieder einmal sehr gelungenen Kurs und hoffen, dass er denen, die nach uns kommen, ebenso viele neue Einblicke bringt.

Naemi Waeselmann, Hamburg

Bericht über die Aktivitäten des AK 14 „Computational Crystallography“

für den Zeitraum von März 2011 bis März 2012

Von Sonntag, dem 12. Februar 2012, bis einschließlich Dienstag, dem 14. Februar 2012, führte der Arbeitskreis 14 (Computational Crystallography, Prof. Dr. G. Raabe, RWTH Aachen) mit finanzieller Ünterstützung der Firma Grünenthal GmbH in den Räumlichkeiten des Instituts für Organische Chemie der RWTH Aachen einen Workshop zu dem sehr anspruchsvollen Thema „The Maximum Entropy Method“ durch. Die Rednerinnen und Redner sowie ihre Themen waren:

- Prof. Dr. Sander van Smaalen (Universität Bayreuth)
  - „Principles of the Maximum Entropy Method“
  - „Application of the Maximum Entropy Method to Aperiodic Crystals“

- Dr. Jeanette Netzel (Universität Bayreuth)
  - „The Application of the Maximum Entropy Method to X-Ray Diffraction Data“
  - „The Maximum Entropy Method in the Study of Charge Densities“

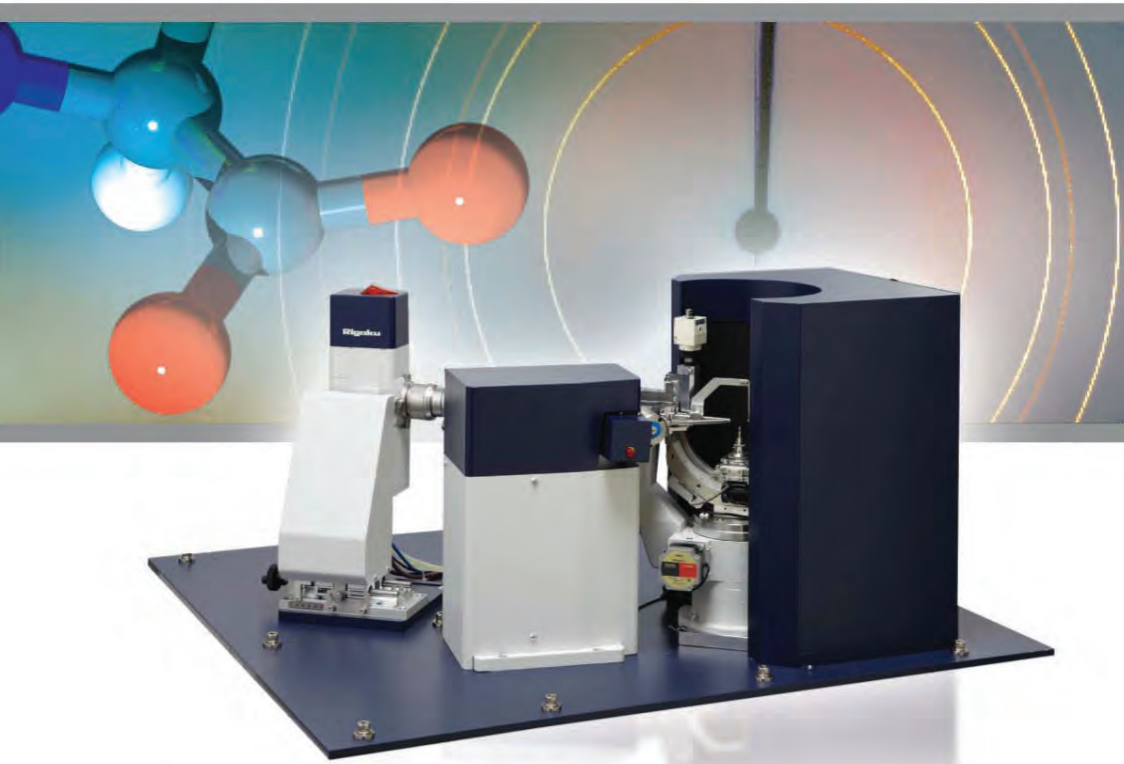
- Oxana Magdysyuk, M. S. (Max-Planck-Institut für Festkörperforschung Stuttgart)
  - „The Application of the Maximum Entropy Method to Powder Diffraction Data“ (2 Vorträge)

Jeder einzelne Vortrag betrug 45 Minuten. Die Gesamtzahl der Teilnehmer (inkl. der Redner) betrug 25 Personen. Für das Frühjahr 2013 (vermutlich Anfang Februar) ist ein weiterer Workshop in Aachen vorgesehen. Das Thema und der genaue Termin stehen noch nicht fest, werden aber rechtzeitig mitgeteilt.

Gerhard Raabe, Aachen

The DualSource RAPID II

The most flexible diffractometer in the world



- Small molecule crystal structures
- Powder diffraction
- Protein crystal structures
- Absolute determination of chiral compounds
- Diffuse scattering
- Supermolecular structures
- Twinned and disordered crystals

Rigaku

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

BERICHT VOM AK 16 „APERIODISCHE KRISTALLE“

Der Arbeitskreis 16 organisiert in Zusammenarbeit mit dem „European C-MAC“ und Prof. Marc de Boissieu (Grenoble) die „2nd International School on Aperiodic Crystals“, welche vom 7. bis 12. April 2013 an der Universität Bayreuth stattfinden wird. Aktuelle Informationen zum Programm und zur Registrierung finden Sie auf den Internetseiten der „School“ unter ***http://old.crystal.uni-bayreuth.de/aperiodic_crys_school_2013*** sowie in der Ankündigung auf Seite 132.

Letzte Aktivität des Arbeitskreises 16 war der erfolgreiche „Workshop on structural analysis of aperiodic crystals“, welcher vom 17. bis 20. März 2011 an der Universität Bayreuth stattgefunden hat. Im Jahr 2012 gab es keine Veranstaltungen.

Sander van Smaalen, Bayreuth

BERICHT AUS DEM AK 18 „OBERFLÄCHEN UND GRENZFLÄCHEN“

Das letzte Treffen des Arbeitskreises 18 „Oberflächen und Grenzflächen“ fand am 22. September 2011 im Rahmen der gemeinsamen Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft und der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft an der Universität Salzburg statt.

Unmittelbar nach den AK-Treffen wurde auf der Tagung das vom Arbeitskreis betreute und geleitete Mikrosymposium „Mineral and Crystal Surfaces“ abgehalten. Das Symposium umfasste eine sehr interessante Vielfalt an unterschiedlichen Vorträgen rund um das Thema Oberflächen und Grenzflächen. Den Key-Note-Vortag des Symposiums hielt Martin Dietzel (Graz) zum Thema „Interaction of silicic acid with mineral surfaces in the aspects of silicate weathering and adsorption“. Weitere interessante Vorträge folgten zur Auflösung von Pyrrhotin (Harries, Pollok, Langenhorst), zum Wachstum von Magnetit (Berninger, Gautier, Schott, Jordan), über Strontiumtitanat-Oberflächen (Stöcker, Hanzig, Seibt, Richter, Zschornak, Meyer), zu Olivin-Oberflächen (Gurmani, Jahn, Brasse, Schilling) und zur Diffusion auf Korngrenzen (Adjaoud, Jahn). Darüber hinaus waren auch mehrere oberflächenbezogene Beiträge als Poster auf der Tagung präsent.

Das nächste Treffen des Arbeitskreises 18 „Oberflächen und Grenzflächen“ findet voraussichtlich im Rahmen der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie 2013 in Freiberg statt. Nähere Informationen zu diesem Arbeitskreistreffen werden rechtzeitig bekannt gegeben.

Guntram Jordan, München

PERSONALIA

LAUDATIO ZUR VERLEIHUNG DES MAX-VON-LAUE-PREISES 2012 AN TILMANN LEISEGANG

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, verehrte Gäste,

es freut mich sehr, dass ich Ihnen die Arbeit von Herrn Dr. Tilmann Leisegang ausführlicher vorstellen darf.

Herrn Leisegang kenne ich bereits seit dem Jahr 2001, als es mir gelang, ihn für die Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Peter Paufler an der Technischen Universität Dresden, der ich zu dieser Zeit als Assistent angehörte, als studentischen Mitarbeiter zu gewinnen. Eine große Freude und Unterstützung war es für mich, dass Herr Leisegang nach dem Erwerb seines Abschlusses als Diplomphysiker bei Herrn Prof. Paufler – dies noch deutlich vor Erreichen der Regelstudienzeit – im Jahr 2004 das Risiko wagte, in die von mir gegründete „Nachwuchsgruppe Nanostrukturphysik“ einzutreten und so einen Keim für ein rasches und kohärentes Wachstum anlegte. Im Zusammenhang mit personellen Veränderungen zu jener Zeit in unserem wissenschaftlichen Umfeld, ergab es sich, dass Herr Leisegang von einem scheidenden Experten das vollständige Wissen für den Gerätebetrieb und die Datenevaluation im Röntgen-Einkristalllabor, für das er dann später verantwortlich tätig wurde, übernehmen musste. Insbesondere als sichtbarer und sehr verlässlicher Partner innerhalb des DFG-SFB 463 hat er sich bei den Fachkollegen der beteiligten Dresdner Institutionen, hier v. a. auch an den Max-Planck-Instituten sowie den Leibniz- und Helmholtz-Einrichtungen großes Ansehen erworben.

Meinen Vorschlag für die Würdigung der Arbeiten von Herrn Leisegang mit dem Max-von-Laue-Preis 2012 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie konnte ich nachdrücklich vortragen, da Herr Leisegang in allen Punkten für diesen hohen Preis außerordentlich ausgezeichnet ist. Die Zuerkennung des Preises wird Herrn Leisegang ganz bestimmt für seine Entwicklung hin zu einer stabilen beruflichen Position, die seinem ausgezeichneten Potenzial entspricht, maßgeblich unterstützen. Umgekehrt erscheint mir Herr Leisegang als Repräsentant junger Wissenschaftler und Sympathieträger innerhalb der DGK prädestiniert. Da ich erwarte, dass auf den Träger des Max-von-Laue-Preises im Zusammenhang mit dem Jubiläum des historischen Beugungsexperimentes in diesem Jahr und darauf folgend auch Aufgaben in der Öffentlichkeitsarbeit zukommen können, möchte ich angeben, dass ich Herrn Leisegang auch diesbezüglich für hervorragend geeignet halte. Während der geleisteten Lehrtätigkeiten hat Herr Leisegang jeweils die Studierenden für die Kristallographie und die Röntgenanalytik begeistert.

Einen besonderen Schwerpunkt der Arbeiten von Herrn Leisegang bildet die – auch für die Wirksamkeit und Ausstrahlung der Kristallographie als Querschnittswissenschaft – wichtige Arbeit an Großforschungseinrichtungen und hier insbesondere die Nutzung der Synchrotronstrahlung. Hierbei hat Herr Leisegang experimentelle Methoden wesentlich weiterentwickelt. Besonders erfreute mich so, dass Herr Leisegang als Federführer meiner Arbeitsgruppe eine Publikation zur Charakterisierung eines Oxidkristalls unter der Wirkung eines elektrostatischen Feldes mittels EXAFS verfasste, die als „Research Highlight“ des DESY-HASYLAB 2009 ausgewählt wurde. Dabei hatte Herr Leisegang über die Möglichkeit des reversiblen Schaltens des Valenzzustandes eines Übergangsmetalls des Oxids berichtet.

Die Arbeiten von Herrn Leisegang haben bisher in über 27 akzeptierten und weiteren eingereichten Arbeiten in zum Teil ganz ausgezeichneten internationalen Fachzeitschriften sowie in mehr als 56 Tagungsbeiträgen ihren Niederschlag gefunden. Herr Leisegang ist zusätzlich bei 4 erteilten Patenten maßgeblich als Erfinder beteiligt und verfügt über weitere Patentanmeldungen. Zwei der Patente, welche eine deutlich erhöhte wissenschaftliche Aussagekraft mittels Röntgendiffraktometrie gewonnener Ergebnisse in Aussicht stellen, werden im Rahmen eines von Herrn Leisegang geleiteten Technologietransfer-Projekts zur Anwendungsreife gebracht. Dafür warb Herr Leisegang im Jahr 2010 ein entsprechendes Stipendium ein. Im Zusammenhang kann Herr Leisegang auf einen ersten Platz im bundesweiten Gründungswettbewerb „start2grow“ für die beste Geschäftsidee verweisen; dies erfreulicherweise für kristallographisch und röntgenphysikalisch orientierte Fragestellungen. Herr Leisegang ist ferner an der Technischen Universität Bergakademie Freiberg beschäftigt, wohin er mir glücklicherweise folgte. Dort hielt er im Lehrauftrag u. a. eine Vorlesung im Bereich der Röntgenanalytik und Kristallographie; zusätzlich ist er als Betreuer diesbezüglicher Graduierungsarbeiten aktiv geworden und beteiligte sich bisher außerordentlich erfolgreich an der Einwerbung von Mitteln für einschlägig orientierte Forschungsvorhaben.

Neben seiner aktiven Teilnahme an den Jahrestagungen der DGK – hier beteiligte er sich schon frühzeitig als Student – ist Herr Leisegang auch durch die Mitarbeit in der Redaktion der „Mitteilungen der DGK“ insbesondere durch die geschickte Gewinnung industrieller Spender intensiv für die DGK tätig.

Die wissenschaftlichen Arbeiten hat Herr Leisegang zu einem guten Teil in seiner im April des Jahres 2010 mit dem Prädikat „Summa Cum Laude“ verteidigten Dissertation mit dem Titel „Röntgenographische Untersuchung von Seltenerdverbindungen mit besonderer Berücksichtigung modulierter Strukturen: Die Antwort der Kristallstruktur auf Stöchiometrie-abweichungen“ zusammengefasst. Das Zweitgutachten hatte Herr Prof. David Rafaja übernommen. Die Dissertation ist in die Reihe „Freiberger Forschungshefte“ – diese publiziert anerkannte wissenschaftliche Arbeiten nach der Entscheidung einer Fakultät – aufgenommen worden. Sowohl Form als auch inhaltlicher Ausdruck sowie der wissenschaftliche Gehalt dieser Dissertation entsprechen nach meiner Einschätzung den höchsten Maßstäben.

In der Gesamtschau der Dissertation finden sich Beispiele für die überwiegend röntgenographische Charakterisierung von Defekten der betrachteten kristallinen Seltenerdsysteme in allen drei Raumdimensionen und darüber hinaus. Dies betrifft Punktdefekte, chemische Stapelfehler, kommensurabel und inkommensurabel modulierte Strukturen sowie Ausscheidungen in Fremdphasen. Dieser Bogen und die umfassende Einleitung zu Struktur und Eigenschaften von Seltenerdsystemen verleihen der 270 Seiten umfassenden Arbeit den Wert eines Übersichtswerkes und auch weitgehend eines Lehrbuches. Vor allem diese Umstände haben mich als Doktorvater von Herrn Leisegang in der Phase der Ausarbeitung der Schrift bewogen, keine Einschränkung des außergewöhnlichen Umfanges dieser Dissertation einzufordern, zumal die Publikationsliste von Herrn Leisegang belegt, dass seine Ergebnisse und die von ihm vertretene Darstellung auch international anerkannt sind.

Die den Schwerpunkt der Arbeiten von Herrn Leisegang – und so auch den Inhalt der Dissertation – bildende röntgenographische Charakterisierung von Feinheiten der Kristallstruktur der untersuchten Systeme umfasst, wie deren große stoffliche Breite, ein ausgedehntes Spektrum von Röntgenmethoden. So hat Herr Leisegang spektroskopische

Methoden mit denen der Röntgen-Pulverdiffraktometrie sowie der Einkristalldiffraktometrie kombiniert und deren Aussagen mit den Eigenschaftsuntersuchungen, die, wie auch die Synthese, überwiegend bei Partnern innerhalb des SFB 463 durchgeführt wurden, wissenschaftlich in Zusammenhang gebracht. Herauszuheben ist aus meiner Sicht, dass Herr Leisegang sämtliche Untersuchungen, auch unter intensiver Nutzung der Synchrotronstrahlung, selbst durchgeführt und für die Auswertung die jeweils auf Konferenzen diskutierten modernsten Methoden kreativ verwendet hat. Dabei hat er ganz ausdrücklich in den meisten Fällen nicht auf Routineansätze zurückgegriffen, sondern im direkten Kontakt mit den Autoren der Computerprogramme – hier etwa mit Dr. Lukas Palatinus, beheimatet bei Prof. Vaclav Petricek in Prag – auch entsprechende Weiterentwicklungen stimuliert. Herr Leisegang verstand es so auch, moderne theoretische Methoden zur Strukturmodellierung – hier besonders die Dichtefunktionaltheorie – gezielt, mit dem Erfolg der Aufklärung struktureller Feinheiten, einzubeziehen. Insgesamt schätze ich Herrn Leisegang als einen Wissenschaftler ein, der das Gebiet der Röntgen-Feinstrukturanalytik in ganz ausgezeichneter Weise überblickt und dabei selbst in den jeweiligen Bereichen aktiv tätig wurde oder auch weiter werden sollte.

Hinsichtlich der Struktureigenheiten setzt Herr Leisegang in seiner Dissertation einen besonderen Akzent auf das immer noch moderne Gebiet der kommensurabel und inkommensurabel modulierten Strukturen sowie deren anspruchsvolle Beschreibung unter Zugrundelegung der Super-Raumgruppensymmetrie. Hierzu hat er verschiedene Kooperationen zu Wissenschaftlern international führender Gruppen gepflegt und davon profitiert: Dies betrifft beispielhaft Dr. Andreas Schönleber aus der Gruppe von Prof. Sander van Smaalen an der Universität Bayreuth und Dr. Thomas Doert aus der Gruppe von Prof. Michael Ruck an der Technischen Universität Dresden. Sein dabei erworbenes Wissen hat Herr Leisegang stets bereitwillig weitergegeben und auch weiterentwickelt. Ein Beleg ist die maßgebliche Betreuung der Diplomarbeit von Frau Julia Dshemuchadse, die heute der Gruppe von Prof. Dr. Walter Steurer an der ETH Zürich angehört.

Bitte gestatten Sie mir an dieser Stelle noch, einige konkrete Beispiele für Ergebnisse, die Herr Leisegang in seiner Dissertation diskutiert, anzugeben. So fand Herr Leisegang im System $CeSi_2$ erstmals eine inkommensurable Struktur am Phasenübergang von magnetisch geordnetem zu nichtmagnetischem Verhalten, was auf die Existenz eines quantenkritischen Punkts hinweist. Dafür gilt das System heute als erstes Beispiel. Im Schwere-Fermionen-System $CeCu_2Si_2$ wies Herr Leisegang nach – und hier war die bisher von mir noch nicht explizit erwähnte intensive Beschäftigung mit der Elektronendichte aus Einkristalldaten maßgeblich – wie durch gezielten Einbau von chemischen Stapelfehlern Supraleitung möglich wird. Schließlich konnte Herr Leisegang zeigen, dass im System Ho_2PdSi_3 magnetische Ordnung durch eine kommensurable Modulation im Untergitter der Seltenen Erde hervorgebracht werden kann.

Ergänzend sehe ich einen besonders herauszuhebenden Wert der Arbeiten von Herrn Leisegang in der nun greifbar gewordenen Möglichkeit der gezielten Herbeiführung der entsprechenden Realstrukturvarianten durch die direkte Korrelation mit den Syntheseverfahren bei Einstellung der zugeordneten Parameter. Dadurch ergibt sich ein großes Arsenal an Möglichkeiten der Gestaltung der Eigenschaften von entsprechenden Materialien, die auch für die kristallographische Grundlagenforschung weiterhin interessant sind und ohne diese nicht erkennbar werden können.

Die Arbeiten von Herrn Leisegang erscheinen mir als ein ausgesprochen schöner Beleg für das hohe Potenzial kristallographisch orientierter Forschung für den wissenschaftlichen Nachwuchs der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.

Damit bin ich am Ende meiner Ausführungen angekommen.

Dirk Meyer, Freiberg

NOSCE TE IPSO IN SILICIUM

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE AN PROF. DR. HELMUTH ZIMMERMANN

Lieber Herr Zimmermann, sehr geehrte Damen und Herren!

Jeder, der das Vergnügen hatte, Herrn Zimmermann in seinem Büro in Erlangen zu besuchen, konnte den feinen hintersinnigen Humor und die gute humanistische Bildung von Herrn Zimmermann an dem Spiegel in seinem Büro ausmachen. Schließlich stellte sich der Spiegel als eine große Scheibe eines Silizium-Einkristalls dar! Ich möchte diesen Spruch daher als Aufhänger für die Laudatio auf Herrn Zimmermann benutzen.

Es wäre so zum Beispiel Herrn Zimmermann niemals eingefallen, den Spruch über dem Spiegel zu ändern in

Nosce Te Ipso in *Diamantgitter*.

Als mathematisch geschulter Kristallograph ist es Herrn Zimmermann stets ein unerträglicher Graus, wenn sich in der Bezeichnung des „*Diamantgitters*“ ein tiefes Unverständnis über eine ordentliche Definition eines Gitters auf der einen Seite und einer Kristallstruktur auf der anderen Seite offenbart.

Schon eher wäre es Herrn Zimmermann zuzutrauen, dem Ausdruck:

Nosce Te Ipso in $Fd3m$ *(No. 227), a = 4,430 Å, Si auf 8a* $4\bar{3}m$ *1/8 1/8 1/8*

zuzustimmen. Der geneigte Hörer wird feststellen, dass Herr Zimmermann hier die Raumgruppenbezeichnung „$Fd3m$“ der Bezeichnung „$Fd\bar{3}m$“ vorzieht. Schließlich ist es hier gar nicht notwendig, aus der dreizähligen Achse eine dreizählige Drehinversionsachse zu machen. Denn die ursprüngliche Absicht hinter der Notation von Hermann und Mauguin war es ja, die Generatoren zu verdeutlichen, welche die Menge aller Symmetrieoperationen der Raumgruppe erzeugen.

Diese Ausführungen sollen Herrn Zimmermann nun nicht als kleinlichen Pedanten erscheinen lassen – was fälscher nicht sein könnte –, sondern nur hervorheben, dass Herr Zimmermann in seinem Studium der Mathematik eine profunde und genaue mathematische Bildung in Erlangen und Heidelberg erfahren hat, die ihm prägend das Bestreben zu mathematischer Eleganz, Klarheit und Einfachheit nahe gebracht hat. Wie der Laudator aus berufener Quelle erfahren hat, lernte man allerdings in Erlangen als Erstes „alles zu vergessen, was man über Mathematik wusste“. Statt dessen lernte man zu beweisen, dass man etwas beweisen kann. So etwas Schnödes, wie die Handwerksmathematik der Fouriertransformation, zumal in der eleganten Form der Fouriertransformation der Elektronendichte $\int_V \rho(\vec{r})\, e^{-2\pi i \vec{h}\vec{r}}$ blieben allerdings zunächst ein Rätsel.

Doch schon in seiner Promotionsarbeit lernte Herr Zimmermann dann die Kristallographie kennen und lieben und befasste sich mit Themen, wie der „Ableitung der Raumgruppen aus ihren klassengleichen Untergruppenbeziehungen“. Ein Schelm, wer dabei an eine gewisse Affinität zur Mathematik denken muss! Der Promotion folgte bald die Habilitation zum Thema „Normalisatoren kristallographischer Gruppen“, auch nicht unbedingt eine rein experimentelle Arbeit. In seinem wissenschaftlichen Leben als Professor in Bonn und

Erlangen hat Herr Zimmermann viele Beiträge geleistet zu Themen wie Raumgruppentheorie, Strukturlösungen, Symmetrieklassen von Kristallstrukturen sowie der Strukturlösung ohne Fouriertransformation. Daneben fand er Zeit als Coeditor des *Journal of Applied Crystallography* und der *Acta Crystallographica* zu arbeiten. Ganz offensichtlich ist es Herrn Zimmermann gelungen die reine Mathematik als „*Applied Crystallography*“ darzustellen. Damit nicht genug war Herr Zimmermann auch noch Schriftführer und Schatzmeister der DGK. Dass das experimentelle Arbeiten mit Kristallstrukturen Herrn Zimmermann immer ein Vergnügen war, zeigt hinlänglich die nebenstehende Abbildung.

Nun ist es aber höchste Zeit, ein lange streng gehütetes Geheimnis zu lüften. Denn dem feinen Humor von Herrn Zimmermann ist es zu verdanken, dass wir sagen können:

Nosce Te Ipso *in des Graphen Kristallo von Münchhausen.*

Unter diesem Pseudonym hat Herr Zimmermann eine ganze Reihe von überaus unterhaltsamen aber gleichzeitig hintergründigen kristallographischen Aufgaben formuliert, die sich im Archiv der DGK-Mitteilungen finden. Ein Beispiel sei hier aufgeführt:

> Im Salon des Graphen werden Rumkugeln gereicht, fein säuberlich zu einer kubisch flächenzentrierten Struktur gestapelt. Im Gespräch des Graphen und seiner Freunde entsteht nun eine hitzige Debatte, ob denn eine dichtere Raumerfüllung erreicht würde, wenn man die Oktaederlücken oder die Tetraederlücken mit kleineren Rumkugeln fülle, welche jeweils genau den Radius besitzen, um in die entsprechenden Lücken zu passen.

Soweit der trockene Teil der Aufgabe. Der Humor von Herrn Zimmermann wird an dem Nachsatz deutlich, mit dem die Aufgabe geschmückt war:

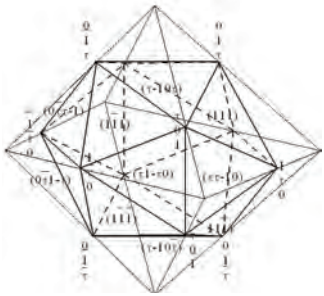
> Der Nachweis mittels echter Rumkugeln scheitert daran, dass die Kugeln während des Experimentes entweder weich oder weniger werden.

Die Abbildung zeigt Herrn Zimmermann, während im Hintergrund die Erlangener Studierenden an der Aufgabe verzweifeln! Diese und ähnliche Aufgaben sowie seine umfangreiche Tätigkeit in der universitären Lehre in Erlangen zeigen, dass Herr Zimmermann in seiner aktiven Zeit nie nur ein Professor, sondern auch ein Hochschullehrer war. Dass er auch intensiv mit der Betreuung der röntgenographischen Praktika des Lehrstuhls befasst war, zeigt, dass hinter der Berufung von Herrn Zimmermann zum Coeditor des *Journal of Applied Crystallography* halt doch ein großes Maß an experimenteller Erfahrung und Geschick steckt.

Es darf hier nicht unerwähnt bleiben, dass Herr Zimmermann auch gerne ein Fußballfan ist. Den Lieblingsverein verschweigen wir hier aus Gründen der Diskretion. Doch während für den gewöhnlichen Fußballfan der Ball nur rund ist, sieht ein gewiefter Kristallograph wie Herr Zimmermann mehr als nur diese einfache $m\infty m$-Symmetrie. Denn hört man Herrn Zimmermann aufmerksam zu, so kann man lernen,

dass die Anordnung der schwarzen und weißen Lederstücke auf einem Fußball topologisch gesehen natürlich ein Polyeder bildet. Dieses Polyeder hat dann die Symmetrie einer Punktgruppe, womit wir automatisch bei der Lieblingsbeschäftigung von Herrn Zimmermann landen, der mathematischen Kristallographie. In Erlangen haben wir daher von Herrn Zimmermann gelernt, dass der klassische Ball, aus Sechsecken und Fünfecken, hier natürlich als ordentlicher Polyeder dargestellt, eine ikosaedrische Symmetrie besitzt, bei der wir es mit den Blickrichtungen

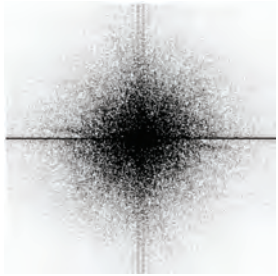
$$\pm[1\,\tau\,0], \pm[0\,1\,\tau], \pm[\tau\,0\,1], \pm[1-\tau\,0], \pm[0\,1-\tau], \pm[-\tau\,0\,1]$$



zu tun bekommen und sich die Symmetrie zusammensetzt aus 5-zähligen, 3-zähligen Drehachsen und Spiegelebenen. Da nun durch Fortschritte in der Fertigungstechnik neue Ballkonzepte möglich geworden sind, kann uns Herr Zimmermann zu jeder Europa- und Weltmeisterschaft mit neuen Symmetrievorlesungen begeistern. Diese Vorlesungen sind – Zimmermanschem Humor sei Dank – gespickt durch subtile Farbkombinationen nebeneinanderstehender Buchstaben, welche die Flaggen der beteiligten Staaten verdeutlichen.

Zum Schluss sei noch gesagt, dass für Herrn Zimmermann selbstverständlich auch gilt:

$$\text{Nosce Te Ipso in } \frac{1}{V}\sum_{\infty}^{\infty} F(\vec{h})\, e^{2\pi i \vec{h}\vec{r}}$$



hier in der mathematisch korrekten Definition der inversen Fouriertransformation mit einem positiven Vorzeichen im Exponenten. Ergänzt sei dies durch die Abbildung, welche die Fouriertransformierte einer bedeutenden Struktur darstellt. Mit diesem „Nosce Te Ipso“ will ich unterstreichen, dass Herr Zimmermann nicht nur reinster Theoretiker ist, sondern sich auch sehr gut auf das experimentelle Geschick versteht. Dieses Verständnis fand seinen Niederhall in zahlreichen Veröffentlichungen zu Kristallstrukturen und seinen stets exzellenten Praktikumsbetreuungen. Schmunzelnd muss hier gesagt sein, dass Herr Zimmermann selbstredend sich nie dazu durchringen würde, dieses „Nosce Te Ipso“ darzustellen als $\frac{1}{V}\sum_{\infty}^{\infty} F(\vec{Q})\, e^{i\vec{Q}\vec{r}}$, denn schließlich wäre dann das reziproke Gitter zu definieren als $a^* = \frac{2\pi}{a}$, mit einem Faktor 2π, der an dieser Stelle völlig unnötig ist und den ästhetischen Genuss des eleganten formalen Dualismus zwischen direktem und reziproken Gitter empfindlich stört.

Nun sei zum Schluss noch schnell die Fouriertransformierte der letzten Abbildung gezeigt, welche unseren Preisträger in jugendlicher Frische zeigt!

Lieber Herr Zimmermann, ich gratuliere Ihnen im Namen aller Mitglieder der DGK ganz herzlich zu dieser wohlverdienten Auszeichnung!

Reinhard Neder, Erlangen

DANKESWORTE ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2012 AN HELMUTH ZIMMERMANN

Für alle diejenigen, die nie einen Grundkurs in „Broken English“ absolviert haben und meiner Danksagung deshalb nicht oder nur teilweise folgen konnten, hier die deutsche Original-Version:

Liebe Kristallographen, liebe Gäste,

als ich in Erlangen meine Professorenstelle antreten wollte und zum Amtsarzt musste, fiel nach kurzem Vorgespräch der Satz: „Ach, Sie sind der ZIMMERMANN von BURZLAFF & ZIMMERMANN.“ Ja, es ist kein Geheimnis, dass auf den meisten Publikationen, auf denen der Name ZIMMERMANN auftaucht, auch der Name BURZLAFF erscheint. Das ist so eine Kombination wie SCYLLA und CHARYBDIS oder Ähnliches. Das Schöne daran ist, dass ich meine wissenschaftliche Laufbahn noch in einer Zeit beginnen konnte, als die „Ricola-Frage“: „Wer hat’s erfunden?“ nur eine untergeordnete Rolle gespielt hat, weil wir noch nicht durch Patentierungswahn und Firmengründungsforderungen von der wissenschaftlichen Arbeit abgelenkt wurden. Das war mehr wie beim Tischtennis: Der Ball flog hin und her und meistens landete er irgendwann unterm Tisch. Gelegentlich gelang ein Schmetterball, der dann auch Folgen hatte. Deshalb ist es mir ein ganz besonderes Bedürfnis an dieser Stelle HANS BURZLAFF zu danken, der erst vor Kurzem seinen 80. Geburtstag gefeiert hat und ich möchte Sie alle vereinnahmen, ihm zu diesem schönen Jubiläum zu gratulieren und weiterhin viel Glück und Segen zu wünschen.

Nun noch eine Bemerkung zum Wissenschaftlichen: Mal abgesehen von dem mathematisch-kristallographischen Spezialkram war das, was von uns wahrgenommen wurde, die Mitarbeit an den „International Tables, Band A“. Vermutlich hatten einige andere Mitarbeiter bald den Eindruck, dass hier Böcke zu Gärtnern gemacht wurden, weil wir die „Tables“ nie als die große Bilder-Bibel angesehen haben, sondern der Meinung waren, dass ein anständig ausgebildeter Kristallograph, der einige Wochen in Untersuchungshaft kommt (natürlich unschuldig), in dieser Zeit mit Papier und Bleistift seine eigenen „International Tables“ aufschreiben und skizzieren können sollte – er muss ja nicht! Sollte dann vielleicht eine Raumgruppe fehlen oder eine doppelt auftreten, so ist das nicht ehrenrührig, denn das ist schon SCHOENFLIES und FEDOROV passiert. Um in der Praxis fehlerfrei zu operieren, sei natürlich die Nutzung des dicken Buches oder seine elektronische Version empfohlen.

Einer solchen operativen Auffassung des Umgangs mit den Raumgruppen wurden allerdings immer wieder Hindernisse in den Weg gelegt. CARL HERMANN hat mit seinen Symbolen ein Erzeugendensystem der Punkt- und Raumgruppen charakterisiert, was leider der wissenschaftlichen Demenz zum Opfer fiel und womit die HERMANN-MAUGUIN-Symbole zu bloßen Raumgruppen-Namen aus Symmetrie-Elementen degenerierten, was wiederum dazu führte, dass Veränderungen an den Symbolen vorgenommen wurden, die jeweils eine Sondererklärung im kristallographischen Unterricht nötig machen. Hier drei Beispiele:

Beispiel 1: Die Einführung von $\bar{3}$ in die Symbole der zentrosymmetrischen kubischen Gruppen. Das Argument war: „Dann sieht man doch gleich, dass die Gruppen zentrosymmetrisch sind“ – was den Bachelor dazu anregt, Gleiches bei $\bar{4}2m$ anzunehmen. Das Problem, das für die Erzeugung der Raumgruppen daraus entsteht, ist: Die dreizählige Achse schneidet die Ebenen der erzeugenden Operationen in einem Punkt, den man bei der Erzeugung der Raumgruppen als ersten Nullpunkt wählen kann, während man die relative Lage des $\bar{3}$-Punkts als zusätzliche Information mitliefern muss. Über den optimalen Nullpunkt kann man dann nachdenken, wenn man die Raumgruppe erzeugt hat – man muss nicht auswendig gelernt haben, wie der $\bar{3}$-Punkt relativ zu den Ebenen liegt. In der Lehre bedeutet die $\bar{3}$-Modifikation, man muss dazu sagen, dass man den Querstrich vergessen soll, wenn man die Raumgruppe erzeugt.

Beispiel 2: Während die Abfolge der Blickrichtungen in allen kristallographischen Punktgruppen mit einer Blickrichtung beginnt, die die höchstzählige Achse enthält, findet man bei der Ikosadergruppe die Umkehrung der Reihenfolge 235, „weil man gleich sehen kann, dass in der Beschreibung die Basis der Gruppe 23 verwendet wird“. Wieder so eine Zusatzregel, über die sich der Lernende immer freut. Damals, als dies so fixiert wurde, dachte man noch: Lass’ halt laufen, so etwas Exotisches wie die Ikosaedergruppe brauchen nur Spezialisten, aber dann kam Herr SHECHTMAN mit seinen Quasikristallen…

Beispiel 3: Die Einführung der Gleitspiegelebene „*e*“ im Raumgruppensymbol würde der Theologe als „Sünde wider den Heiligen Geist“ bezeichnen. Nur weil eine Gleitspiegelebene „*a*“, die eine *C*-Flächenzentrierung enthält, auch eine Gleitspiegelebene „*b*“ ist, wird die eindeutige Benennung des erzeugenden Elements aufgegeben. Wieder ist es im Unterricht nötig, eine Zusatzregel zu predigen: „Vergiss das ‚*e*‘ im Raumgruppensymbol“.
Es gäbe noch mehr von dieser Qualität zu erwähnen, etwa die ellenlangen Listen von „Generators“, wo CARL HERMANN doch hervorragend begründete Erzeugende ausgedacht hatte.

Aber wenn ich das alles noch anspreche, werde ich endgültig als Bock im Barockgarten der „Tables“ identifiziert und muss die schöne Kleber-Münze wieder abgeben. Wer die „Tables“ auch weiterhin als Bilderbuch benutzen will, darf das ruhig tun und kommt deshalb nicht in Untersuchungshaft.

Ich danke WILL KLEBER für seine Mühe, mir auch mit Hilfe seines Lehrbuchs ein bisschen Kristallographie beigebracht zu haben – sein Buch habe ich noch vom Mindestumtausch in Mark der Deutschen Notenbank gekauft – eine hervorragende Investition!

Ihnen danke ich für die Münze und für Ihre Geduld.

Helmuth Zimmermann, Erlangen

WALTER BORCHARDT-OTT

*16.11.1933 TEMPELBURG (CZAPLINEK/POLEN)
†19.01.2012 MÜNSTER

(Foto: Lars Wiesner)

„…Mit Walter Borchardt-Ott verliert die Westfälische Wilhelms-Universität einen begeisterten und begeisternden akademischen Lehrer, einen immer ansprechbaren Kollegen, der engagiert und stets im Sinne des gesamten Instituts für Mineralogie gewirkt hat…“,

so heißt es im Nachruf der Universität vom 4.2.2012 auf ihren Akademischen Direktor a. D., dessen besondere Verdienste um die kristallographische Lehre von seinen deutschen und ausländischen Fachkollegen ausdrücklich gewürdigt zu werden verdient.

Als Folge der Kriegs- und Nachkriegswirren gelangte Walter Borchardt-Ott von seinem Geburtsort in der heutigen polnischen Woiwodschaft Westpommern zunächst nach Pasewalk, wo er 1953 das Abitur ablegte. Im gleichen Jahr nahm er dann das Studium der Mineralogie an der Universität Greifswald auf und setzte es 1955 an der Humboldt-Universität Berlin unter der Leitung von Will Kleber fort. Schon während der Diplomarbeit befasste er sich mit Problemen der Kristallzüchtung (Thema: „Whiskerwachstum bei anorganischen Salzen“, Abschluss 1958). Nach einer 1½-jährigen Tätigkeit im Physiklabor des Werks für Bauelemente der Nachrichtentechnik in Teltow begann W. Borchardt-Ott 1960 die Doktorarbeit in Ostberlin bei W. Kleber, floh aber im April 1962 vor deren Abschluss aus der DDR nach Westberlin und nahm am Institut für Mineralogie der Universität Münster seine Forschungsarbeit an einem neuen Thema auf, das er unter Leitung von Prof. Karl-Friedrich Seifert 1964 mit der Promotion zum Dr. rer. nat. abschloss. Der Titel seiner Doktorarbeit „Epitaxie von Vitamin B_{12} auf Quarz“ zeigt auch, wie weit die Ansätze moderner Biotechnologie zurückreichen.

Entscheidende Weichen für seine weitere Hochschullaufbahn wurden mit der Ernennung zum Akademischen Rat 1970 gestellt. Von nun an war er überwiegend mit Aufgaben der Lehre und der Organisation des Studiums, der Studienberatung und der Personalverwaltung befasst, was zugleich seinen Neigungen entsprach und daher besonders fruchtbar werden konnte. Hervorzuheben ist auch seine Fürsorge um das „Museum für Kristalle und Gesteine“ mit einer werbewirksamen Vortragsreihe. 1984 würdigte die Universität seine besonderen Verdienste durch Ernennung zum Akademischen Direktor.

Nach seiner Pensionierung im Jahre 1998 hat er sich besonders engagiert der laufenden Aktualisierung seines Lehrbuchs „Kristallographie“ bzw. „Crystallography“ und der Familie gewidmet, zu der zwei Kinder und fünf Enkel im Alter von 3 bis 20 Jahren gehören.

Die erste Auflage seines Buches „Kristallographie: Eine Einführung für Naturwissenschaftler“ erschien im Springer-Verlag bereits 1976 mit einem Umfang von 188 Seiten, die siebte war 2009 auf 360 Seiten angewachsen. Noch vor seinem Tod konnte er im Jahre 2011 die dritte Auflage der von Robert O. Gould besorgten Übersetzung ins Englische „Crystallography – An Introduction“ in den Händen halten. Es ist aber nicht die bloße Umfangserweiterung, die seine ständige Arbeit an dem Werke kennzeichnet, sondern es sind die Sorgfalt bei der Wahl der Begriffe, die Ausarbeitung zahlreicher Übungsaufgaben mit Lösungen und die laufend verbesserte Präsentation des Stoffes. Der Autor kommt dem Trend zum Erlernen kristallographischer Grundbegriffe im Selbststudium auch durch Vorlagen für Modellnetze zum Selbstbau von Polyedern entgegen, die eine Schlüsselrolle in der geometrischen Kristallographie und für die Schulung des räumlichen Vorstellungsvermögens überhaupt einnehmen. Er hat damit dem naturwissenschaftlichen Nachwuchs und darüber hinaus allen in kristallographische Lehre involvierten Fachkollegen ein wichtiges und zugleich handliches Erbe hinterlassen, das ihm einen bleibenden Platz in der Lehrbuchliteratur und im Gedächtnis der dankbaren kristallographischen Gemeinschaft sichern wird.

Frau Annette Wewel (geb. Borchardt-Ott) danke ich für ihre Hilfe.

Peter Paufler, Dresden

HEINZ JAGODZINSKI

20.04.1916 – 21.11.2012

Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Heinz Jagodzinski ist am 20. April 1916 in Aschersleben geboren und besuchte dort Schule und Gymnasium bis zu seiner Reifeprüfung im März 1935. Das Studium der Physik begann er im gleichen Jahr in Greifswald, wechselte aber 1936 nach Göttingen, wo er 1941 bei Mannkopff „Über die Druckabhängigkeit der Anregungstemperatur in der Lichtbogensäule“ promovierte. Die Arbeit erschien 1943 in der Zeitschrift für Physik 120, S. 318–330 als #1 seiner Publikationsliste. Als somit gestandener Wissenschaftler ging er 1942 die Ehe mit Margareta Brandenburg ein. Ihnen wurden in der Folge drei Kinder beschieden. Im Jahr 1948 erfolgte die Habilitation in Marburg im Fach Mineralogie als eine Frucht der gemeinsamen Tätigkeit mit Laves. Die Zeit mit Laves brachte Heinz Jagodzinski in sein zeitlebens wichtigstes Arbeitsgebiet, die Strukturanalyse fehlgeordneter Kristalle. Während des 2. Weltkrieges und in der unmittelbaren Nachkriegszeit ging es zunächst vornehmlich um eindimensionale Fehlordnungen sowie um Ordnungs- und Entmischungs-Vorgänge in Mischkristallsystemen. Drei der habilitationsrelevanten Arbeiten erschienen 1949 im Band 2 der neuen internationalen Zeitschrift Acta Crystallographica. Schon 1952 wurde Heinz Jagodzinski als Abteilungsleiter für Kristallkunde an das damalige Max-Planck-Institut für Silikatforschung nach Würzburg berufen, worauf auch bald (1955) eine Ernennung zum Apl.-Professor in Würzburg erfolgte. Eine Frucht dieser Würzburger Zeit war die „Guinier-Jagodzinski-Kamera“, ein hochauflösendes Transmissions-Pulverdiffraktometer (damals mit Röntgenfilm-Detektor), das nach dem Guinier-Prinzip mit Primärmonochromator fokussiert, präzise (z. B. auf $K\alpha_1$) monochromatisiert, und dabei die Detektion über einen sehr großen Bereich des Beugungswinkels zulässt (E. G. Hofmann, H. Jagodzinski, 1955: Eine neue, hochauflösende Röntgen-Feinstruktur-Anlage mit verbessertem, fokussierendem Monochromator und Feinfokus-Röhre. Zeitschrift für Metallkunde 46, S. 601–609). Ebenso vielbeachtet war ein Buchartikel „Kristallographie“, der die Seiten 1–103 im Handbuch der Physik, Bd. VII/1 (1956) bildete – damals eine Standard-Textquelle zur Physik tensorieller Materialeigenschaften. Im Jahr 1958 erfolgte ein Ruf an die Technische Hochschule Karlsruhe, wo Heinz Jagodzinski dann den Lehrstuhl für Mineralogie bis 1963 innehatte. Nachdem sich Zürich, Hamburg und Münster vergeblich um ihn bemüht hatten übernahm

Heinz Jagodzinski 1963 dann das Ordinariat für Kristallographie und Mineralogie an der Ludwig-Maximilians-Universität München, an der er bis zu seiner Emeritierung (1983) wirkte. Im Nebenamt leitete er dabei auch die Bayrische Staatssammlung für Mineralogie und unterstützte maßgeblich die kristallographische Forschung mit Neutronen am Forschungsreaktor in Garching. Seine umfangreichen wissenschaftlichen Interessen umfassten Fehlordnung in Kristallen, strukturelle Phasenübergänge und Überstrukturen – besonders in den Feldspäten, Entmischungsphänomene auch in Verbindung mit der Auslagerungs-Härtung von Legierungen, Oberflächenstrukturen, methodische und apparative Entwicklungen und die Theorie der Beugungserscheinungen und ihre Anwendung auf die zuvor beschriebenen Phänomene. Darüber hinaus engagierte er sich in den Mondforschungsprogrammen der NASA. Ein eminenter Buchartikel zusammen mit Friedrich Frey über *Disorder and Diffuse Scattering of X-rays and Neutrons* erschien 1993 im Volume B in den neuen *International Tables for Crystallography*. In der späteren Schaffensphase rückt Heinz Jagodzinski seinen Fokus auf die inkommensurablen Strukturen (z. B. W. Steurer & H. Jagodzinski, 1988: *The incommensurately modulated structure of andesine (An 38).* Acta Cryst. B44, S. 344–351) und die Quasikristalle (z. B. *Diffraction from the Fibonacci chain.* Z. Krist. 196, S. 1–19, 1991) sowie auf eine (erhoffte) allgemeine Lösung des Phasenproblems (H. Jagodzinski & H. Schulz, 1999: *A solution of the phase problem. I. Latent lattices and their optimisation.* Z. Krist. 214, S. 75–84). Insgesamt sind etwas mehr als 150 substantielle Publikationen von Heinz Jagodzinski bekannt, die am 31.12.2012 eine Resonanz von 1745 Zitaten hatten. Die bei Weitem am meisten (316-mal) zitierte Arbeit ist dabei die „Eindimensionale Fehlordnung in Kristallen und ihr Einfluss auf die Röntgeninterferenzen: 1. Berechnung des Fehlordnungsgrades aus den Röntgenintensitäten". Acta Cryst. 2, S. 201–207 (1949), gefolgt von den beiden anderen 1949er Acta-Cryst.-Arbeiten. Danach schließen sich mit über 90 Zitaten an: W. Moritz, H. Jagodzinski, D. Wolf, 1978: *Diffuse LEED intensities of disordered crystal surfaces 2. Multiple scattering on disordered overlayers*. Surface Sci. 77, S. 249–264, und der Klassiker *Polytypism in SiC crystals*. Acta Cryst. 7, S. 300–300, 1954.

Heinz Jagodzinski war Mitglied in zahlreichen wissenschaftlichen Gesellschaften und nahm wichtige Ämter wahr, so z. B. im Executive Committee der IUCr (1963–69) und als Vice President der IUCr (1972–75). Auch seine Tätigkeit bei der DFG im Senat und Kuratorium (1965–71), Hauptausschuss (1967–69) und als Vorsitzender des Apparate-Ausschusses (1971–77) sollen hier erwähnt werden. Einige andere Ehrungen, die mit weniger Pflichten verbunden waren als die Ehrenämter, sind die Ehrendoktorwürden der Universitäten Karlsruhe (1981) und Würzburg (1995), die goldene Ehrennadel der Max-Planck-Gesellschaft (1991), die Cothenius-Medaille in Gold (2001) von der Deutschen Akademie der Naturforscher, Leopoldina, Halle, wo er seit 1966 Mitglied und für einige Jahre auch Obmann war, und das Bundesverdienstkreuz 1. Klasse für Verdienste um die Naturwissenschaft (1984). Mitgliedschaften bzw. korrespondierende Mitgliedschaften bei/von der Bayrischen und der Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Ehrenmitgliedschaften und Medaillen bei/von der DMG, ÖMG und der *Société Française de Mineralogie et de Crystallographie* gehören ferner zu der stattlichen Liste von Ehrungen. Bei der DGK war Heinz Jagodzinski Ehrenmitglied seit 1996 und Träger der Carl-Hermann-Medaille des Jahres 2000.

Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Heinz Jagodzinski verschied am 21.11.2012 in München im Alter von 96 Jahren. Wir gedenken eines in allen Lebenssituationen sehr menschlichen Kollegen, der durch sein Lebenswerk weit über seine Zeit hinaus wirkt.

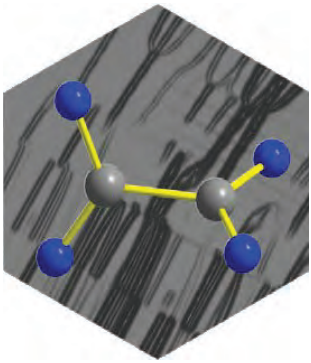
Wolfgang Schmahl, München

ANKÜNDIGUNGEN

DMG-Doktorandenkurs „Grundlagen und Anwendung der Rietveld-Verfeinerung“

4. bis 7. März 2013

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstraße 1, 70569 Stuttgart



Ziel des Intensivkurses ist es, die Grundlagen der Rietveld-Methode in Theorie und Praxis zu vermitteln. An Hand von ausgewählten Beispielen soll der gesamte Prozess von der Profilanpassung mittels Fundamentalparametern bis hin zur Bestimmung der Atomlagen mit anschließender Verfeinerung dargelegt werden. Im Einzelnen werden folgende Themen behandelt:

- Grundlagen der Pulverdiffraktometrie
- Whole Powder Pattern-Fitting (WPPF) mit Fundamentalparametern und Berücksichtigung komplexer Reflexprofile
- Korrekte Wahl von Korrekturfaktoren (LP-Faktor, Absorption, Mikroabsorption, Extinktion, Vorzugsorientierung)
- Methoden zur Entwicklung eines Startmodells für die Kristallstruktur.
- Erfolgreiche Anwendung von Penalty-Funktionen, Constraints, Restraints und Rigid Bodies
- Erfolgreiche Erstellung von Rigid Bodies (flexible Polyeder, Moleküle, z-Matrizen)
- Strukturlösungsstrategien mit globalen Optimierungsmethoden im Direktraum und Charge-Flipping
- Einsatz der Differenz-Fourier Methode in Kombination mit Rietveld-Verfeinerungen
- Verfeinerung struktureller Details mit Hilfe der Rietveld-Verfeinerung
- Quantitative Phasenanalyse mit der Rietveld-Methode
- Sequentielle und parametrisierte Rietveld-Verfeinerungen in Abhängigkeit externer Variablen
- Kritische Betrachtung der Aussagekraft von Kristallstrukturen aus Röntgen-Pulverdaten
- Erstellung von Rietveld-Plots für Publikationen.

Kursgebühr: 50 Euro für Studenten/Doktoranden/Post-Docs (inklusive Abendbuffet)

Referenten: Robert E. Dinnebier (MPI, Stuttgart) und Mitarbeiter

Sprache: Deutsch und Englisch

Übungen: Für die Übungen ist ein Laptop (Windows XP oder 7) mit Administratorrechten erforderlich. Verwendet wird das Programm TOPAS 4.2.

Teilnehmerzahl: max. 15

Weitere Informationen: *http://www.fkf.mpg.de/xray*

21st Annual Conference of the German Crystallographic Society

19–22 March 2013

Freiberg (Saxony)

From Symmetry to Function

Topics

- General Crystallography: Modeling and Analysis bridging the Scales
- Crystalchemistry and Crystalphysics: Pressure, Temperature and Fields at work
- Biocrystallography I: Synthesis, Structure and Function
- Biocrystallography II: Biomimetic Materials, Drug Design, Processes and Functions
- Aperiodic and Modulated Structures: Potential in Higher Dimensions
- Along the Value-added Chain: From Minerals and Crystals via Natural Sciences to Functional Materials
- Energy and Data Storage through the Eyes of Crystallographers
- Crystallography: History, Art, Cultural Heritage, Teaching and Public Communication

Registration: www.dgk-conference.de

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist mir eine große Ehre und eine Freude, Sie im Namen des Organisationskomitees zur 21. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) zum Frühjahrsbeginn 2013 nach Freiberg einzuladen.

Unser Veranstaltungsort liegt im Herzen des Freistaates Sachsen. Die Stadt wurde 1162 gegründet und ist historisches Zentrum des Bergbaus in der Erzgebirgsregion. Mitgeprägt wurde ihre Tradition auch durch die älteste Montanuniversität, die Bergakademie Freiberg, welche 1765 gegründet wurde. Eine der wichtigsten architektonischen Sehenswürdigkeiten ist der Dom St. Marien, welcher 1501 errichtet wurde. Zu seinen Schätzen zählen die Goldene Pforte aus dem Jahr 1225 sowie zwei von Gottfried Silbermann erbaute Orgeln. Freiberg beherbergte seinerzeit die Silbermann-Werkstatt. Im historischen Ambiente des Schlosses Freudenstein und des Krüger-Hauses präsentiert die Bergakademie in der Dauerausstellung „terra mineralia“ mehr als 3500 Minerale. Mit ihren Schätzen aus allen Erdteilen bietet die Ausstellung den Besuchern eine mineralogische Weltreise. Zur Tradition des Bergbaus erfährt man mehr im städtischen Museum oder noch besser, bei einer Einfahrt in das Lehr- und Besucherbergwerk „Reiche Zeche“. In Freiberg hat man sich sehr früh der Erforschung von Halbleitermaterialen zugewandt. Heute ist Freiberg zusätzlich ein führender Standort der Produktion von Halbleitermaterialien und ihrer Anwendung. Ein Ausflug, ausgehend vom historischen Zentrum Freibergs in die modernen Gewerbegebiete, ermöglicht einen Eindruck, wie Tradition und Moderne sich miteinander verbinden und so das heutige Gesicht Freibergs prägen.

Der inhaltliche Rahmen soll die gesamte Innovationskette ausgehend von der Grundlagenforschung über Anwendungen der Kristallographie bis hin zur technischen Umsetzung in der Praxis umspannen. Dementsprechend haben wir Plenarvortragende eingeladen, welche die relevanten Arbeitsgebiete der modernen Kristallographie vertreten. Zusätzlich sollen Vertreter einschlägiger regionaler Industrie, welche erfolgreich am Weltmarkt agieren, zu Wort kommen.

Besonders stolz sind wir, dass Prof. Dan Shechtman, Nobelpreisträger des Jahres 2011, unserer Einladung gefolgt ist und im Rahmen der Konferenz einen öffentlichen Vortrag halten wird. Dan Shechtman erhielt den Nobelpreis für Chemie im Jahr 2011 für seine Entdeckung der Quasikristalle. Im Jahre 1982 konnte er als erster die Existenz von aperiodischen kristallinen Strukturen in Al-Mn-Legierungen nachweisen und veröffentlichte diese Ergebnisse 1984. Dan Shechtman kehrte 1984 als Associate Professor an das Technion nach Israel zurück. Er wurde dort 1986 zum Full Professor berufen und ist seit 1998 Inhaber der Philip-Tobias-Professur für Materialwissenschaften am Technion.

Wir haben es uns zum Ziel gesetzt, Ihnen allen und insbesondere den wissenschaftlichen Zweigen unserer Gesellschaft eine erreichbare und inspirierende wissenschaftliche Plattform zu schaffen. Ganz besonders möchten wir Nachwuchs-Kristallographen ermuntern sich einzubringen und bei der Weitergestaltung der DGK mitzuwirken. Dafür wird ein Treffen junger Kristallographen Teil des Programms sein. Wir freuen uns auf Ihre Teilnahme und ihre Beiträge aus allen Bereichen der Kristallographie.

Mit freundlichen Grüßen

Prof. Dirk C. Meyer
Tagungspräsident

2nd International School on Aperiodic Crystals

7 - 12 April 2013, Bayreuth, Germany

Topics

- Aperiodic order of matter
- Superspace theory of modulated crystals
- Icosahedral and decagonal quasicrystals
- Symmetry and superspace groups
- Diffraction
- Structure solution and refinement in superspace
- Structural analysis and t-plots
- Crystal chemistry
- Electron microscopy
- Phasons
- Phase transitions
- Theories of stability of aperiodic order

Lecturers

- Gervais Chapuis, Lausanne
- Marc de Boissieu, Grenoble
- Michal Dusek, Prague
- Joke Hadermann, Antwerp
- Ron Lifshitz, Tel Aviv
- Olivier Pérez, Caen
- Vaclav Petricek, Prague
- Andreas Schönleber, Bayreuth
- Hiroyuki Takakura, Sapporo
- Sander van Smaalen, Bayreuth

Practical course in two parallel sessions

- Structural analysis of modulated crystals with JANA2006
- Structures of quasicrystals

Contact

Prof. dr. Sander van Smaalen
Laboratory of Crystallography
Universitätsstraße 30
95447 Bayreuth
Germany

Tel.: +49 (0)921 55 38 86
Fax: +49 (0)921 55 37 70

Email: smash@uni-bayreuth.de

Website: http://old.crystal.uni-bayreuth.de/aperiodic_crys_school_2013

Organisers

Marc de Boissieu, Andreas Schönleber, Sander van Smaalen

Supported by

European C-MAC

IUCr

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

cnrs advancing the frontiers

MAX-VON-LAUE-PREIS 2013

Sehr geehrte 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. Vorschlagsrecht hat 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, Habilitations-Schriften o. ä.). Bitte schicken Sie die Unterlagen per Post oder per E-Mail mit dem Betreff „Laue-Preis“ entweder an:

Prof. Dr. Thomas Doert
Technische Universität Dresden
Fachrichtung Chemie und Lebensmittelchemie
Helmholtzstraße 10
01062 Dresden
E-Mail: *thomas.doert@chemie.tu-dresden.de*

oder an:

Prof. Dr. Wolfgang Schmahl
LMU München
Sektion Kristallographie
Department für Geo- und Umweltwissenschaften
Theresienstraße 41
80333 München
E-Mail: *Wolfgang.Schmahl@lrz.uni-muenchen.de*

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK.

Deadline: 10. Februar 2013

Vielen Dank!

Thomas Doert, Dresden

TAGUNGEN UND TERMINE

Februar 2013

04.02. – 06.02.2013 **ESRF Users' Meeting 2013** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: usermeet@esrf.fr
www.esrf.eu/events/conferences
Deadline: 22.01.2013

11.02. – 12.02.2013 **Taking X-ray phase contrast imaging into mainstream applications** in London (Großbritannien)

Kontakt: events@royalsociety.org
royalsociety.org/events/2013/x-ray-phase-contrast

13.02. – 16.02.2013 **Symposium: „Molecular machines in RNA processing, translation and transport"** in Göttingen

Kontakt: Kathrin Fricke (sfb860@gwdg.de)
msb.bio.uni-goettingen.de/SFB860/symposium2013

17.02. – 20.02.2013 **Banff Meeting on Structural Dynamics** in Banff (Kanada)

Kontakt: *www.sun.ac.za/banff*

24.02. – 27.03.2013 **HERCULES 2013: Neutrons & Synchrotron Radiation for Science** in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *hercules-school.eu*

28.02. – 08.03.2013 **33rd Berlin School on Neutron Scattering** in Berlin

Kontakt: nschool@helmholtz-berlin.de
www.helmholtz-berlin.de/events/neutronschool

März 2013

04.03 – 07.03.2013 **Grundlagen und Anwendung der Rietveld Verfeinerung** in Stuttgart

Kontakt: *www.fkf.mpg.de/xray*

05.03. – 14.03.2013 **ISIS Practical Neutron Training Course** in Abingdon (Großbritannien)

Kontakt: Ross Stewart (ross.stewart@stfc.ac.uk)
www.isis.stfc.ac.uk/learning/neutron-training-course

09.03. – 15.03.2013 **Synchrotron Charge Density School** in Chicago (USA)

Kontakt: Yu-Sheng Chen (yschen@cars.uchicago.edu)
cars.uchicago.edu/chemmat/CDschool2013

10.03. – 15.03.2013 **DPG Frühjahrstagung (Sektion Kondensierte Materie)** in Regensburg

Kontakt: Dieter Weiss (dieter.weiss@physik.uni-regensburg.de)
regensburg13.dpg-tagungen.de

11.03. – 16.03.2013 **Workshop: „IDPbyNMR ITC on SAXS and Computational Techniques“** in Hamburg

Kontakt: Rosemary Wilson (r.wilson@embl-hamburg.de)
www.embl-hamburg.de/training/events/2013/SAXS13-01

18.03. – 22.03.2013 **ADD2013: School and Conference on Analysis of Diffraction Data in Real Space** in Grenoble (Frankreich)

School: 18.03. – 20.03.2013
Tagung: 20.03. – 22.03.2013

Kontakt: *http://www.ill.eu/ADD2013*
Deadline: 18.02.2013

18.03. – 22.03.2013 **APS March Meeting 2013** in Baltimore (USA)

Kontakt: *www.aps.org/meetings/march*
Deadline: 15.02.2013

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

Kontakt: Prof. Dirk C. Meyer (dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de)
www.dgk-conference.de

20.03. – 22.03.2013 **12th Research Course on X-ray Science: „Theoretical Foundations of Research with X-ray Free Electron Lasers and Synchrotron Radiation“** in Hamburg

Kontakt: Matthias Kreuzeder (research-course-org@desy.de)
indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=6981
Deadline: 11.03.2013

April 2013

01.04. – 05.04.2013 **MRS Spring Meeting** in San Francisco (USA)

Kontakt: Mark L. Brongersma (brongersma@stanford.edu)
mrs.org/spring2013

01.04. – 07.04.2013 **International Workshop 1: „Fundamentals of Crystallography“**
02.07. – 06.07.2013 **International Workshop 2: „Powder & Electron Crystallography“** in Patras (Griechenland)

Kontakt: Dr. Partha Pratim (pratha@upatras.gr)
www.hecra.gr/announcement.pdf
Deadline: Workshop 1: 30.01.2013
Workshop 2: 15.05.2013

04.04. – 06.04.2013 **Frontiers in Structural Biology of Membrane Proteins** in Birmingham (USA)

Kontakt: LaDonna Bangeman (ladonnab@uab.edu)
www.uab.edu/membraneproteins

06.04. – 14.04.2013 **14th BCA/CCG Intensive Teaching School in X-Ray Structure Analysis** in Durham (Großbritannien)

Kontakt: *www.dur.ac.uk/durham.x-ray-school*
Deadline: 15.01.2013

07.04. – 12.04.2013 **2nd International School on Aperiodic Crystals** in Bayreuth

Kontakt: D. Kelk-Huth (sekretariat.kristall@uni-bayreuth.de)
old.crystal.uni-bayreuth.de/aperiodic_crys_school_2013

09.04. – 17.04.2013 **Macromolecular Crystallography School 2013: „From Data Processing to Structure Refinement and Beyond“** in Montevideo (Uruguay)

Kontakt: *www.pasteur.edu.uy/mx2013*
Deadline: 10.02.2013

15.04. – 19.04.2013 **EMBO Practical Course: Computational Structural Biology - from Data to Structure to Function** in Hamburg

Kontakt: Rosemary Wilson (r.wilson@embl-hamburg.de)
www.embl-hamburg.de/training/events/2013/CSB13-01
Deadline: 15.02.2013

20.04. – 21.04.2013 **11th TOPAS Users' Meeting** in Gaithersburg (USA)

Kontakt: *www.bruker.com/events/users-meetings/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/11th-topas-users-meeting.html*

21.04. – 26.04.2013 **Rapid Data Collection and Structure Solving at the NSLS: A Practical Course in Macromolecular X-Ray Diffraction Measurement** in Brookhaven National Laboratory (USA)

Kontakt: *www.bnl.gov/RapiData*
Deadline: 04.02.2013

22.04. – 25.04.2013 **APD-IV: Accuracy in Powder Diffraction Meeting** in Gaithersburg (USA)

Kontakt: James Cline (james.cline@nist.gov)
www.nist.gov/mml/apdiv_conference_2013.cfm

28.04. – 30.04.2013 **Intermolecular Interactions in Crystals: Via Experiment and Theory to Industrial Application** in Pula (Italien)

Kontakt: Detlef Hofmann (conference-iic@crs4.it)
www.crs4.it/iic

Mai 2013

02.05. – 03.05.2013 **16th Annual CLS Users' Meeting** in Saskatoon (Kanada)

Kontakt: Kirk Michaelian (kirk.michaelian@nrcan-rncan.gc.ca)
www.lightsource.ca/uac/meeting2013

06.05. – 09.05.2013 **APS Users' Meeting** in Argonne (USA)

Kontakt: *www.aps.anl.gov/Users/Meeting*

21.05. – 24.05.2013 **Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung** in Bochum

Kontakt: Dr. Michael Fechtelkord
(Michael.Fechtelkord@ruhr-uni-bochum.de)
www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/workshops/dmgshortcourse

26.05. – 29.05.2013 **ISDSB2013: 4th International Symposium on Diffraction Structural Biology** in Nagoya (Japan)

Kontakt: *www.sbsp.jp/ISDSB2013/homepage*
Deadline: 28.02.2013

27.05. – 31.05.2013 **E-MRS 2013 Spring Meeting** in Straßburg (Frankreich)

Kontakt: *www.emrs-strasbourg.com*

30.05. – 08.06.2013 **Crystallographic Course: The Future of Dynamic Structural Science** in Erice (Italien)

Kontakt: Annalisa Guerri (annalisa.guerri@unifi.it)
www.crystalerice.org/Erice2013/2013.htm

Juni 2013

03.06. – 04.06.2013 **International Freiberg Conference on Electrochemical Storage Materials** in Freiberg

Kontakt: *www.estorm.de*

ICDD X-ray Diffraction Clinics in Newtown Square (USA)

03.06. – 07.06.2013 Session 1: Fundamentals of X-ray Powder Diffraction
10.06. – 14.06.2013 Session 2: Advanced Methods in X-ray Powder Diffraction

Kontakt: Cyrus Crowder (crowder@icdd.com)
www.icdd.com/education/xrd.htm

09.06. – 22.06.2013 **The Zürich School of Crystallography 2013** in Zürich (Schweiz)

Kontakt: *www.oci.uzh.ch/group.pages/linden/zsc/Location.html*
Deadline: 15.01.2013

09.06. – 14.06.2013 **Gordon Research Conference: „Polymers“**
in South Hadley (USA)

Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=polymers*
Deadline: 12.05.2013

13.06. – 15.06.2013 **4. DGK-AK1-Workshop „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“** in Berlin-Adlershof

Kontakt: *http://www.helmholtz-berlin.de/events/bessy-mx-workshop*

16.06. – 20.06.2013 **Workshop: „Dynamic Photocrystallography for Chemistry and Materials Science“ Buffalo (USA)**

Kontakt: *www.amercrystalassn.org/photocrystallographyworkshop*
Deadline: 01.04.2013

16.06. – 21.06.2013 **Gordon Research Conference: „Liquid Crystals“**
in Biddeford (USA)

Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=liqucryst*
Deadline: 19.05.2013

Juli 2013

01.07. – 05.07.2013 **1st International Conference on Tomography of Materials and Structures** in Ghent (Belgien)

Kontakt: Prof. Dr. Veerle Cnudde (Veerle.cnudde@ugent.be)
http://www.ictms.ugent.be

06.07. – 12.07.2013 **Gordon Research Conference: „Thin Film & Crystal Growth Mechanisms“** in Biddeford (USA)

Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=grs_thin*
Deadline: 08.06.2013

08.07. – 11.07.2013 **11th International Conference on Materials Chemistry**
in Warwick (Großbritannien)

Kontakt: *www.rsc.org/ConferencesAndEvents/RSCConferences/MC11*
Deadline: Poster: 10.05.2013
Registration: 07.06.2013

08.07. – 12.07.2013 **International Conference on Neutron Scattering**
in Edinburgh (Großbritannien)

Kontakt: *www.icns2013.org*
Deadline: 15.02.2013

13.07. – 17.07.2013 **9th European Biophysics Congress**
in Lissabon (Portugal)

Kontakt: *www.ebsa2013.org*

15.07. – 19.07.2013 **REXS 2013: Workshop on Resonant Elastic X-ray Scattering in Condensed Matter** in Oxford (Großbritannien)

Kontakt: *www.rexs2013.org*

20.07. – 24.07.2013 **American Crystallographic Association Meeting** in Honolulu (USA)

Kontakt: Allen Oliver (aoliver2@nd.edu)
http://www.amercrystalassn.org/2012-hawaiinew-homepage
Deadline: 31.03.2013

29.07. – 01.08.2013 **International Conference on Structural Genomics 2013: „Structural Life Science“** in Sapporo (Japan)

Kontakt: *www.c-linkage.co.jp/ICSG2013*

August 2013

Gordon Research Seminar und Gordon Research Conference: „Clusters, Nanocrystals and Nanostructures“ in South Hadley (USA)

03.08. – 04.08.2013 Seminar:
Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=grs_clust*
Deadline: 06.07.2013

04.08. – 09.08.2013 Konferenz:
Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=clusters*
Deadline: 07.07.2013

Gordon Research Seminar und Gordon Research Conference: „X-Ray Science“ in Easton (USA)

03.08. – 04.08.2013 Seminar:
Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=grs_xray*
Deadline: 06.07.2013

04.08. – 09.08.2013 Konferenz:
Kontakt: *www.grc.org/programs.aspx?year=2013&program=xray*
Deadline: 07.07.2013

05.08. – 09.08.2013 **DXC2013: 62nd Annual Denver X-ray Conference** in Westminster (USA)

Kontakt: W. Tim Elam, (wtelam@apl.washington.edu)
www.dxcicdd.com
Deadline: 15.02.2013

11.08. – 16.08.2013 **22nd International Materials Research Congress** in Cancun (Mexiko)

Kontakt: *www.mrs.org/imrc2013*

25.08. – 29.08.2013 **ECM28: European Crystallographic Meeting** in Warwick (Großbritannien)

Kontakt: www.*ecm28.org*

September 2013

01.09. – 06.09.2013 **ICQ12: 12th International Conference on Quasicrystals** in Krakau (Polen)

Kontakt: *www.icq12.fis.agh.edu.pl*

08.09. – 11.09.2013 **11th International Conference on Biology and Synchrotron Radiation** in Hamburg

Kontakt: Rosemary Wilson (r.wilson@embl-hamburg.de)
www.embl-hamburg.de/training/events/2013/BSR13-01
Deadline: Abstract: 01.06.2013
Registration: 01.08.2013

25.09. – 27.09.2013 **Workshop: „Verzwillingung und Absolute Struktur“** in Mülheim an der Ruhr

Kontakt: *www.gtecs.rwth-aachen.de/acmu*

30.09. – 02.10.2013 (Grundlagen)
03.10. – 04.10.2013 (Fortgeschritten) **„Basic Rietveld Refinement & Indexing“ und „Advanced Rietveld Refinement & Indexing“** in Newtown Square (USA)

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

30.09. – 05.10.2013 **International School on Fundamental Crystallography: „Introduction to International Tables for Crystallography, Vol. A: Space-Group Symmetry and Vol. A1: Symmetry Relations Between Space Groups“** in Guletchitza (Bulgarien)

Kontakt: *www.bgcryst.com/school2013*
Deadline: 30.04.2013

Oktober 2013

14.10. – 17.10.2013 **Myofibrillar Z-disk Structure and Dynamics** in Hamburg

Kontakt: Rosemary Wilson (r.wilson@embl-hamburg.de)
www.embl-hamburg.de/training/events/2013/SSS13-01
Deadline: Abstract: 25.07.2013
Registration: 26.08.2013

14.10. – 29.10.2013 **X-ray Methods in Structural Biology** in Cold Spring Harbor (USA)

Kontakt: *meetings.cshl.edu/courses/2013/c-crys13.shtml*
Deadline: 15.06.2013

Dezember 2013

01.12. – 06.12.2013 **2013 MRS Fall Meeting** in Boston (USA)

Kontakt: *www.mrs.org/fall2013*
Deadline:

02.12. – 06.12.2013 **Thermec 2013: Neutron Scattering & X-Ray Studies for the Advancement of Materials** in Las Vegas (USA)

Kontakt: *www.thermec.org/template3s*
Deadline: Abstract: 20.04.2013
Registration: 02.08.2013

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.

An den Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
Herrn Prof. Dr. Wolfgang W. Schmahl, LMU München, Dept. f. Geo- und Umweltwissenschaften, Theresienstr. 41, 80333 München, Telefax +49 (0)89 2180 4334.

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.
Ich bin Student und/oder Doktorand [ ], Pensionär [ ], arbeitslos [ ].

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

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

Dienstanschrift: Geburtsdatum: .....

Universität/Firma: .....

Institut/Abteilung: .....

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

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

Privatanschrift: E-Mail: .....

Straße: ..... Telefon : .....

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

Die Post soll an die [ ] Dienstanschrift [ ] Privatanschrift geschickt werden.
(Wenn keine schwerwiegenden Gründe dagegensprechen, sollte der Versand an die Dienstadresse erfolgen, weil durch Sammelzustellung von Rundschreiben Portokosten gespart werden können.)

Jahresbeitrag:
Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung (*siehe Anhang*).
Bankverbindung der DGK: Sparda-Bank Hamburg, Konto-Nr. 608 599, BLZ 206 905 00

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

Der Antrag wird befürwortet von folgenden DGK-Mitgliedern

	Name	Ort	Unterschrift
1.	.....	.....	.....
2.	.....	.....	.....

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

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

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

Bankinstitut: .....

Konto-Nummer: |__|__|__|__|__|__|__|__|__|__| Bankleitzahl: |__|__|__|__|__|__|__|__|

Ort, Datum: ....., ... Unterschrift: ..... b.w.

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

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

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

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

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

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

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 14. März 2012 in München beschlossen.

Einzugsermächtigung

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

Kontoinhaber: Name: ..... Vorname: .....

Bankinstitut: .....

Konto-Nummer: |__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|__| Bankleitzahl: |__|__|__|__|__|__|__|__|

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