D
G
K

Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur: Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). Sie erscheinen zur Zeit jährlich im Sommer. Der Vorstand der DGK und die Redaktion der DGK-Mitteilungen weisen darauf hin, dass die Beiträge die Meinung des jeweiligen Autors wiedergeben.

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen: AXO Dresden GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Maker Software Ltd., Crystal Impact, Dectris Ltd., Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Jena Bioscience GmbH, Rigaku Corp., Röntgenlabor Dr. M. Ermrich, STOE & Cie GmbH.

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

Redaktionsbereiche:
Anzeigen und Werbung: Dr. Tilmann Leisegang, *tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de*
Veranstaltungshinweise: Melanie Nentwich, *melanie.nentwich@physik.tu-freiberg.de*
Herstellung: Dr. Hartmut Stöcker, *hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de*

Druck und Bindung:
UNIdruckerei.de - Inh. Dipl.-Kfm. (FH) Bert Buschmann
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351 3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

Postadresse: Deutsche Gesellschaft für Kristallographie
Carl-Pulfrich-Straße 1, 07745 Jena

Vorsitzender: Prof. Dr. Ralf Ficner
Georg-August-Universität Göttingen, Abteilung Molekulare Strukturbiologie
Justus-von-Liebig-Weg 11, 37077 Göttingen
Tel: 0551 39 14072, Fax: 0551 39 14082
E-Mail: *rficner@gwdg.de*

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

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

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

Vorsitzende des Nationalkomitees: Dr. Ute Kolb
Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Institut für Physikalische Chemie
Welderweg 11, 55099 Mainz
Tel.: 06131 3924154, Fax: 06131 3923768
E-Mail: *kolb@uni-mainz.de*

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

Vertreter der DPG: Prof. Dr. David Rafaja
TU Bergakademie Freiberg, Institut für Werkstoffwissenschaft
Gustav-Zeuner-Straße 5, 09596 Freiberg
Tel.: 03731 39 2299, Fax: 03731 39 3657
E-Mail: *rafaja@ww.tu-freiberg.de*

Liebe Mitglieder der DGK,

es ist mir eine besondere Freude Sie hier als neuer Vorsitzender der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie begrüßen zu dürfen. Im Namen des gesamten neu gewählten Vorstands möchte ich mich für Ihr Vertrauen bedanken.

Die 26. Jahrestagung der DGK in Essen liegt nun schon einige Monate zurück, aber ich möchte Prof. Matthias Epple und allen Mitgliedern des Programm-Komitees ganz herzlich für die hervorragende Organisation und die Durchführung der Jahrestagung danken. In den sieben Plenarvorträgen, 23 Mikrosymposien sowie den Posterpräsentationen waren alle Bereiche der Kristallographie gut vertreten und gaben Anlass für viele spannende Diskussionen.

Diese Ausgabe der DGK Mitteilungen enthält u. a. die lesenswerten Berichte über die Aktivitäten der DGK-Arbeitskreise sowie die interessanten Berichte der Reisestipendiaten von ihrer Teilnahme am IUCr-Kongress in Hyderabad im August 2017. Sehr erfreulich sind auch die Aktivitäten der „Jungen Kristallographen“ in der DGK, die u. a. das „3rd Meeting of the Young Crystallographers“ im September 2018 in Aachen veranstalten werden.

Während der Mitgliederversammlung in Essen wurden zwei Initiativen für internationale Veranstaltungen der DGK vorgestellt, die beide für die internationale Sichtbarkeit der Kristallographie in Deutschland sicher von großer Bedeutung sind. Die Mitgliederversammlung beschloss, dass die 28. Jahrestagung der DGK im Jahr 2020 gemeinsam mit der „Polish Crystallographic Association (PTKr)“ sowie dem „Committee of Crystallography (KK) of the Polish Academy of Science“ in Polen veranstaltet werden soll. Die zweite Initiative zielt auf eine Bewerbung der DGK um die Ausrichtung des IUCr-Kongresses im Jahr 2029, was auf den ersten Blick noch in ferner Zukunft liegt, aber tatsächlich heute schon vorbereitet werden muss. Aus diesem Anlass soll die DGK-Homepage künftig auch in englischer Sprache verfügbar sein.

Ende August wird das diesjährige *European Crystallography Meeting* in Oviedo, Spanien, stattfinden. Die DGK unterstützt die Teilnahme mehrerer junger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler am ECM durch Reisestipendien.

Die Vorbereitungen für die 27. Jahrestagung der DGK vom 25. bis 28. März 2019 in Leipzig sind bereits im Gange und ich freue mich heute schon darauf, Sie in Leipzig begrüßen zu dürfen.

Herzliche Grüße,

Ihr

Ralf Ficner (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 06.03.2018 in Essen 9

Anlage zu Punkt 6.1: Bericht der Vorsitzenden 15

Anlage zu Punkt 6.2: Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees 18

Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters 20

Anlage zu Punkt 6.5: Bericht der Kassenprüfer 22

Anlage zu Punkt 6.6: Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand der DGK 25

Rückblick zur 26. Jahrestagung der DGK in Essen 28

Berichte der Stipendiaten zur IUCr24 in Hyderabad 31

Polish–German Crystallographic Meeting 2020 36

IUCr-2029 in Berlin? 39

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht zum 18. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ 43

Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2017 47

Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“ 49

Personalia:

Jubilare 2018 55

Verstorbene Mitglieder 57

Laudatio anlässlich der Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2018 an Elena Bykova 59

Laudatio anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2018 an Hermann Gies 61

Laudatio anlässlich der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2018 an Walter Steurer 63

Otto Jarchow 67

Ankündigungen:

DGK-Tagung 2019 in Leipzig 73

ECM32 in Wien 74

Get the Best of All: Structure Research by Merging the Peculiarities of Synchrotron, Neutron, Electron and Ion Radiation 75

Max von Laue-Preis 2019 77

Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2019 79

Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2019 81

Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 83

Tagungen und Termine 85

Homepages von DGK, DMG und DGKK 95

Aufnahmeformular 97

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 99

Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten 100

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 06.03.2018 IN ESSEN

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der Jahrestagung 2018 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am Dienstag, den 6. März, 12:00 – 13:30 Uhr, im Audimax der Universität Duisburg-Essen statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Die Vorsitzende, Susan Schorr, eröffnet die Sitzung und begrüßt die anwesenden Mitglieder der DGK.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Laut Teilnehmerliste sind 72 Mitglieder anwesend; die Zählung der Anwesenden zu Beginn der Versammlung ergab 88. Nach § 9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mind. 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 1105 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 56 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird unverändert angenommen.

Bei den Wahlen zum Vorstand waren aufgrund des in der Satzung vorgegebenen Wahlverfahrens – aufeinanderfolgende, geheime Abstimmungen für jedes Amt – längere Wartezeiten während des Auszählens der abgegeben Stimmen unvermeidbar. Deswegen wurden die Tagesordnungspunkte 10–15 mit den Wahlgängen interkaliert; die zeitliche Abfolge war 9.1(1), 10, 9.1(2), 11, 9.1(3), 12, 9.1(4), 13, 9.1(5), 14, 15.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 29.03.2017 in Karlsruhe

Das Protokoll wird – wie in Heft 47 der DGK-Mitteilungen ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

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

6 Berichte

6.1 Bericht der Vorsitzenden

Susan Schorr berichtet über Entwicklungen seit der letzten Mitgliederversammlung. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigefügt.

6.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees

Ute Kolb berichtet über Entwicklungen im Rahmen der ECA und der IUCr. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigefügt.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet über die Entwicklung der Mitgliederzahlen. Die DGK hatte am 03.03.2018 insgesamt 1116 Mitglieder, davon 837 Vollmitglieder, 129 Studenten und Doktoranden, 14 Arbeitslose, 95 Pensionäre, 24 Dauermitglieder, 6 Ehrenmitglieder, 8 Institute und 3 weitere unpersönliche Mitglieder. Die Zahlen sind praktisch unverändert gegenüber dem Vorjahr.

Hinter diesen stabilen Gesamtzahlen verbergen sich jährlich etwa 25 Eintritte; ebenso viele Mitglieder verlassen die DGK. Bei den Austritten ist dabei neben dem Erreichen des Pensionsalters vor allem der Bereich der 30- bis 40-Jährigen häufig vertreten. In diesem Alter orientiert man sich nach Abschluss von Promotion oder PostDoc-Phase häufig beruflich neu.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann legt die Einnahmen-Überschuss-Rechnung für 2017 sowie den Haushaltsplan für 2018 vor. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigefügt.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfer Petra Becker-Bohatý und Ullrich Pietsch legen ihren Bericht zur Prüfung der Kassenunterlagen der DGK für das Geschäftsjahr 2017 vor. Die Prüfung ergab keine Unstimmigkeiten und die Verwendung der Mittel erfolgte satzungsgemäß. Der ausführliche Kassenprüfungsbericht folgt als Anlage.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Jürgen Schreuer und Ullrich Bismayer berichten aus der DMG. Der ausführliche Bericht ist angehängt.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

Dieses Amt ist derzeit in Personalunion mit dem Vertreter der DGK im Vorstandsrat der DPG, David Rafaja, besetzt.

6.8 Bericht des Vertreters der DGK im Vorstandsrat der DPG

David Rafaja berichtet schriftlich: Wie schon in den letzten Mitteilungen der DGK angekündigt, wurde am 26. März 2017 bei der DPG ein neuer Fachverband „Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur (KFM)“ durch die Fusion der Fachgruppe Kristallographie, des Fachverbandes Dielektrische Festkörper und des Fachverbandes Mikrosonden gegründet. Zum 24.01.2018 hatte der gemeinsame Fachverband KFM 714 Mitglieder. Der Leiter des neuen Fachverbandes ist Prof. Dr. Theo Andreas Scherer

aus dem Karlsruher Institut für Technologie. Das Themenspektrum des neuen Fachverbandes ist auf der Webseite *https://www.dpg-physik.de/dpg/gliederung/fv/kfm* vorgestellt.

Die diesjährige DPG-Tagung, die auch vom Fachverband KFM mitgetragen wurde, wurde gemeinsam mit der Tagung der *European Physical Society* in Berlin organisiert, was sicher einen positiven Effekt auf die Anzahl der Teilnehmer (zwischen 7000 und 8000) hatte. Der Fachverband KFM organisierte 28 Sessions, darunter 6 gemeinsame Sessions mit anderen Fachverbänden (Magnetismus, Tiefe Temperaturen, Chemische Physik und Polymerphysik, Dünne Schichten). In den Sessions, die alleine vom Fachverband KFM veranstaltet wurden, wurden 178 Vorträge und 35 Poster präsentiert. Ungefähr 50 weitere Vorträge wurden in den gemeinsamen Sessions angeboten. Von den insgesamt 230 Vorträgen gehörten 20 zu *Invited Topical Talks*.

Die nächste Tagung der Sektion Kondensierte Materie der DPG findet von 31.03. bis 05.04.2019 in Regensburg statt.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Hartmut Stöcker berichtet schriftlich: Die Redaktion der Mitteilungen, Hartmut Stöcker und Dirk C. Meyer, dankt allen Autoren für ihre Beiträge und den Werbekunden für die Mitfinanzierung des Heftes. Für das nächste Heft 48 laden wir wieder alle Mitglieder ein, das Heft aktiv zu gestalten. Redaktionsschluss wird wie zuvor der 31. Mai sein, damit das Heft im August erscheinen kann.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet schriftlich: Aufgrund von Sicherheitslücken mussten leider einige interaktive Funktionen der DGK-Webseite außer Betrieb gesetzt werden (Forum, DGK 2.0 Login). Im Content-Management-System wurden Maßnahmen ergriffen, um die Funktionalität der Webseite zu gewährleisten und die Sicherheit zu erhöhen.

Eine Aktualisierung von bestehenden Inhalten ist einfach möglich und mittlerweile haben 35 DGK-Mitglieder einen Zugang zu den DGK-Webseiten und damit eine potentielle Möglichkeit Webseiteninhalte zu aktualisieren; bitte machen Sie von dieser Möglichkeit Gebrauch. Um Inhalte zu Ändern oder Hinzuzufügen verwenden Sie bitte folgenden Zugang: *http://dgk-home.de/wp-admin*.

Sehr aktiv auf den Webseiten der DGK ist der Arbeitskreis AK Junge Kristallographen. Das Content-Management-System der DGK wird in den nächsten Monaten um eine englische Version ergänzt.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, entlastet.

8 Annahme der Beitragsordnung

Die Mitgliederversammlung beschließt einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, die am Ende dieses Heftes abgedruckte Beitragsordnung. Diese ist gegenüber der bisherigen Beitragsordnung unverändert.

9 Wahlen

9.1 Wahl des Vorstands

(1) Der amtierende Vorstand schlägt Ralf Ficner als Vorsitzenden vor. Weitere Vorschläge erfolgen nicht. Ralf Ficner wird in geheimer Wahl mit 77 Stimmen, ohne Gegenstimmen, 1 Enthaltung gewählt.

(2) Der amtierende Vorstand schlägt Susan Schorr als stellvertretende Vorsitzende vor. Weitere Vorschläge erfolgen nicht. Susan Schorr wird in geheimer Wahl mit 78 Stimmen, ohne Gegenstimmen, ohne Enthaltungen gewählt.

(3) Der amtierende Vorstand schlägt Daniel Többens als Schriftführer vor. Weitere Vorschläge erfolgen nicht. Daniel Többens wird in geheimer Wahl mit 78 Stimmen, ohne Gegenstimmen, ohne Enthaltungen gewählt.

(4) Der amtierende Vorstand schlägt Christian Lehmann als Schatzmeister vor. Weitere Vorschläge erfolgen nicht. Christian Lehmann wird in geheimer Wahl mit 78 Stimmen, ohne Gegenstimmen, ohne Enthaltungen gewählt.

Die Gewählten nahmen die Wahl an.

9.2 Wahl dreier Mitglieder in das Nationalkomitee

Drei der sechs Mitglieder des Nationalkomitees scheiden aus diesem aus. Bis 2021 im Komitee verbleiben Ute Kolb, Wolfgang Bensch und Claudia Weidenthaler. Für die drei neu zu wählenden Mitglieder des Nationalkomitees, die diesem bis 2024 angehören werden, liegen fünf Kandidaturen vor. Die Wahl erfolgte in simultaner, geheimer Wahl. Jedes anwesende Mitglied der DGK konnte bis zu drei der Kandidaten jeweils eine Stimme geben. Die Kandidaten und die auf sie entfallenden Stimmen waren:

Andrzej Grzechnik	59 Stimmen
Thorsten Gesing	50 Stimmen
Yves Muller	45 Stimmen
Stefan Stöber	41 Stimmen
Richard Weihrich	25 Stimmen

Damit wurden Andrzej Grzechnik, Thorsten Gesing und Yves Muller in das Nationalkomitee gewählt.

9.3 Wahl zum Komitee für den Max-von-Laue-Preis

Die vier Mitglieder des Komitees für den Max-von-Laue-Preis werden auf drei Jahre, also bis 2021, gewählt. Von den bisherigen Mitgliedern des Komitees kann nur Alexandra Friedrich zur Wiederwahl antreten, da die Mitgliedschaft in diesem Preiskomitee auf zwei aufeinanderfolgende Perioden beschränkt ist. Es standen vier Kandidaten zur Wahl:

Manuel Hinterstein
Alexandra Friedrich
Hermann Schindelin
Björn Winkler

Alle vier wurden in offener Abstimmung einstimmig, ohne Gegenstimmen, gewählt.

9.4 Wahl zum Komitee für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie

Die drei Mitglieder des Komitees für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie werden auf drei Jahre, also bis 2021, gewählt. Wiederwahl ist unbeschränkt zulässig. Es standen vier Kandidaten zur Wahl. Die Wahl erfolgte in simultaner, geheimer Wahl. Jedes anwesende Mitglied der DGK konnte bis zu drei der Kandidaten jeweils eine Stimme geben. Die Kandidaten und die auf sie entfallenden Stimmen waren:

Wulf Depmeier	58 Stimmen
Ullrich Englert	57 Stimmen
Ulrich Schwarz	57 Stimmen
Yves Muller	41 Stimmen

Damit wurden Wulf Depmeier, Ullrich Englert und Ulrich Schwarz in das Komitee für den Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie gewählt.

9.5 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Der Vorstand schlägt Ullrich Pietsch und Alexandra Friedrich als Kassenprüfer vor. Beide werden per Akklamation gewählt.

10 Jahrestagung 2019

Die nächste Jahrestagung der DGK wird in der Zeit 25.–28. März 2019 in Leipzig stattfinden. Organisatoren sind Norbert Sträter, Oliver Oeckler und Holger Kohlmann. Tagungsort wird das Hörsaalgebäude der Universität Leipzig sein. Der Gesellschaftsabend findet am 27.03. in der Moritz-Bastei statt. Weitere Informationen sind unter *www.dgk-conference.de* zu finden.

11 Abstimmung zur Gemeinsamen Jahrestagung mit Polen 2020

Von Seiten der polnischen Kristallographen – *Polish Crystallographic Association (PTKr)* sowie *Committee of Crystallography (KK) of the Polish Academy of Sciences* – wurde der Vorschlag gemacht, in naher Zukunft eine gemeinsame Tagung zu veranstalten. Der Vorstand der DGK strebt an, dieses in der Form umzusetzen, dass 2020 anstelle der DGK-Jahrestagung eine gemeinsame Tagung stattfindet. Diese sollte möglichst im März, in Polen (evtl. Poznań) stattfinden. Im Rahmen dieser Tagung würden dann die auch üblichen Veranstaltungen der DGK (Mitgliederversammlung, Ehrenabend) stattfinden.

Die Mitgliederversammlung stimmt diesem Vorschlag per Akklamation zu; Einwände wurden nicht erhoben.

12 Deutsche Bewerbung um die Ausrichtung des IUCr-Kongresses 2029

Auf der Vorstandssitzung vom 11.12.2017 wurde vom Vorstand der DGK einstimmig beschlossen:

1. Die DGK wird auf der IUCr 2020 in Prag eine Vorbewerbung für die IUCr 2029 abgeben.
2. Der Vorstand beauftragt Manfred Weiss, mit einem von ihm zusammenzustellenden Team diese Vorbewerbung vorzubereiten und dem Vorstand regelmäßig Bericht zu erstatten.
3. Die DGK stellt während der nächsten drei Jahre aus ihrem Haushalt Mittel zur Verfügung, um diese Vorbewerbung vorzubereiten.
4. Die DGK beginnt mit dem laufenden Jahr 2017 mit dem Aufbau einer finanziellen Rücklage für die eventuelle Durchführung der IUCr 2029.

Manfred Weiss präsentiert dieses Vorhaben und den zugehörigen Zeitplan. Der Antrag, eine Ausrichtung der IUCr 2029 in Berlin durch die DGK anzustreben, wird der Mitgliederversammlung 2019 zur Beschlussfassung vorgelegt werden.

13 Vorstellung des Wissenschaftskollegs der DGK

Auf der Vorstandssitzung vom 11.12.2017 hat der Vorstand das Wissenschaftskolleg der DGK neu berufen. Die Mitglieder des Kollegs sind:

Jürgen Schreuer	Kristallphysik	Institut für Geologie, Mineralogie & Geophysik, Universität Bochum
Ullrich Pietsch	Festköperphysik	Institut für Physik, Universität Siegen
Barbara Albert	Anorganische Festkörperchemie	Fachbereich Chemie, TU Darmstadt
Manfred Weiss	Makromolekulare Kristallographie	Helmholtz-Zentrum Berlin
Detlef Klimm	Kristallphysik	Leibniz-Institut für Kristallzüchtung, Berlin
Udo Heinemann	Biokristallographie	Max-Delbrück-Zentrum für Molekulare Medizin, Berlin

Das Wissenschaftskolleg ist am 5. März 2018 zum ersten Mal zusammengetreten.

Es ergibt sich eine Diskussion über eventuelle Unausgewogenheiten in der Zusammensetzung, bezüglich der Fächer oder auch der Repräsentation junger Kristallographen im Kolleg. Es wird festgestellt, dass das Kolleg nach Bedarf erweitert werden kann.

14 Sonstiges

Zu diesem Tagungsordnungspunkt gibt es keine Beiträge.

Daniel M. Többens

Daniel Többens
(Schriftführer)

ANLAGE ZU PUNKT 6.1:

BERICHT DER VORSITZENDEN

Antrag auf Übernahme des IUCr-Mitgliedsbeitrages für 2016

Als Vorsitzende der DGK und Mitglied des Nationalkomitees für Kristallographie habe ich bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Namen der DGK um erneute Übernahme des fälligen IUCr-Jahresbeitrags in Höhe von 10.000 CHF für 2017 gebeten. Der Antrag wurde auch in diesem Jahr positiv beschieden und der entsprechende Betrag (in CHF) an die IUCr überwiesen.

ECA-Mitgliedsbeitrag

Der DGK-Schatzmeister wurde um Überweisung des ECA-Mitgliedsbeitrages in Höhe von 1100 € an die ECA gebeten.

IUCr General Assembly

Als Vorsitzende der DGK und Mitglied des Nationalkomitees habe ich gemeinsam mit der Vorsitzenden des Nationalkomitees und zwei weiteren Mitgliedern des Vorstandes das deutsche Nationalkomitee für Kristallographie auf den drei Sitzungen der *General Assembly* der IUCr, die im Rahmen des *IUCr Congress* in Hyderabad (Indien) stattfanden, vertreten.

Koordination der Vergabe von Reisestipendien

Die DGK hat die Teilnahme junger Wissenschaftler an dem *IUCr Congress 2017* (Hyderabad) und der *European Crystallographic School* 2017 (Warschau) mit Reisestipendien unterstützt (neun bzw. drei Stipendien). Die entsprechend bei mir eingegangenen Bewerbungen habe ich gesichtet sowie in Absprache mit dem DGK-Vorstand die Zusagen versandt.

Mitgliederversammlung der Bundesvereinigung Materialwissenschaften und Werkstofftechnik BVMatWerk

Auf der Mitgliederversammlung der BVMatWerk am 12.06.2017 in Bonn sowie auf dem Treffen der Vorstände am 14.02.2018 in Bonn habe ich die DGK vertreten. Tagesordnungspunkte waren u. a. die Digitalisierung der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik sowie die Ankündigung der BMBF-Materialforschungskonferenz 2018. Letztere findet unter dem Titel „Materialinnovationen 2018 – vom Material zur Innovation“ vom 04. bis 06.06.2018 in München statt. Die DGK hätte hier die Gelegenheit, an dem BVMatWerk-Stand ein Poster zur materialwissenschaftlichen Kristallographie aufzustellen (mit DGK-Logo) sowie Flyer auszulegen.

Initiierung gemeinsamer Veranstaltungen DGKK–DGK

Nach einem Treffen mit dem DGKK-Vorsitzenden und dem Austausch von Ideen bezüglich gemeinsamer Aktivitäten wurde vereinbart, dass die DGKK ein Symposium auf der DGK Jahrestagung 2018 organisiert. Mit Unterstützung des Arbeitskreises materialwissenschaftliche Kristallographie, für die ich mich sehr bedanke, wird die DGKK auf der Jahrestagung der DGK 2018 in Essen ein Symposium organisieren. Weitere gemeinsame Aktivitäten, wie die Organisation eines DGK-Symposiums auf der nächsten DGKK-Jahrestagung, sind geplant.

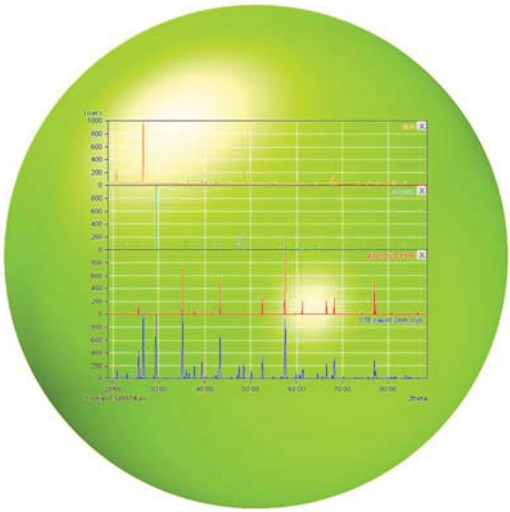
Planung einer gemeinsamen Konferenz mit dem *Polish Crystallographic Meeting 2020*

Prof. Wolcyrz, Präsident des *Committee for Crystallography* PAS hat eine gemeinsame Tagung angeregt. Diese Idee habe ich in die DGK-Vorstandssitzung im Dezember 2017 eingebracht; diese wurde dort positiv aufgenommen. Weitere Planungschritte sind angelaufen, diese beinhalten z. B. eine Einladung für Daniel Többens und mich zum 60. *Polish Crystallographic Meeting* im Juni diesen Jahres.

Susan Schorr, Berlin

MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction



Neue Funktionen und Videos verfügbar!

In den letzten zwölf Monaten haben sich bei Match! diverse Neuerungen ergeben:

Seit Version 3.5 ist es möglich, eine **Indizierung der Elementarzelle** mittels Treor/Dicvol durchzuführen. Außerdem wird jetzt die Lösung von Kristallstrukturen aus dem Pulverdiffraktogramm mit Endeavour unterstützt.

In Match! Version 3.6 wurde die **automatische Peaksuche** sowie die Bestimmung und **Festlegung des Untergrunds** deutlich verbessert.

Für Version 3.7, die noch in diesem Jahr erscheinen soll, planen wir u.a. die **quantitative Bestimmung des amorphen Anteils** der Probe.

Außerdem haben wir **neue Tutorial-Videos** bei YouTube veröffentlicht:

- Ein Video befasst sich mit der **Lösung von Kristallstrukturen** durch eine kombinierte Anwendung von Match!, Treor, Endeavour and Diamond.
- Ein weiteres Video demonstriert die **Bestimmung der Elementarzelle** (Indizierung) mit den bekannten Programmen Treor und Dicvol im Hintergrund.
- Schließlich erläutern wir in einem Video den Zweck und die grundlegende Verwendung von **Referenzdatenbanken** in Match!.

Kostenlose Testversion sowie weitere Infos:
https://www.crystalimpact.de/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.de
https://www.crystalimpact.de

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DER VORSITZENDEN DES NATIONALKOMITEES

Anstehende Wahlen zum NK:

Mitglieder des NK bis 2021:

Ute Kolb (Vorsitz)	– Elektronenmikroskopie, Kristallographie
Wolfgang Bensch	– Synchrotron, Neutronen
Claudia Weidenthaler	– Materialwissenschaftliche Kristallographie

Ausscheidende Mitglieder des NK:

Jürgen Schreuer	– Kristallphysik, Computational Chemistry
Ralf Ficner	– Biologische Strukturen
Birger Dittrich	– Molekülverbindungen, Computational Chemistry

Zur Wahl stehende Kandidaten:

Richard Weihrich (Augsburg)	– Theoretische Festkörperchemie
Yves Muller (Erlangen)	– Biotechnik
Andrzej Grzechnik (Aachen)	– Kristallographie, Funktionale Materialien
Stefan Stöber (Halle)	– Materialwissenschaftlich-mineralogische Kristallographie
Thorsten Gesing (Bremen)	– Chemische Kristallographie

Kommende Internationale Tagungen:

2018	ECM31	Oviedo, Spanien	22.–27. August
2019	ECM32	Wien, Österreich	18.–23. August
2020	IUCr	Prag, Tschechien	22.–30. August
2021	ECM33	Versailles, Frankreich	
2023	IUCr	Melbourne, Australien	

European Crystallography School (ECS):

2018	ECS5	Stellenbosch, Südafrika	08.–14. Juli

General Assembly IUCr Hyderabad:

Neuer Präsident der IUCr:	Prof. S. Lidin
Vize-Präsident:	Dr. H. A. Dabowska
Sekretär und Schatzmeister:	Prof. L. van Meervelt
Mitglieder:	Prof. W. Depmeier, Deutschland
	Prof. G. C. Diaz de Delgado, Venzuela
	Prof. S. Garcia-Granda, Spanien
	Prof. R. Kuzel, Tschechien
	Prof. J. L. Martin, Australien
	Prof. M. Takata, Japan

Im IUCr-Büro wurde Prof. Michael Dacombe pensioniert und durch Alex Ashcroft ersetzt.

IUCr Associates Programm:

Reduzierung auf *Open-Access*-Publikationskosten, Zugang zu einer bestimmten Menge an IUCr-Artikeln, Rabatt für Bücher (z. B. Wiley, Oxford University Press). Die Gelder (200 USD / 3 Jahre, 60 USD / 3 Jahre für Studenten) werden für Tagungsstipendien, Gastprofessuren und zur Unterstützung der Kristallographie, z. B. in Afrika, genutzt.

Genderbalance:

Da Frauen in der Rolle der Vorsitzenden in IUCr-Gremien und Kommissionen unterrepräsentiert sind, wurde beschlossen, die Genderbalance in die Zielsetzungsbeschreibung der IUCr zu integrieren.

Ute Kolb, Mainz

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2017 der DGK

Einnahmen 2017			
Mitgliedsbeiträge inkl. Spenden Liebau-Preisgeld	Bankeinzug 2017	22.508,00 €	24.488,00 €
	Barzahler 2017	1.100,00 €	
	Beiträge rückwirkend	880,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Spenden			100,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	1.686,01 €	1.970,01 €
	Rückzahlungen	284,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.700,00 €
Summe Einnahmen			**31.258,01 €**
Ausgaben 2017			
Mitteilungen			-7.238,25 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	-40,00 €	-215,00 €
	Rücklastschriften	-175,00 €	
Administration	Bankgebühren	-210,20 €	-1.265,05 €
	Stornokosten	-8,20 €	
	Medaillenprägung	-42,68 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-1.003,97 €	
	Reisekosten & Spesen	0,00 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-1.188,52 €
Arbeitskreise	Förderung	-4.885,94 €	-17.544,83 €
	Ausgaben	-2.008,89 €	
Reisestipendien	ECM Basel	-6.200,00 €	
Spenden Liebau-Preisgeld		-2.950,00 €	
Max-von-Laue Preisgeld		-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			**-27.451,65 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2017			
Einnahmen	0 neue Dauermitglieder	0,00 €	0,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2017		-168,00 €
Überschuss 2017			**-168,00 €**
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2017			**3.638,36 €**

Kontoführung 2017

Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	3.174,12 €	3.660,80 €	486,68 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.094,98 €	1.926,98 €	-168,00 €
Sonderkonto AK 21	918,16 €	737,84 €	-180,32 €
DKG-Cash 085	31.016,50 €	34.516,50 €	3.500,00 €
Guthaben der DGK	**37.203,76 €**	**40.842,12 €**	**3.638,36 €**

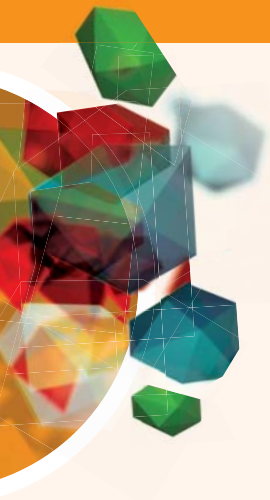
Haushaltsvoranschlag 2018 der DGK

Einnahmen 2018			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2018	20.000,00 €	21.000,00 €
	Barzahler 2018	1.000,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Entnahme Rücklage Dauermitglieder			150,00 €
Spenden	Preisgeld Liebau-Stiftung		2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	0,00 €	0,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.000,00 €
Summe Einnahmen			**27.150,00 €**
Ausgaben 2018			
Mitteilungen			-7.500,00 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	0,00 €	-400,00 €
	Rücklastschriften	-400,00 €	
Administration	Bankgebühren	-250,00 €	-1.150,00 €
	Geschäftsstelle	-500,00 €	
	Reisekosten & Spesen	-400,00 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-1.200,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-9.000,00 €	-17.000,00 €
Reisestipendien	ECM31 Oviedo, ECS5	-4.000,00 €	
Rücklage Reisestipendien		0,00 €	
Liebau-Preisgeld		-2.500,00 €	
Max-von-Laue-Preisgeld		-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			**-27.250,00 €**
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2018			**-100,00 €**

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

XP Screen
The Protein Crystal Glue

Jena Bioscience
Building Blocks of Life



The **XP Screen** is a protein crystallization screen with the addition of the Anderson-Evans polyoxotungstate $[TeW_6O_{24}]^{6-}$ (TEW) as universal additive. XP Screen consists of 96 of the most prominent crystallization conditions from JBScreen Basic that were optimized for and complemented with 1 mM TEW as "glue" for protein molecules.

TEW is a universal and flexible additive for protein crystallization. With its planar structure and a central tellurium atom, it is able to stabilize flexible regions in proteins and provides an anomalous signal for phasing.

Hence, the XP Screen promotes protein crystallization even for most challenging targets and improves diffraction quality of protein crystals[1].

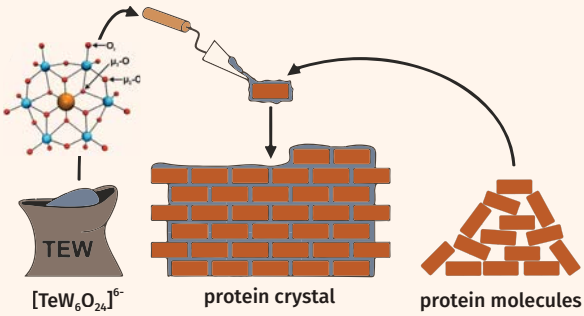


Figure adapted from [1], used courtesy of Prof. Annette Rompel, University of Vienna, Austria

Product	Cat.-No.	Amount
XP Screen	CS-350	96 solutions (1.7 ml each)
Anderson-Evans polyoxotungstate	X-TEW-1	1 g

TEW was shown to:

- both covalently bind and structurally adapt to fit into protein molecules (*cg*AUS1, PDB code: 4Z12, 4Z13)[2]
- act as a linker in various orientations and thereby create either smaller (*ab*PPO4, PDB code: 4OUA) or larger (lysozyme, PDB code: 4PHI) protein-protein distances[3,4]
- induce heterogeneous crystallization of two different protein forms in one single crystal (*ab*PPO4, PDB code: 4OUA)[4]

References:
[1] Bijelic *et al.* (2017) Ten Good Reasons for the Use of the Tellurium-Centered Anderson-Evans Polyoxotungstate in Protein Crystallography. *Acc. Chem. Res.* **50**:1441.
[2] Molitor *et al.* (2016) *In situ* formation of the first proteinogenically functionalized $[TeW_6O_{21}O_2(Glu)]^{2-}$ structure reveals unprecedented chemical and geometrical features of the Anderson-type cluster. *Chem. Commun.* **52**:12286.
[3] Bijelic *et al.* (2015) Hen Egg-White Lysozyme Crystallisation: Protein Stacking and Structure Stability Enhanced by a Tellurium(VI)-Centred Polyoxotungstate. *ChemBioChem* **16**:233.
[4] Mauracher *et al.* (2014) Latent and active *ab*PPO4 mushroom tyrosinase cocrystallized with hexatungstotellurate(VI) in a single crystal. *Acta Cryst. D* **70**:2301.

Jena Bioscience GmbH
Loebstedter Str. 71
07749 Jena
Germany

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

IFTA AG
Certified QMS and EMS according to
DIN EN ISO 9001 and DIN EN ISO 14001
Reg.-No.: ICV03597 034 and ICV03597 534

Crystallography & Cryo-EM

ANLAGE ZU PUNKT 6.5:

BERICHT DER KASSENPRÜFER

Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2017 wurde im Februar 2018 am Department Physik, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät der Universität Siegen und in der Abteilung Kristallographie, Institut für Geologie und Mineralogie der Universität zu Köln durchgeführt. Die Prüfung der Originalbelege erfolgte am 05.03.2018 in Essen.

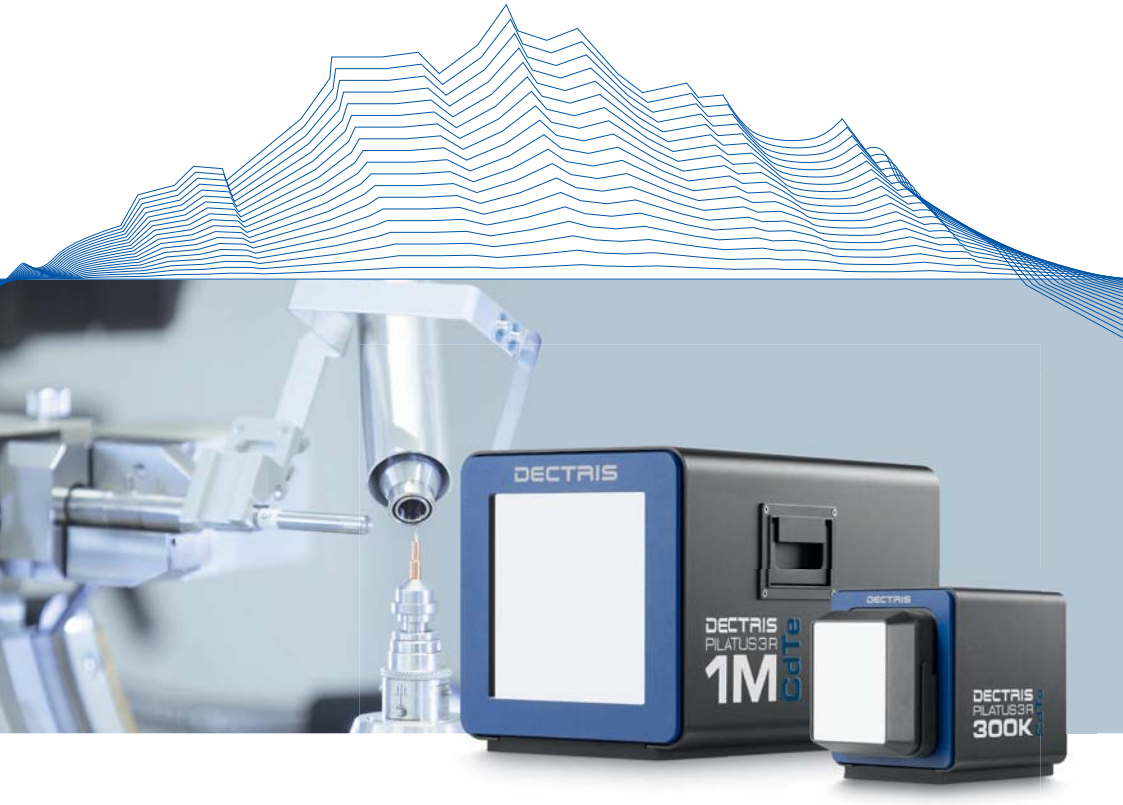
Der Schatzmeister der DGK, Herr Christian Lehmann, hat die zur Prüfung erforderlichen Unterlagen, insbesondere sämtliche Kontoauszüge und Buchungsbelege in gescannter Form, sorgfältig ausgearbeitete Bilanzen aller Unterkonten und eine Gesamtbilanz elektronisch vorgelegt sowie die Originalbelege bereitgestellt.

Die Prüfung hat keine Unstimmigkeiten in der Buchführung ergeben. Die anhand der Bankauszüge geprüften Kontostände zu Jahresbeginn und Jahresende stimmen mit den von Herrn Lehmann für das Geschäftsjahr 2017 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

In Anbetracht der aktuellen Höhe des Guthabens der DGK von über 40.000 € ist zu begrüßen, dass eine zweckgebundene Rücklage (IUCr 2019) von 15.000 € gebildet werden soll, in die in 2017 bereits 6.000 € eingeflossen sind.

Petra Becker-Bohatý, Köln und Ullrich Pietsch, Siegen

DECTRIS
detecting the future



PILATUS3 R CdTe

Large area high-energy detectors for laboratory applications

- Sharpest spatial resolution thanks to direct detection
- Quantum efficiency > 90% for Mo, Ag, and In
- No readout and dark noise
- Energy discrimination for fluorescence and background suppression

sales@dectris.com | www.dectris.com

ANLAGE ZU PUNKT 6.6:

BERICHT DES VERTRETERS DER DMG IM VORSTAND DER DGK

Die zwei vorangegangenen DMG Vorstands- und Beiratssitzungen erfolgten am 24.09.2017 im Gebäude MARUM der Universität Bremen anlässlich der DMG-Jahrestagung 2017 (Gemeinschaftstagung DGGV und DMG) unter Vorsitz von Reiner Klemd (stellvertretender Vorsitzender Francois Holtz) sowie am 22./23.02.2018 in Bad Honnef.

Auf der Mitgliederversammlung in Bremen erfolgten Ehrungen und Preisverleihungen der DMG:

- Abraham-Gottlob-Werner Medaille in Silber: Joseph R. Smyth, University of Colorado, Boulder (USA).
- Beate-Mocek-Preis: Juliana Troch (ETH Zürich).
- Paul-Ramdohr-Preis für 2016: Martin Kutzschbach (TU Berlin und GFZ Potsdam).
- Die Professoren Walter Maresch (Bochum) und Klaus Heide (Jena) wurden auf der Tagung zu Ehrenmitgliedern der DMG ernannt.

Die 2018 angebotenen acht DMG-Doktorandenkurse (*www.dmg-home.org*) sind:

1. Bayreuth: „High-Pressure Experimental Techniques and Applications to the Earth's Interior", Bayerisches Geoinstitut/Universität Bayreuth, Florian Heidelbach, 19.–23. Februar 2018.
2. Frankfurt: „Radiogenic and Non-traditional Isotopes: Analytical Methods and Applications", Institut für Geowissenschaften, Geozentrum Goethe-Universität Frankfurt, Axel Gerdes, 6.–9. März 2018.
3. Freiburg: „Exploration Geology: Ore deposit geology, alteration geochemistry and ore interpretation", Institut für Geo- und Umweltnaturwissenschaften/Mineralogie–Petrologie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, David Dolejš, Malte Junge, 19.–22. März 2018.
4. Bochum: „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung", Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum, Michael Fechtelkord (Arbeitskreis Spektroskopie der DGK), 22.–25. Mai 2018.
5. Bochum: „Application of Diffusion studies to the determination of timescales in Geochemistry and Petrology", Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum, Sumit Chakraborty, Ralf Dohmen, September/Oktober 2018.
6. Hannover: „In-situ-Analyse von Isotopen und Spurenelementen mit (MC-)ICP-MS gekoppelt mit Femtosekunden-Laserablation", Institut für Mineralogie, Leibniz-Universität Hannover, I. Horn, S. Schuth, M. Lazarov, M. Oeser, S. Weyer u. a., 8.–12. Oktober 2018.
7. Potsdam: „Introduction to Secondary Ion Mass Spectrometry in the Earth Sciences", GeoForschungsZentrum Potsdam, Michael Wiedenbeck, eine Woche Ende Oktober/Anfang November 2018.
8. Dresden: „Application of ion beam analysis in mineralogy and geochemistry", Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf in Kooperation mit dem Helmholtz-Institut Freiberg, F. Munnik, R. Heller, A. Renno, November 2018.

Wahlen:

Im Herbst 2017 fanden DMG-Wahlen statt. Die detaillierten Ergebnisse sind unter *https://www.dmg-home.org/dmg-home/vorstand* zu finden. Als stellvertretender Vorsitzender für 2018 und designierter Vorsitzender für 2019–2020 wurde Reinhard X. Fischer, Bremen gewählt. Reiner Klemd wird 2018 weiterhin den DMG-Vorsitz innehaben.

Nächste Tagungen:

Die DMG 2018 erfolgt in Bonn (2.–6. September) gemeinsam mit der DGGV und PalGes unter dem Titel „Living Earth". Organisatoren sind Ambre Luguet (DMG), Niko Froitzheim (DGGV) und Thomas Martin (PalGes).

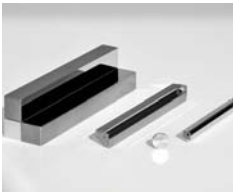
Im Jahr 2019 findet vom 22. bis 25. September 2019 die DMG-DGGV-Gemeinschaftstagung in Münster statt (Organisation H. Bahlburg).

Die DMG wird ihre Jahrestagung 2020 im Rahmen der emc^{2020} durchführen (Krakau, Polen).

Ulrich Bismayer, Hamburg und Jürgen Schreuer, Bochum

incoatec GmbH
Your Partner for X-ray Optics & Microfocus Sources

The four generations of Incoatec Microfocus Sources: IμS, IμS$^{High\ Brilliance}$, IμS 3.0 and IμS DIAMOND



Synchrotron montel optics

Scatterless pinholes SCATEX

PHOTON III detector for synchrotron

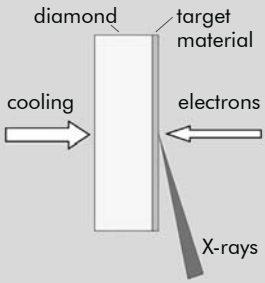
The incoatec enclosure IXE

NEW IμS DIAMOND

The Microfocus X-ray Tube with a Diamond Hybrid Anode

The latest development of Incoatec's X-ray tube factory is a new microfocus sealed tube with a unique anode technology, the diamond hybrid anode, using an industrial diamond substrate as heat sink that is coated with a layer of the target material (e.g. Cu or Mo). The intensity is about 20% higher than the average intensity output of a modern low power microfocus rotating anode.

The IμS DIAMOND combines this new anode technology with the latest generation of Montel multilayer optics to form the most intense microfocus X-ray sealed tube source for in-house diffraction applications.



Principle of the diamond hybrid anode used in the air-cooled IμS DIAMOND.

RÜCKBLICK ZUR 26. JAHRESTAGUNG DER DGK IN ESSEN

Die diesjährige Jahrestagung fand an der Universität Duisburg-Essen am Campus Essen statt. Mehr als 340 Teilnehmer, darunter etwa ein Drittel Studenten und Doktoranden, trafen sich für vier Tage (Montag bis Donnerstag), um über die neuesten Entwicklungen in der Kristallographie zu diskutieren. Dabei erfolgte die Organisation der einzelnen Mikrosymposien in bewährter Weise durch die DGK-Arbeitskreise. Es wurden 156 Vorträge und 32 Poster mit *Lightning Talks* (organisiert durch die Jungen Kristallographen) und 141 Poster präsentiert. Weiterhin gab es sieben Plenarvorträge. Die Tagungssprache war durchgehend Englisch.

Die Tagung wurde am Montag mit dem Plenarvortrag von Prof. Sven Lidin (Lund, gegenwärtig auch Vorsitzender der *International Union of Crystallography IUCr*) zum Thema Strukturdynamik in kristallinen Festkörpern eröffnet. Danach begann eine Folge von Mikrosymposien zu allen Aspekten der Kristallographie, die von der traditionell stark vertretenen Biokristallographie über Strukturbestimmungen an Pulvern und Einkristallen bis hin zu Messungen unter extremen Bedingungen, auch *in situ*, reichte. Der Max von Laue-Preis 2017 ging an Dr. Thomas A. White (Hamburg), der in seinem Preisvortrag über „Serial crystallography using synchrotrons and X-ray free-electron lasers: Data processing with CrystFEL“ berichtete. Prof. Holger Dobbeck (Berlin) beschrieb in seinem Plenarvortrag die Aktivierung von Kohlendioxid an biologischen Nickel/Eisen-Zentren. Der zweite Plenarvortrag zum Thema Biokristallographie wurde von Prof. Randy Read (Cambridge) mit kristallographischen Einblicken in die Renin-Sekretierung gegeben.

Großen Zuspruch fand die Posterbegehung, die in zwei separaten Sitzungen am Dienstag und am Mittwoch stattfand. Drei Posterpreise wurden von der Zeitschrift „Crystals“ und ein Posterpreis der *Protein Data Bank in Europe (PDBe)* verliehen. Weitere Posterpreise stiftete die Firma STOE zur direkten Vergabe durch die die Jungen Kristallographen.

Prof. Leonid Dubrovinsky (Bayreuth) berichtete in seinem Plenarvortrag über kristallographische Messungen unter extremen Bedingungen. Im Plenarvortrag von Prof. Kenneth D. M. Harris (Cardiff) ging es um neue experimentelle Techniken zur Untersuchung von Kristallisationsvorgängen, insbesondere von molekularen (organischen) Verbindungen, wie sie auch in der Pharmazie wichtig sind. Prof. Paulina Dominiak (Warschau) beschrieb in ihrem Plenarvortrag die kristallographische Aufklärung von intermolekularen Wechselwirkungen, insbesondere über Messungen der Elektronendichte.

Das Konferenzdinner am Mittwoch fand in der Borbecker Dampfbierbrauerei bei reichlich Bier und herzhafter Kost statt. Im abschließenden Plenarvortrag am Donnerstag zum Schluss der Tagung berichtete Prof. Erdmann Spiecker (Erlangen) über die faszinierenden Möglichkeiten, die moderne Methoden der Transmissionselektronenmikroskopie bei *In-situ*-Messungen erlauben.

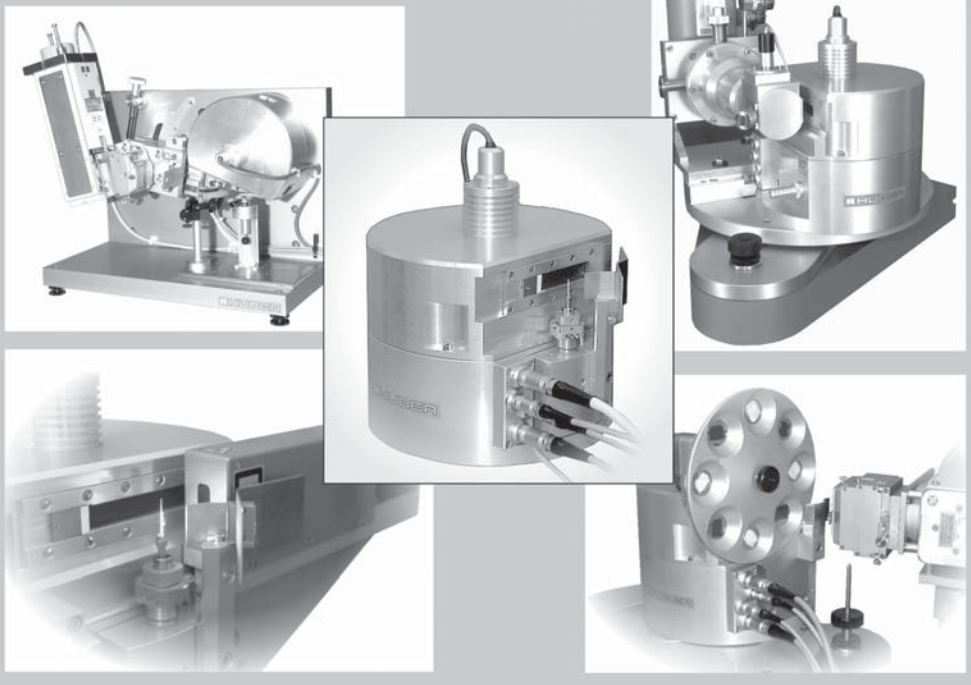
Die Tagung wurde wie in den vergangenen Jahren durch die Firma Conventus in reibungsloser Weise organisiert. Finanzielle Unterstützung gab es von der Universität Duisburg-Essen und der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). Weiterhin erlaubte eine umfangreiche Industrieausstellung mit 13 Ausstellern einen Einblick in die neuen apparativen Entwicklungen auf dem Gebiet der Kristallographie. Dies wurde ergänzt durch zwei Lunch-Symposien der Firmen Rigaku und ThermoFisher.

Insgesamt zeigte sich die Kristallographie bei der Jahrestagung in Essen in ihrer vollen Breite, wobei es besonders erfreulich war, dass so viele junge Nachwuchswissenschaftler ihre Ergebnisse als Kurzvortrag und als Poster präsentierten.

Matthias Epple, Essen

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

BERICHTE DER STIPENDIATEN ZUR IUCR24 IN HYDERABAD

Ella Schmidt, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Vom 21. bis 28. August 2017 hatte ich dank des Stipendiums der DGK die Möglichkeit, an der IUCr24-Tagung in Hyderabad, Indien teilzunehmen. Für diese Unterstützung möchte ich mich recht herzlich bedanken.

Auf der Konferenz konnte ich die ersten Ergebnisse meiner Promotion einem internationalen Fachpublikum vorstellen. Mein Vortrag „Diffuse single crystal scattering corrected for molecular fomfactor effects“ war Teil des sehr gut besuchten Microsymposium MS-076 „Diffuse scattering in crystalline structures“. Sowohl durch die Vorträge in diesem Symposium, als auch durch die Diskussionen mit anderen Teilnehmern habe ich viele Anregungen für meine eigene Arbeit mitgenommen.

Ich konnte sehr viele interessante Kontakte knüpfen: Zum einen lernte ich Wissenschaftler aus anderen Arbeitsgruppen kennen, die sich ebenfalls mit fehlgeordneten Systemen beschäftigen und so wichtiges Feedback zu meiner Arbeit geben konnten. Da sich meine Arbeit hauptsächlich mit Methoden zur Datenauswertung beschäftigt, war es für mich besonders spannend und wichtig Kontakte zu Wissenschaftlern zu knüpfen, die sich mit den Messungen dazu beschäftigen. In vielen Vorträgen und bei den Poster-Sessions bin ich immer wieder auf Arbeitsgruppen gestoßen, die diffuse Streuung beobachten, diese aber bis jetzt nur teilweise bzw. gar nicht analysieren; dies führte zu sehr interessanten Diskussionen.

Durch die Unterbringung in der studentischen Unterkunft habe ich viele Doktoranden und Post-Docs aus anderen Ländern kennengelernt und viel über die Arbeit an Universitäten außerhalb von Deutschland erfahren. Zudem konnte ich durch das Konferenz-Dinner und das angebotene *Sight-Seeing*-Programm einen Teil der beeindruckenden indischen Kultur kennen lernen. So kam ich mit vielen interessanten Kontakten und Eindrücken aus Indien zurück nach Deutschland, eine Erfahrung, die ich ohne die freundliche Unterstützung der DGK nicht hätte machen können.

Claudio Eisele, Universität Bayreuth

Throughout the eight days of IUCr Congress 2017, a broad variety of crystallographic topics was covered by three plenary lectures, 39 keynote lectures, 126 micro symposia, diverse side meetings, a software fayre and more.

Participants of one of the six workshops started already at 9 am into the first official congress day (Monday, 21st of August). The Rigaku Oxford Diffraction workshop gave me an introduction into the programs CrysAlis Pro and Olex 2. One of my personal highlights was Ron Lifshitzs keynote lecture about soft quasicrystals (Tuesday, 22nd of August). These are made up of large building blocks like block copolymers, dendrimers, nanoparticles or colloids. Some of them show 8-, 10- or 12-fold rotational symmetry and a surprisingly high thermodynamic stability. Dmitry Khalyavin's keynote lecture dealt with modern magnetic materials showing special physical phenomena like magneto-orbital coupling. The topics of micro symposium 35 "Crystal Structure Relationships and Their Applications" matched my groups research interests quite well. There, Gervais Chapuis gave an illustrative introduction into the superspace concept in crystal chemistry. The last talk of this afternoon session was even directly related to my own research project; it was held by Swastik Mondal who outlined the mechanism of chemical bonding in boron carbide. In particular, crystallographers with a background in chemistry were very likely attracted to the keynote lecture "Charge density as a powerful tool to predict reactivity" by Dietmar Stalke. Amongst other things, he was arguing for a closer cooperation between experimentalists and theoreticians in modern chemistry.

On conference day 4 (Thursday, 24th of August) it was my turn to present my poster titled "Single-Crystal X-Ray Diffraction Investigation of Rhombohedral Boron". There has been an ongoing debate about the crystal structure of this elemental boron phase for at least half a century. Fruitful discussions with several visitors came up, in which I replied on many questions and also obtained suggestions and hints for an optimized structure refinement. Furthermore, I had the possibility to discuss the challenges of my project with further participants on the consecutive days. It is fair to say that, for me, one (among other) beneficial aspect(s) of the congress was to get new ideas, new inspiration and motivation for my PhD project.

In order to get some insights into new X-ray sources (micro symposium 68, Friday, 25th of August), I followed Alexander Blagov's presentation "New Dimensions for Imaging and Diffraction Research at European XFEL", as well as Vernon Russell Smith's presentation "Development of Automated Home-Lab Beamlines" with keen interest. Due to personal curiosity towards single-molecule magnets I am highlighting Song Gao's keynote lecture "Magnetic and Electric Anisotropy in Molecular Crystals" for congress day 6 (Saturday, 26th of August). He presented a couple of polynuclear transition metal complexes and complexes of the lanthanide elements in connection with their magnetic and electric properties. I am also mentioning Somnath Dey's and Maxim Bykov's presentations ("Modulated and High Z Phases in Cobalt(III) Sepulchrate Trinitrate" and "Novel Nitrogen-Rich Iron Nitrides Synthesized at High-Pressure High-Temperature Conditions"). For Sunday, 27th of August, I am giving emphasis on the afternoon session about charge and spin density investigations consisting of lectures by Mohamed Souhassou ("Joint-Refinement of Spin and Charge Densities of Organic Radicals"), Jacob Overgaard ("Charge Density and Magnetic Anisotropy of Dysprosium-Based Single-Molecule Magnets") and Jozef Kozisek ("Charge and Spin Density Study of Ni(III) Dithiolate complex").

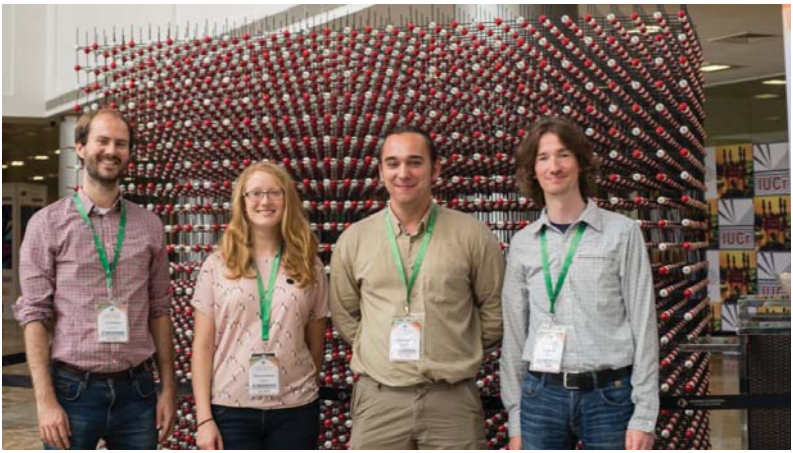
I would like to thank the DGK for generous financial support.

Falk Meutzner, TU Bergakademie Freiberg

Nach einem mehrstündigen Mehrstoppflug über mehrere tausend Kilometer und Meere erreichte ich mit meinem russischen Kollegen den Flughafen Hyderabads. Eine Meute orangefarbener Basecaps und grauer T-Shirts mit dem Logo der kommenden IUCr-Tagung erwartete uns dort und verfrachtete uns in extra organisierte Taxis um in das Abenteuer Indien einzutauchen: Zum ungewohnten Linksverkehr kam unberechenbarer Verkehr und ein Hupkonzert synkopierter Rhythmen. Bereits im Vorhinein hatte ich gehört, dass Indien für sein Chaos, für das Konzept des Bunten bekannt wäre und wir wurden nicht enttäuscht.

Während der Eröffnungsveranstaltung erzählte Prof. Gautam R. Desiraju stolz von den Vorbereitungen der Konferenz, die insgesamt eine gute Dekade in Anspruch nahmen. Besonders im Gedächtnis blieb mir eine Karte Indiens, in der alle Bundesstaaten eingezeichnet waren, eingefärbt mit der Flagge eines Landes mit der gleichen Bevölkerungszahl. Telangana, dessen Hauptstadt Hyderabad ist, zierte das rote Ahornblatt Kanadas – sollte es ein Zufall sein, dass der indische Bundesstaat, in dem die 24. IUCr-Tagung stattfand, die gleiche Bevölkerungszahl wie das Land, das die 23. IUCr-Tagung ausrichtete, aufweist? Abgerundet wurde die Veranstaltung, an der Wissenschaftler von allen Kontinenten teilnahmen, von einer Darbietung traditioneller indischer Musik mit Gesang, Perkussion und verschiedenen Melodieinstrumenten.

Das Programm des „24th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography“ umfasste insgesamt 125 Mikrosymposien, 39 Keynote- und 3 Plenarvorträge unterschiedlichster Fachrichtungen, die auf sieben Tage verteilt waren: Im Durchschnitt fanden neun Mikrosymposien gleichzeitig statt, die meist von einem zusätzlichen Parallelprogramm und „Special Activities“ begleitet wurden. Zudem gab es verschiedene Software-Präsentationen (sogenannte *Software Fairs*), ECA- und IUCr-Besprechungen. Am Eröffnungstag gab es zudem wieder verschiedene Workshops zum Einstieg in etwa XAFS, Röntgen- und Elektronendiffraktometrie und Datenbanken. Wem das noch nicht reichte, hatte reichlich Zeit die 58 Industrieausstellenden zu treffen oder eine Struktur mit einem mobilen Diffraktometer vor Ort lösen zu lassen – ein Novum auf der diesjährigen Tagung, um Teilnehmern aus Arbeitsgruppen ohne diese Möglichkeiten, die Gelegenheit auf der Tagung einzuräumen.



Mein persönliches Highlight war die Session „Crystal Structures Relationships and their Applications“ mit sehr unterschiedlichen und interessanten Vorschlägen und Ideen für die Gruppierung und Systematisierung von Kristallstrukturen anhand etwa derer Komplexität. Nicht unerwähnt möchte ich allerdings das Mikrosymposium mit dem originellsten Titel lassen: „Perovskites, perovskites and perovskites“. Ein Novum auf dieser Tagung war die Verteilung der Postersession auf die Kaffee- und Mittagspause jeden Tages: Anstatt zweier riesiger Sessions mit jeweils etwa 600 Postern wie in Montréal, gab es jeden Tag nur etwa 100 Poster zu sehen. Eine Änderung, die mir persönlich gut gefallen hat. Weiterhin war die Konferenz insgesamt interdisziplinärer als im Vorjahr, mit (mehr) Sessions/Vorträgen zu Kristallographie in der Archäologie, Kunst und Kunstgeschichte, wie Kristallographie in anderen Ländern gelehrt wird oder etwa, wie Kristallographie helfen kann einen Job zu finden. Die Veranstalter gaben ihr Bestes ein umfangreiches und breitgefächertes Angebot vorzubereiten. Abgerundet wurde die Tagung durch das Konferenzbankett, welches ganz im Zeichen Bollywoods stand: Eine Moderatorin führte durch mehrere Tanzdarbietungen und versuchte das Publikum mit einzubeziehen, während eine breite Palette indischer Speisen zur Auswahl stand. Am Ende legte ein DJ noch etwas mehr als eine Stunde Tanzmusik auf, wodurch vor allem die jüngeren Kristallographen ihren Weg zur Bühne fanden, um zu tanzen und zu feiern. Leider war dadurch ein wissenschaftlicher Austausch während der Veranstaltung schwierig, aber die gute Laune – die Punkt 22:00 Uhr enden musste, weil alle Busse die Konferenzteilnehmer zu ihren Hotels brachten – hallte noch lange nach.

Die nächste IUCr Tagung – das 25. Jubiläum – wird 2020 in Prag stattfinden. Ich danke der DGK herzlich für die finanzielle Unterstützung und bin froh, in Hyderabad gewesen zu sein.

Single crystal X-ray diffractometer

Mateiral research and development

Measurement speed: < 5 seconds per sample

Simple orientation determination: one click starts analysis, complete results are displayed automatically (incl. stereographical projection)

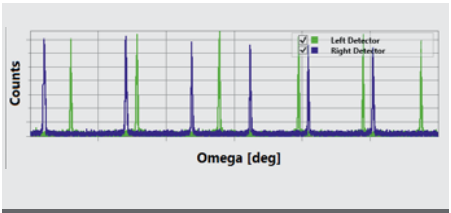
Low-cost: air-cooled X-ray tube, compact & robust design save space and operational costs

Mapping option: surface orientation map of wafers and ingots

DDCOM (XRD)

SDCOM (XRD)

Samples (quartz, sapphire, SiC & many more)



Omega-scan diagram (Sapphire)

Freiberg Instruments GmbH

Delfter Str. 6
D-09599 Freiberg, Germany

t +49 3731 419 54 0
sales@freiberginstruments.com
www.freiberginstruments.com

POLISH–GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING 2020

Auf der DGK-Mitgliederversammlung im März 2018 wurde der Vorschlag angenommen, in 2020 die Jahrestagung der DGK als Gemeinschaftstagung mit den polnischen Kristallographen durchzuführen. Im Zuge der Vorbereitung fuhren Susan Schorr und ich Anfang Juni auf Einladung der Organisatoren zum 60. Polnischen Kristallographischen Treffen (60 Konwersatorium Krystalograficzne) in Breslau (Wrocław). Diese Tagung wird jährlich vom Komitee für Kristallographie der Polnischen Akademie der Wissenschaften und der Polnischen Kristallographischen Gesellschaft gemeinsam veranstaltet. In ihrem Rahmen findet auch die Generalversammlung der Polnischen Kristallographischen Gesellschaft statt. Sie kann also als direktes Pendant zu unserer Jahrestagung gesehen werden.

In diesem Jahr fand die Tagung im Breslauer Institut für Tieftemperatur- und Strukturforschung der Polnischen Akademie der Wissenschaften statt. Da sie mit etwa 150 Teilnehmern deutlich kleiner ist als unsere Jahrestagung und auch ohne parallele Vortragssessions gehalten wurde, war dies ausreichend. Für unsere Gemeinschaftstagung erwarten wir aber insgesamt etwa 500 Teilnehmer; hier würden wir andere Räumlichkeiten finden müssen. Außer der Eröffnungsveranstaltung und der abendlichen Grillparty konnten wir leider nur an einem Symposium, dem mit unseren eigenen Vorträgen, sowie der Postersession teilnehmen. Das reichte aber aus, um zu sehen, dass die Forschungsgebiete der polnischen Kristallographen ähnlich gelagert und ähnlich weit gestreut sind wie in Deutschland. Die wissenschaftlichen Beiträge sollten sich also bei einer Konferenz ohne Probleme miteinander integrieren lassen.

Den größten Teil unseres Aufenthalts verbrachten wir aber in Planungssitzungen mit den polnischen Kollegen. Dort wurden erste organisatorische Fragen geklärt, vor allem die Gründung und Struktur eines aufzustellenden gemeinsamen Organisationskomitees. Einige grundlegende Punkte kristallisierten sich aber schon bei diesem ersten Treffen heraus. So wird die Konferenz mit fast abschließender Sicherheit in der Woche vom 24. bis 28. Februar 2020 stattfinden. Aufgrund der unterschiedlichen Semesterferien in Polen und in Deutschland ist dies die einzige, kleine zeitliche Überlappung der vorlesungsfreien Zeit. Dieses Datum sollte man sich also jetzt schon im Kalender notieren. Konferenzort wird Breslau sein. Die Bahnverbindung dorthin ist zwar leider seid der Einstellung der Direktzüge Berlin–Breslau etwas umständlich, aber es gibt eine Vielzahl guter Fernbusverbindungen von Deutschland nach Breslau und der Flughafen Breslau wird unter anderem von Frankfurt, Hamburg, Dortmund, München und Zürich angeflogen. Dazu steht mit dem *TU Wroclaw Conference Center* ein sehr schönes, zentral gelegenes, preiswertes Konferenzzentrum in der für uns richtigen Größe zur Verfügung. An anderen angedachten Orten wie Poznań (Posen) ist das nicht der Fall. Die inhaltliche Struktur der Konferenz ist zu diesem frühen Zeitpunkt natürlich noch völlig offen. Aufgrund der Teilnehmerzahl wird sie aber voraussichtlich der eines normalen DGK-Treffens ähneln.

Daniel Többens, Berlin

PHOTON III – Capture More Reflections

The NEW PHOTON III

Speed provides the one genuinely modern pleasure - Aldous Huxley

Modern crystallography beamlines use large active area pixel array detectors to optimize the speed and efficiency of data collection. The new PHOTON III offers the same advantage for your home laboratory with an active area of up to 140 x 200 mm². The PHOTON III surpasses any laboratory detector in Detective Collection Efficiency (DCE) and guarantees the best data for your most challenging experiments.

Contact us for a personal system demonstration **www.bruker.com/photon3**

IUCr-2029 in Berlin?

Von den bisherigen 24 Kongressen der IUCr fand nur ein einziger in Deutschland statt und zwar der 13. Kongress 1984 in Hamburg. Nach derzeitigen Planungen wird der 25. Kongress 2020 in Prag stattfinden, der 26. 2023 in Melbourne und der 27. dann möglicherweise in Xian in China. IUCr-Kongresse werden von vielen Wissenschaftlern aus der ganzen Welt besucht und stellen die größten internationalen Leistungsschauen der Kristallographie dar. 2011 kamen ca. 2800 Teilnehmer nach Madrid, 2014 kamen ca. 2750 nach Montreal und 2017 kamen ca. 1750 nach Hyderabad. Vor diesem Hintergrund entwickelte sich der Gedanke, dass Deutschland auch wieder einmal als Gastgeber an der Reihe sei. Ein IUCr-Kongress in Deutschland böte die einmalige Gelegenheit, die internationale Kristallographiegemeinde in Deutschland willkommen zu heißen und die weitreichenden deutschen Aktivitäten auf diesem Gebiet international zu präsentieren.

Nach einiger Zeit der Überlegung entstand der Plan, den Gedanken Taten folgen zu lassen, und so wurde die Idee, dass sich die DGK um die Ausrichtung des 28. Kongresses bewerben sollte, dem DGK-Vorstand in seiner Dezembersitzung vorgestellt. Die Idee wurde sehr positiv aufgenommen und Berlin wurde als möglicher Austragungsort favorisiert. Natürlich ist allen bewusst, dass ein derartiges Unterfangen immer auch ein finanzielles Risiko mit sich bringt. Allerdings ließe sich dieses Risiko für die Gesellschaft durch die eventuelle Gründung einer gemeinnützigen GmbH abfangen. Schließlich beauftragte der DGK-Vorstand einen von uns (Manfred S. Weiss) mit der Zusammenstellung eines Teams und der Einleitung der ersten Schritte.

Diese Schritte umfassen die Erfassung der finanziellen Eckdaten auf der Basis der früheren Kongresse, das Design eines Konferenzlogos, den Ankauf der Domäne *www.iucr2029.org* bis hin zur geplanten Präsentation einer Vorbewerbung auf dem 25. Kongress in Prag. Dort werden wir die DGK mit einem Stand vertreten und der Welt erstmals unser Ansinnen präsentieren, den Kongress 2029 nach Berlin bzw. nach Deutschland zu holen. Ein wichtiger Zwischenschritt dahin war die Vorstellung der IUCr-2029-Idee auf der DGK-Konferenz in Essen. Über 150 Konferenzteilnehmer trugen sich in die Unterstützerliste ein und sind seither stolze Träger eines IUCr-2029-Unterstützerbuttons. Weitere Zwischenschritte beinhalten das Vorfühlen bei anderen europäischen kristallographischen Gesellschaften sowie eine mögliche Vorstellung der Idee auf der diesjährigen ECM-Tagung in Oviedo.

Abschließend möchten wir bemerken, dass wir kein geschlossener Club sind. Jeder, der gerne daran mitarbeiten und mithelfen möchte, die IUCr-Konferenz 2029 nach Berlin zu holen, ist uns herzlich willkommen.

Das IUCr-2029-Team:
Julia Dshemuchadse,
Udo Heinemann,
Christian Lehmann &
Manfred S. Weiss

Die Arbeitskreise der DGK berichten

Bericht zum 18. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“

22.–25. Mai 2018, Ruhr-Universität Bochum

Einen Einblick in die Welt der NMR-Spektroskopie bot der alljährliche Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum. Vom 22. bis 25. Mai 2018 präsentierte der Kursleiter Dr. Michael Fechtelkord die theoretischen Grundlagen und den praktischen Einsatz der NMR-Spektroskopie. Für den vielfältigen Einsatz des komplementären Messverfahrens zur Charakterisierung von Struktur und Dynamik unterschiedlichster Feststoffe interessierten sich insgesamt 13 Teilnehmer aus den verschiedensten Fachbereichen, wie der Chemie, der Werkstoffwissenschaften und der Mineralogie/Geowissenschaften.

Nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen, den Aufbau des Spektrometers und die verschiedensten Messmethoden, erfolgte eine erste Messung zur Bestimmung der ^{1}H-Spin-Gitter-Relaxation und -Dynamik am Beispiel des Tetramethylammoniumiodids (TEMeAJ) in Abhängigkeit steigender Temperatur (298–430 K). Dies war die erste Gelegenheit für die Teilnehmer am FT-NMR-Spektrometer ASX 400 WB einzelne Arbeitsschritte zu beobachten und auch selbst durchzuführen. Im Anschluss dienten die gewonnen T_1-Messpunkte der Bestimmung von Aktivierungsenergien und Korrelationszeiten der verschiedenen dynamischen Bewegungsprozesse. Der erste Tag des Kurses wurde mit einer „Icebreaker-Party“ in der Kneipe „Summa Cum Laude“ bei einem gemeinsamen Abendessen in gemütlicher Runde beendet – erste Gelegenheit für den Leiter und die Teilnehmer des Kurses sich besser kennenzulernen, sich über ihre derzeitigen Projekte auszutauschen und gemeinsame Interessen und Thematiken zu diskutieren.

Am zweiten Tag lag der Schwerpunkt auf homonuklearen und heteronuklearen magnetischen dipolaren Wechselwirkungen und der chemischen Verschiebung. Zudem wurde das *Magic-Angle-Spinning*-Verfahren (MAS) vorgestellt. Am Nachmittag erfolgte wieder eine praktische Anwendung des erlernten Wissens über die Aufnahme der MAS-NMR-Spektren von ^{29}Si, ^{19}F und ^{1}H synthetischer Phlogopitproben. Mit der Hilfe des Programmpakets DMT2010 erfolgte die Anpassung und Auswertung der aufgenommenen Spektren. Nach getaner Arbeit traf sich die gesamte Runde zu einem weiteren, lustigen Gesellschaftsabend: Es ging zum Kegeln in die Kneipe „Vuko’s“!

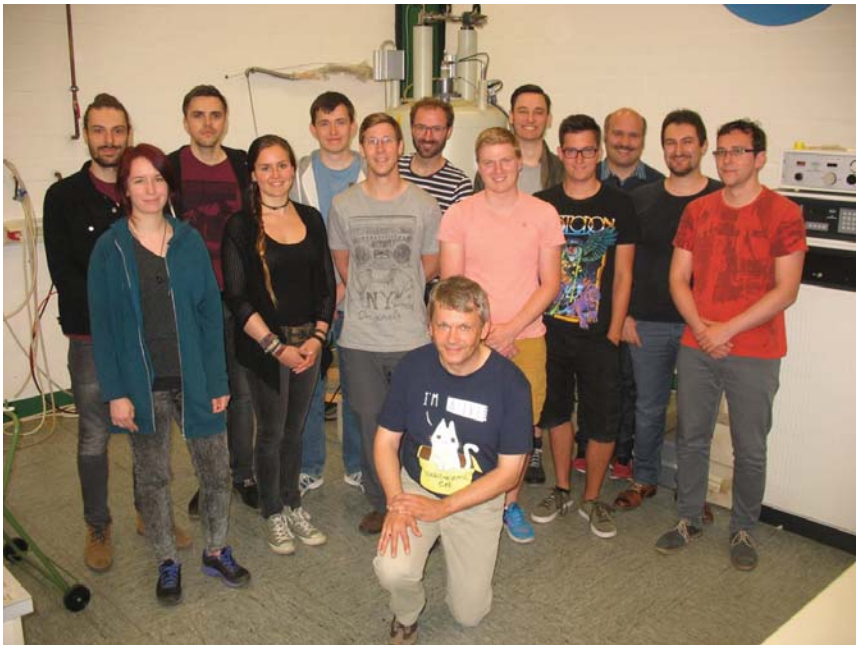
Mit der Hahn’schen Spin-Echo-Methode, als Beispiel für eine Multipulstechnik zur impulsfreien Aufnahme der sogenannten „Free Induction Decays“ (FIDs), wurde der nächste Theorieteil fortgesetzt. Außerdem wurde das „Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment“ (INADEQUATE) vorgestellt, um Si-Tetraederplätze zu charakterisieren, welche kristallographisch benachbart sind. Darauf folgte eine Einführung in Korrelationsexperimente. Am Nachmittag wurde dann ein „Cross Polarisation Magic Angle

Spinning“ (CPMAS) Experiment kontaktzeitabhängig durchgeführt. Mit Hilfe eines Tabellenkalkulationsprogramms konnte dann aus dem zweiten Moment der H-Si-Abstand berechnet werden.

Der letzte Tag wurde dann den Atomkernen mit einem Spin $I > ½$ gewidmet. Diese kennzeichnen sich durch Quadrupolwechselwirkungen. So wurde im Kurs das Doppelrotationsverfahren (DOR), „Multi-Quanten Magic-Angle Spinning“ (MQMAS) und die „Satellite Transition Spectroscopy“ (SATRAS) vorgestellt. Im praktischen Teil wurde Glaubersalz (^{23}Na) im MAS-Verfahren gemessen sowie eine ^{27}Al-SATRAS-NMR-Messung an Korund durchgeführt. Die ^{27}Al-Messung konnte aufgrund eines Gerätefehlers nicht erfolgreich durchgeführt werden, sodass zur Übung die Daten des vergangen Kurses genutzt wurden. Neben dem ^{23}Na-MAS-NMR-Spektrum wurde zu Übungszwecken das statische Spektrum von Deuterium sowie ^{7}Li ausgewertet.

Zum Schluss möchten wir uns im Namen aller Teilnehmer bei Herrn Dr. Fechtelkord für den mehr als gelungenen Shortcourse bedanken. Es wurde nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen der NMR-Spektroskopie, ein breiter Überblick über die Anwendungsmöglichkeiten in den Geowissenschaften geboten. Durch umfassende Erläuterungen und die Geduld von Herrn Fechtelkord beim Erklären ergab sich dabei eine angenehme Lern- und Arbeitsatmosphäre. Eine ständige Versorgung mit Heißgetränken während der Auswertung der Spektren trug nicht unwesentlich dazu bei. Und schlussendlich möchten wir uns noch bei allen anderen Teilnehmer/innen für eine schöne und lehrreiche Woche bedanken.

Mara Lönartz, Moritz Malott, Bonn



Rigaku

Leading With Innovation

SmartLab

Automated Multipurpose X-ray Diffractometer

- **Low-maintenance 9 kW X-ray source PhotonMAX**
- **High-energy resolution 2D detector HyPix-3000**
- **New CBO family, fully automated beam switchable CBO-auto and high-resolution micro area CBO-μ**
- **Lifetime perfect alignment**
- **SmartLab Studio II measurement and analysis software**

Rigaku Corporation and its Global Subsidiaries
Hugenottenallee 167 | 63263 Neu-Isenburg, Germany | TEL +49 610 277 99 - 951 | www.Rigaku.com | rese@Rigaku.com

Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2017

Vom 6. bis 9. Juni 2017 fand am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum der alljährliche Shortcourse der DMG/DGK „Anwendung der Festkörper NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ statt. Zu diesem 17. Shortcourse kamen 12 Studierende und Doktoranden aus Bonn, Bochum, Münster, Hannover, Heidelberg, Karlsruhe und Stuttgart aus den unterschiedlichsten Bereiche der Geowissenschaften, Chemie und Chemieingenieurwesen zusammen.

Der nächste Shortcourse wird vom 22. bis 25. Mai 2018 stattfinden.

Der Arbeitskreis 12 wird auf der DGK-Tagung in Essen wieder ein Mikrosymposium „Spectroscopic methods in crystallography“ mit angegliederter Postersession am Mittwoch, den 07.03.2018 durchführen. Von den insgesamt acht angemeldeten Beiträgen werden sechs als Vorträge und zwei als Poster präsentiert.

Voraussichtlich im August 2018 bezieht das Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik neue Gebäude. Die alten Gebäude sind stark durch PCB belastet. Dies bedeutet auch einen Umzug für das Festkörper-NMR-Spektrometer, das seit 1993 in Betrieb ist. Man kann nur hoffen, dass das NMR, hier vor allem der Kryomagnet nach dem Umzug wieder betriebsbereit ist.

Es gibt jedoch die Möglichkeit, dass aufgrund des Umzuges alle Großgeräte, die älter sind als 15 Jahre durch Ersatzbeschaffungen im Rahmen des Ländergroßgeräteprogrammes ersetzt werden. Dies würde bedeuten, dass dann ein neues NMR-Spektrometer beschafft werden könnte. Die Begutachtung soll demnächst durch die DFG stattfinden. Ich habe hierzu bereits die Vorsitzende der DGK, Susan Schorr, um Unterstützung durch die Gesellschaft gebeten.

Michael Fechtelkord, Bochum

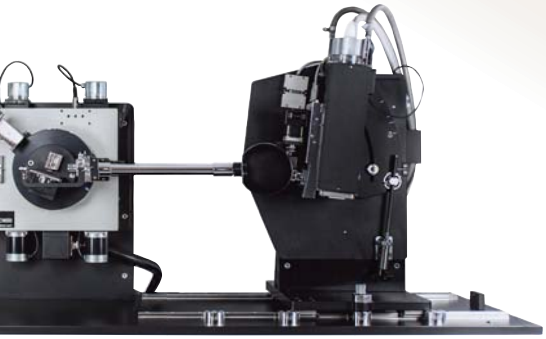
STOE

SINCE 1887

STOE UNPARALLELLED QUALITY

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

SINGLE CRYSTAL DIFFRACTOMETRY



STADI MP
ONE POWDER DIFFRACTOMETER – THREE GEOMETRIES

POWDER DIFFRACTOMETRY

We accept no compromises when ensuring the best quality for your STOE powder and single crystal diffractometer systems.

We guarantee this with our new and unprecedented:

10 YEAR | STOE Parts & Labor Guarantee for all new STOE Diffractometer Systems

Contact us for your best XRD solution and terms & conditions at info@stoe.com.

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

WWW.STOE.COM

BERICHT DES AK 21 „JUNGE KRISTALLOGRAPHEN“ / „YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS“

Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ ist seit fünf Jahren ein fester Bestandteil der DGK. Auch im letzten Jahr konnten wir uns über steigende Mitgliederzahlen freuen und verzeichnen nun 170 Mitglieder aus 14 verschiedenen europäischen und nicht-europäischen Ländern. Auch bei den „Jungen Kristallographen“ zeichnet sich die Diversität der Kristallographie ab. Mehr als die Hälfte der Mitglieder stammt aus den Fachgebieten der Materialwissenschaften und Chemie, gefolgt von der Mineralogie, der Biologie und der Physik. Durch die (leider) fortschreitende Schließung rein kristallographischer Institute lassen sich aus diesem Bereich die wenigsten Vertreter vorfinden.

Das breite Interesse am Arbeitskreis verdanken wir unserer starken Präsenz auf den DGK-Jahrestagungen und auf der DGK-Homepage, durch jährliche Herbsttreffen sowie der Unterstützung durch Gruppenleiter und unsere Industriepartner. Wir präsentieren uns sowohl auf der DGK-Homepage (*http://dgk-home.de/aks/jkyc*) als auch mit einem detaillierten und regelmäßig aktualisierten Blog. Die jährlich stattfindenden Herbsttreffen an deutschen Hochschulen sowie die *Lab Meetings @ STOE*, ebenso wie das regelmäßige *Get Together* während der DGK-Frühjahrstagung helfen uns ein großes Netzwerk aufzubauen. Wir hoffen, dass wir diese schöne „Tradition“ auch in den kommenden Jahren fortsetzen können.

Am 5. und 6. September 2017 fand das *2nd Lab Meeting @ STOE* in Darmstadt statt (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/darmstadt-2017*). Neben den *Lightning Talks* und *Poster-Sessions* der TeilnehmerInnen wurden Führungen durch die Labore von STOE und Fachvorträge von PD Dr. Leonore Wiehl und Dr. Semën Gorfman angeboten. Das Programm wurde durch einen BBQ-Abend von STOE abgerundet. Weitere Unterstützung bekamen wir vom Fonds der Chemischen Industrie, der DGK sowie die Firmen STOE und DECTRIS. Dadurch konnten 22 TeilnehmerInnen ihre aktuellen Forschungsergebnisse und -fragen miteinander diskutieren. Ein ausführlicher Bericht zu diesem Treffen von Wilhelm Maximilian Hützler (Frankfurt) ist im Blog der Jungen Kristallographen einzusehen. Ein herzliches Dankeschön für die Organisation dieses Treffen geht an Melanie Nentwich (Freiberg) und Khai-Nghi Truong (Aachen). Außerdem wollen wir folgenden Posterpreisgewinnern gratulieren: Marius Kremer (Aachen), Nils Nöthling (Mülheim a. d. R.) und Falk Meutzner (Freiberg).

Bei der DGK-Frühjahrstagung im März 2018 in Essen haben die Jungen Kristallographen mit mehreren Teilveranstaltungen aktiv beigetragen (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/essen-2018*). Auch in diesem Jahr konnten insgesamt 29 TeilnehmerInnen in zwei Mikrosymposien in Kurzvorträgen à fünf Minuten ihre aktuelle Forschung vorstellen. Durch andere, parallel verlaufende Veranstaltungen konnte die große Zuhörerschaft des vorherigen Jahres leider nicht erreicht werden. Wir hoffen, im nächsten Jahr erneut zwei Symposien gestalten zu können und würden es sehr begrüßen, wenn diese in weniger Konkurrenz zu anderen Parallelveranstaltungen stünden, um das Symposium auch für Nicht-Vortragende attraktiver

zu machen. Die *Lightning Talk Sessions* wurden ergänzt durch die zugehörigen *Poster-Sessions*, in denen die Ergebnisse intensiv mit anderen TagungsteilnehmerInnen diskutiert werden konnten. Wie auch in den letzten Jahren wurden wieder die drei besten Posterbeiträge prämiert, gesponsort durch die Firma STOE & Cie GmbH. Herzlichen Glückwunsch an die Gewinner Anna Tymoczko (Universität Duisburg-Essen), Matthias Barone (FMP Berlin) und Stefanie Hanke (Universität Leipzig).

Neben den zwei Mikrosymposien fand während der Frühjahrstagung unser *Get Together* statt, bei dem die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises kurz zusammengefasst und kommende Events beworben wurden. Hierbei wurden einige neue Teammitglieder gewählt: nach zwei engagierten Jahren in der Führungsebene wurde die ehemalige Sprecherin Melanie Nentwich (Freiberg) vom neuen Sprecher Khai-Nghi Truong (Aachen) abgelöst. An seine Stelle wurden Linda Hollenbeck (Köln) und Michael Haiduk (Köln) gemeinsam als die neuen stellvertretenden Sprecher der Jungen Kristallographen gewählt. Des Weiteren löste Marius Kremer (Aachen) als neuer Homepage-Verantwortlicher für die Homepage Julia Dshemuchadse (Michigan, USA) und Manuel Rothenberger (Freiberg) als neuer Blog-Verantwortlicher Gregor Hofer (Zürich, Schweiz) ab. An dieser Stelle möchten wir allen ehemaligen Teammitgliedern für ihren hervorragenden Einsatz für die Jungen Kristallographen der DGK danken. Für die finanzielle Unterstützung des *Get Together* danken wir unseren Industriepartnern STOE, DECTRIS und Malvern Panalytical!

Teilnehmer des 2nd Lab Meeting of the Young Crystallographers @ STOE im September 2017

Vom 12. bis 14. September 2018 wird das *3rd Meeting of the Young Crystallographers* in Aachen stattfinden. Das Treffen wird dieses Jahr von Mitarbeitern des Instituts für Anorganische Chemie (Khai-Nghi Truong, Marius Kremer, Prof. Dr. Ulli Englert) und dem Institut für Kristallographie (Sophie-Charlotte Lappe) der RWTH Aachen gemeinsam organisiert. Die ersten Registrierungen sind bereits bei uns eingegangen (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/aachen-2018*). An den drei Veranstaltungstagen wird es neben den bewährten *Lightning Talks*, welche dieses Mal von fünf auf drei Minuten gekürzt werden sollen, und den anschließenden *Poster-Sessions* auch Touren durch die Labore, Nähkästchen-Talks aus Industrie und Akademie und *Social Events* geben. Wir bedanken uns im Voraus für die großzügige Unterstützung von u. a. STOE, Solid State Concepts, HuK Umweltlabor GmbH, Malvern Panalytical, Merck und der DGK.

Des Weiteren stehen die ersten Planungen unseres Herbsttreffens in 2019 in den Startlöchern. Im kommenden Jahr wollen wir erstmals zusammen mit den Jungen Kristallzüchtern (jDGKK) der DGKK ein Treffen organisieren, um eine Zusammenarbeit der beiden Gesellschaften in Zukunft auszubauen. Das Treffen soll wie in den letzten Jahren in Zusammenarbeit mit STOE in Darmstadt stattfinden. Da wir für die Veranstaltung bis zu 60 TeilnehmerInnen einplanen wollen, ist eine frühe Organisation von besonderer Bedeutung.

Ein großes Dankeschön gilt der ehemaligen Sprecherin des Arbeitskreises Melanie Nentwich, die mit ihrer Mitarbeit im Wissenschaftskolleg der DGK auch weiterhin die Interessen der „Jungen Kristallographen“ vertreten wird. Ebenfalls danken wir Julia Dshemuchadse und Gregor Hofer, die sich in den letzten Jahren sehr aktiv und engagiert für unseren Arbeitskreis eingebracht und wichtige Funktionen übernommen haben.

Khai-Nghi Truong (Aachen), Linda Hollenbeck (Köln) und Michael Haiduk (Köln)

PERSONALIA

JUBILARE 2018

Name	Ort	Alter
Hans Löffler	Halle	95
Hermann J. Schloemer	Saarbrücken	95
Josef Zemann	Wien	95
Ulrich Bonse	Dortmund	90
Hans-Wilhelm Helberg	Göttingen	90
Horst Küppers	Kiel	90
Hartmut Bärnighausen	Karlsruhe	85
Hans Bartl	Bad Homburg	85
Annegret Haake	Frankfurt	85
Johann Peisl	München	85
Armin Räuber	Freiburg	85
Jörg Arndt	Berlin	80
Dieter Clauß	Lohfelden	80
Martin Oliver Ellner	Stuttgart	80
Robert B. Heimann	Hannoversch Münden	80
Hermann Irngartinger	Heidelberg	80
Bernt Krebs	Münster	80
Wilhelm Mertin	Gießen	80
Hans Egon Nager	Münster	80
Peter Otten	Schacht-Audorf	80
Hermann Otto	Clausthal-Zellerfeld	80
Heinrich Stuhrmann	Geesthacht	80
Hans-Jürgen Ullrich	Dresden	80
Hartmut Wunderlich	Langenfeld	80
Lutz Däweritz	Berlin	75
Martin Gomm	Uttenreuth	75
Gernot Heger	Aachen	75
Hans-Jürgen Hoffmann	Berlin	75
Jörg Ihringer	Tübingen	75
Armin Kirfel	Bonn	75
Elke Koch	Lehrte	75
Peter Luger	Berlin	75
Wolfgang Moritz	München	75
Jürgen Joachim Müller	Berlin	75
Bernd Müller	Jena	75
German Müller-Vogt	Karlsruhe	75
Elisabeth Rossmanith	Hamburg	75
Werner Schmitz	Leipzig	75
Michael Steiner	Berlin	75
Hans-Jürgen Weber	Dortmund	75

Name	Ort	Alter
Ladislav Bohaty	Köln	70
Gerald Henkel	Paderborn	70
Eberhardt Herdtweck	Garching	70
Hans Hermann Höfer	Worms	70
Claude Lecomte	Vandoeuvre	70
Anton Lerf	Garching	70
Annegret Lipka	Lennestadt	70
Ulrich Löchner	Bochum	70
Hartmut Michel	Frankfurt/Main	70
Georg Nover	Bonn	70
Holger Straube	Chemnitz	70
Martina Andratschke	Regensburg	65
Wolfgang Bensch	Kiel	65
Josef-Christian Buhl	Hannover	65
Ilona Dörfel	Berlin	65
Christian Eisenschmidt	Halle	65
Gerd Folkers	Zürich	65
Angelika Fuhrmann	Karlsruhe	65
Heribert Graetsch	Bochum	65
Klaus Harms	Marburg	65
Udo Heinemann	Berlin	65
Wolfgang Hiller	Reutlingen	65
Hans Wolfgang Hoeffken	Ludwigshafen	65
Bernd Jenichen	Berlin	65
Ute Kaiser	Ulm	65
Frank Kubel	Wien	65
Ulrich Merges	Kaiserslautern	65
Gerhard Müller	Konstanz	65
Hans Roggendorf	Halle	65
Ulrich Straube	Halle	65
Doris Uecker	Berlin	65
Eugen Untersteller	Marburg	65
Leonore Wiehl	Darmstadt	65
Peter Zaumseil	Frankfurt/Oder	65

VERSTORBENE MITGLIEDER

Prof. Dr. Hans-Ulrich Hummel
Knauf AG
Department Chemie und Pharmazie
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
† 18. August 2017

Prof. Dr. Martin Trömel
Institut für Anorganische und Analytische Chemie
der Goethe-Universität Frankfurt am Main
† 4. Oktober 2017

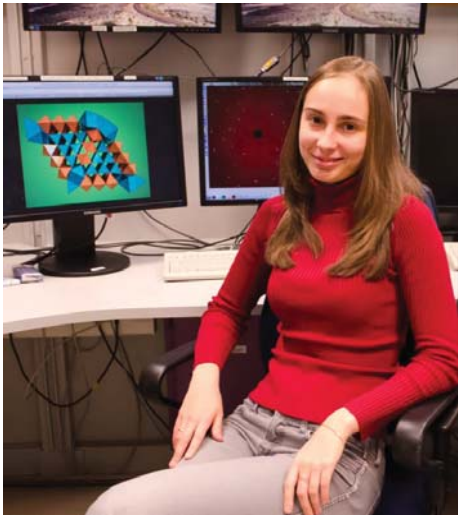
Dr. Hans-Georg Weiß
Berlin
† 25. Januar 2018

Prof. Dr. Otto Jarchow
Mineralogisch-Petrographisches Institut
der Universität Hamburg
† 29. Juli 2018

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DES

MAX-VON-LAUE-PREISES 2018 AN ELENA BYKOVA

FÜR IHRE HERAUSRAGENDEN METHODISCHEN BEITRÄGE ZUR STRUKTURAUFKLÄRUNG UNTER EXTREMEN BEDINGUNGEN UND FÜR DIE ENTDECKUNG UND STRUKTURAUFKLÄRUNG NEUER HOCHDRUCKPOLYMORPHE VON EISENVERBINDUNGEN



Dear Elena,

we are happy to congratulate you on the Max von Laue Prize 2018 of the Deutsche Gesellschaft für Kristallographie *"for your exceptional contribution to the development of the methodology of ultra-high pressure crystallography and for discovery and structure solution of new polymorphs of iron compounds"*. We are also happy to introduce you and your research to our colleagues in the crystallographic community.

Elena was born in 1988 in Amursk, Russia. In 2010 she got the M.Sc. degree in inorganic chemistry from Novosibirsk State University, Russia; in 2015 defended her Dissertation entitled *"Single-crystal X-ray diffraction at extreme conditions in mineral physics and material sciences"* and received the title *Dr. rer. nat.* from the Bayreuth Graduate School of Mathematical and Natural Sciences (BayNAT) of the University of Bayreuth, Germany. After two years of Post-doctoral research at the Bavarian Research Institute of Experimental Geochemistry and Geophysics, University of Bayreuth, in 2017 Elena moved to Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany to work at the Extreme Conditions Beamline (P02.2) at PETRA III.

Whereas powder X-ray diffraction studies stepped over a megabar in pressure already in the 1970s, single-crystal experiments remained much rarer and covered until recently a very limited pressure range: In 2011, when Elena started her work in Bayreuth, the upper limit of single-crystal diffraction studies barely stepped over 15 GPa. Moreover, high-temperature experiments were limited to temperatures of about 1000 K (with external electrical heating) that is too low for chemistry and geosciences, which are usual driving forces in the high-pressure research. The last several years brought significant progress in the field and Elena contributed decisively in all aspects of technical development – methodology of crystals selection and loading, strategy of data collection, construction of laser-heating systems for single-crystal studies, adaptation and installation of portable laser-heating setups at ID09 and ID27 at the ESRF, and at P02 at PETRA III. Elena's (and colleagues) work demonstrates that portable (movable) laser heating setups for diamond anvil cells (DACs) coupled with synchrotron radiation facilities allow single-crystal diffraction experiments at thousands of degrees.

Technological advances resulted in a revolutionary breakthrough in the high-pressure crystallography. Single-crystal synchrotron XRD data, compared to powder data, provide a possibility for unambiguous indexing of diffraction patterns and determination of a space group of crystals subjected to extreme conditions. Moreover, by solving and refining crystal structures *in situ*, at pressures over 170 GPa (more than ten times higher than just a few years ago!) and variable temperatures (in works of Elena ranging from 30 K to over 3000 K), it has become possible to determine chemical compositions of the compounds synthesized at extreme conditions that realized a dream of generations of mineral physicists, geoscientists, high-pressure chemists, and material scientists.

Elena's work was decisive in refutation of the old paradigm that multiple phase transitions under pressurization and/or laser heating have to result in destruction of crystal's quality, thus making single-crystal diffraction studies at extreme conditions (above 10-15 GPa) impossible. In numerous experiments, Elena demonstrated that following a proper experimental protocol, it is possible to preserve crystals, regardless of how many phase transformations they undergo at extreme conditions and even study those synthesized directly in a DAC. The methodology of HPHT crystallography, to which Elena considerably contributed, enables to get XRD data at extreme conditions comparable in quality to those collected at ambient conditions. Elena contributed to the discoveries of numerous chemical and physical phenomena observed in solid matter at extreme conditions on numerous examples – iron oxides with different stoichiometry, silicates, oxychlorides, titanium phosphate, boron allotropes, and borides.

Elena Bykova's own research interests are focused on studies of iron bearing compounds at extreme conditions. She discovered several high-pressure novel iron borides, iron carbides, demonstrated hydrogen bonding symmetrization in FeOOH, investigated iron-rich silicates and carbonates at extreme conditions. Especially important are the results of Elena's work on iron oxides: She discovered nine (!) new oxides with unusual structures and unexpected chemical compositions, demonstrated their homologous relations, and placed new findings in the context of the global Earth's history and dynamics.

Leonid Dubrovinsky and Natalia Dubrovinskaia, Bayreuth

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2018 AN HERMANN GIES

FÜR SEINE ERFOLGREICHEN FORSCHUNGSARBEITEN AUF DEM GEBIET DER SYNTHESE UND DER STRUKTURANALYSE PORÖSER SILIKATE

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

es ist mir eine besondere Freude und Ehre die Laudatio für Hermann Gies zu halten, der heute mit der Will-Kleber-Gedenkmünze der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie gewürdigt wird.

Hermann Gies wurde 1952 in Edenkoben in Rheinland-Pfalz geboren. Die langjährige Mitarbeit im elterlichen Weinbautrieb hat schon früh sein Interesse an den Prozessen geweckt, die zur Entwicklung der komplexen Aromen der dort hergestellten Weine führte. So ist es nicht verwunderlich, dass er als 20-Jähriger das Studium der Chemie an der Christian-Albrechts-Universität (CAU) in Kiel aufnahm und 1978 mit einer von Claus Hadenfeldt betreuten Diplomarbeit über „Untersuchungen im System Ca_3P_2 – $CaBr_2$“ abschloss.

Als schicksalshaft erwies sich eine Begegnung mit Friedrich Liebau, der dem wissbegierigen jungen Studenten einen anderen Zugang zur Untersuchung und zum Verständnis fester Materie aufzeigte: die Kristallographie. Fasziniert von den Konzepten zur Strukturchemie der Silikate begann er, diese auf die bis dahin strukturell wenig untersuchte Gruppe von silikatischen Einschlussverbindungen, den sogenannten Clathrasilen, anzuwenden. Daraus ging die richtungsweisende Dissertation über „Einschlussverbindungen von SiO_2“ hervor, für die Hermann Gies 1986 mit dem Victor-Moritz-Goldschmidt-Preis der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) ausgezeichnet wurde.

Von nun an folgte Hermann Gies seinem eigenen Programm zur Erforschung poröser Silikate. Bereits während der Dissertation war ihm klar geworden, dass konventionelle Beugungsmethoden bei derartigen oft mäßig bzw. nano-kristallinen oder stark fehlgeordneten Materialien an ihre Grenzen stoßen. Dementsprechend war es sein Ziel, einerseits von der Synthese bis zur strukturellen Charakterisierung alles in einer Hand zu haben und andererseits ergänzende spektroskopische Methoden heranzuziehen, die Aufschluss über die lokale Umgebung einzelner Bausteine liefern können. Den Grundstein für die späteren Synthesen neuartiger poröser Silikate und Schichtsilikate legte er 1983/84 als frisch gebackener Postdoktorand mit seinen Arbeiten an Silikatlösungen bei Lesley S. Dent Glasser an der *University of Aberdeen*. Zurück in Kiel widmete sich Hermann Gies wieder der Erforschung von Porosilen, bevor er 1987 und 1988, ausgestattet mit einem Feodor-Lynen-Stipendium der Alexander-von-Humboldt-Stiftung, zweimal nach Kanada ging. An der *University of British Columbia* in Vancouver traf er dabei auf Colin Fyfe, der ihn nicht nur in die Geheimnisse und Möglichkeiten der NMR-Spektroskopie einweihte, sondern ihm auch ein enger Freund wurde.

Kurz nach der Habilitation, die sich zusammenfassend mit dem Einfluss von Gastmolekülen auf Struktur und Stabilität von Porosilen beschäftigte, folgte Hermann Gies 1989 dem Ruf auf den Lehrstuhl für Mineralogie, insbesondere Kristallographie, an die Ruhr-Universität Bochum als Nachfolger von Otto Flörke. Die Annahme eines solchen Rufs mag von außen wie die vorläufige Krönung einer Karriere erscheinen. Für einen gerade 36-jährigen

forschungsbegeisterten Wissenschaftler war es jedoch eher der Sprung in eisiges Wasser. Plötzlich sah sich Hermann Gies neben der Lehre auch mit universitärer Selbstverwaltung, Hochschulpolitik und selbstbewussten Kollegen konfrontiert. Umso mehr ist es ihm anzurechnen, dass Bochum 1993 in die Bresche sprang, als die zunächst in Konstanz geplante zweite Jahrestagung der damals noch jungen DGK wegen einer unvorhergesehenen Erkrankung des Organisators auszufallen drohte.

Überhaupt war 1993 ein erfolgreiches Jahr für Hermann Gies, gelang es ihm doch das „Geowissenschaftliche NMR-Spektrometer" (eingeworben durch einen Gemeinschaftsantrag von Arbeitsgruppen in Bochum, Hannover, Kiel, Mainz und Münster) nach Bochum zu holen und damit dem Ziel seines Forschungsprogramms ein wesentliches Stück näher zu kommen. Viele strukturelle Probleme konnten in der Folge durch die Kombination von NMR-Spektroskopie, die über die lokale Umgebung gewählter Kerne Auskunft gibt, und Beugungsverfahren, welche die langreichweitige Anordnung von Atomen erfassen, erfolgreich bearbeitet werden. Unter der Leitung seines Mitarbeiters Michael Fechtelkord hat sich das NMR-Spektrometer seitdem zu einem festen Bestandteil kristallographischer Ausbildung an der Ruhr-Universität und der jährlichen Doktorandenkurse der DMG entwickelt.

Auf die Etablierungsphase in Bochum folgten wissenschaftlich fruchtbare Jahre, die bisher zu mehr als 190 Publikationen führten. Der Name „Hermann Gies" ist heute nicht nur mit den Clathrasilen, sondern insbesondere auch mit der Synthese und Charakterisierung von neuartigen Zeolith-Typen und Schichtsilikaten verknüpft. Dabei hat er sich eine herausragende Expertise in der Strukturanalyse von „kristallographisch schwierigen" Materialien erworben, deren strukturelle Untersuchung sich materialbedingt häufig auf Röntgenpulverdaten geringer Auflösung stützt. Die internationale Anerkennung als Kristallograph findet ihren Ausdruck u. a. darin, dass er 24 Jahre lang (1989–2013) Mitglied der „Structure Commision" der International Zeolite Association und mehrfach Gastprofessor an internationalen Universitäten war. Dazu gehört z. B. der „George T. Piercy distinguished visiting Professor award" der *University of Minnesota* in 2013. In jüngerer Zeit widmete sich Hermann Gies zudem der Strukturanalyse von Mineraloberflächen, die in geordneter Weise mit verschiedenen Sorbat-Molekülen belegt waren. Auch hierbei wurden erfolgreich verschiedene Verfahren kombiniert, wie die Rasterkraftmikroskopie, Oberflächenröntgenbeugung und numerische Simulationen. Neben der Grundlagenforschung pflegt Hermann Gies bis heute eine intensive Zusammenarbeit mit Industriepartnern, insbesondere der BASF. Daraus sind bisher mehr als 20 Patente und Patentanmeldungen hervorgegangen.

Trotz aller Erfolge ist Hermann Gies ein bescheidener Mensch geblieben, der sich nicht zu schade ist, mit Studierenden ins Gelände zu gehen, und der sich vor allem selbst nicht zu ernst nimmt. Legendär ist sein Interview, dass im NDR-Magazin extra 3 im Rahmen einer treffenden satirischen Betrachtung der ersten Exzellenzinitiative 2006 ausgestrahlt wurde und heute noch auf YouTube zu finden ist.

Jürgen Schreuer, Bochum

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2018 AN WALTER STEURER

IN ANERKENNUNG SEINES WISSENSCHAFTLICHEN LEBENSWERKES, INSBESONDERE FÜR SEINE GRUNDLEGENDEN ARBEITEN ÜBER APERIODISCHE STRUKTUREN, ORDNUNGS-FEHLORDNUNGSPHÄNOMENE SOWIE DIE HÖHERDIMENSIONALE KRISTALLOGRAPHIE

Sehr geehrte Damen und Herren,
Lieber Walter,

heute wird die Carl-Herrmann-Medaille der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie an Herrn Professor Walter Steurer vergeben. Es ist mir eine Ehre, vorher etwas zum wissenschaftlichen Werdegang von Walter Steurer sagen zu dürfen.

Professor Steurer ist vielleicht am meisten für seine wissenschaftlichen Arbeiten an Quasikristallen bekannt. Darüber werde ich gleich mehr sagen. Ich möchte aber beim Anfang anfangen, und das wissenschaftliche Leben von Walter Steurer hat natürlich bereits vor der Entdeckung der Quasikristalle durch Shechtman angefangen.

Walter Steurer wurde 1950 in Wien geboren, hat dort von 1970 bis 1975 Chemie studiert und hat 1979 am Institut für physikalische Chemie bei Hans Nowotny über ein Thema zu Übergangsmetall-Boriden promoviert.

Von 1980 bis 1992 war Walter Steurer wissenschaftlicher Assistent und später Privatdozent am Institut für Kristallographie der LMU München, wo er sich 1987 habilitierte.

In München hat sich Walter Steurer zum ersten Mal mit aperiodischen Kristallen befasst: Er hat die inkommensurabel modulierte Kristallstruktur einer Salicylaldiminato-Nickel-Verbindung bestimmt. Dazu hat Walter Steurer die damals neue Superraummethode von De Wolff, Janner und Janssen (1974, 1976, 1981) verwendet, womit für eine nicht-periodische Struktur Translationssymmetrie im 4-dimensionalen Raum hergestellt werden kann. Strukturanalyse modulierter Kristalle war 1980 nicht existent. Es gab noch keine Software JANA und Walter Steurer hat damals selbst ein Computerprogramm für die Strukturverfeinerung schreiben müssen. Ein besonders wichtiger Beitrag zur Kristallographie aperiodischer Kristalle ist die Deutung der Patterson Funktion im 4-dimensionalen Raum und deren Anwendung zur Strukturbestimmung des inkommensurabel modulierten Minerals Plagioklas. Diese Pionierarbeiten haben bis heute ihre Wirkung. Patterson-Methoden wurden später auf Quasikristalle angewandt und wurden von Petricek in sein Computerprogram JANA für modulierte Kristalle aufgenommen. Forschung an aperiodischen Mineralien einschließlich Plagioklasen ist bis heute aktuell.

Es war in dieser Zeit, dass ich Walter Steurer persönlich kennengelernt habe, als er auf Einladung von Jan L. de Boer an der Universität Groningen einen Vortrag über 4-dimensionale Kristallographie gegeben hat.

Quasikristalle wurden 1982 in einer Aluminium-Mangan-Legierung von Shechtman entdeckt. Quasikristalle zeichnen sich durch das Vorhandensein einer nicht-kristallographischen Drehsymmetrie aus. Zum Beispiel besitzen die von Shechtman entdeckten ikosaedrischen Quasikristalle Punktsymmetrie des Ikosaeders, das heißt, sie besitzen fünfzählige Drehachsen in sechs verschiedenen Richtungen. Folgerichtig können Quasikristalle keine Translations-symmetrie besitzen und tun dies auch nicht.

Walter Steurer hat sich schon sehr früh nach der Entdeckung durch Shechtman mit der atomaren Struktur von Quasikristallen befasst. Er hat sich dabei die dekagonalen Quasi-kristalle vorgenommen, welche eine zehn-zählige Drehsymmetrie aufweisen. In einer Reihe von Veröffentlichungen hat er die Einkristallröntgenbeugung (August 1989), eine 5-dimensionale Patterson-Analyse im Superraum (Dezember 1989) und eine Struktur-verfeinerung des 5-dimensionalen Strukturmodells (September 1990) publiziert und war damit der Erste, der ein Strukturmodell eines dekagonalen Quasikristalls vorstellen konnte.

Anfang der 1990er Jahre gab es große Änderungen im Leben von Walter Steurer. Zunächst wurde er 1992 C3-Professor für Kristallographie in Hannover, um bereits 1993 einen Lehrstuhl für Kristallographie an der ETH Zürich zu übernehmen. Dort ist er bis zu seiner Emeritierung im Januar 2016 geblieben.

In Zürich hat Walter Steurer seine Forschung an Quasikristallen weitergeführt. Er hat die Kristallstrukturen verschiedener dekagonaler Quasikristalle bestimmt. In einer viel zitierten Publikation aus dem Jahr 1993 zur Struktur von dekagonalem Al-Ni-Co (Steurer *et al.*, 1993) hat er zum ersten Mal die Idee vorgestellt, dass dekagonale Quasikristalle nicht aus einer periodischen Stapelung quasikristalliner Schichten, sondern als eine quasiperiodische Bündelung von eindimensional-periodischen Kolonnen bestehen. Diese Auffassung ist zu einem wichtigen Bestandteil des Verständnisses von Quasikristallen geworden. Steurer hat weitere neue Aspekte eingeführt, wie Überstrukturen im Superraum und die Beschreibung chemischer Ordnung und Fehlordnung von Quasikristallen.

Walter Steurer hat sein Arbeitsgebiet in Zürich in verschiedene neue Richtungen erweitert. Die meisten Quasikristalle sind Legierungen. Walter Steurer hat sich somit mit quasikristallnahen Legierungen, sogenannten Approximant-Phasen, beschäftigt. Er hat temperaturabhängige diffuse Streuung quantitativ analysiert und Quasikristall-Approximant-Phasenumwandlungen studiert.

Approximanten haben oft eine große Elementarzelle. In einer Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Harbrecht in Marburg, hat er 2009 eine Aluminium-Kupfer-Tantal Legierung mit einer periodischen Kristallstruktur, mit der bis heute größten Elementarzelle einer intermetallischen Verbindung von 360.000 Kubik-Ångstrom vorgestellt. Tatsächlich hat Steurer die Struktur durch hierarchisch angeordnete atomare Cluster beschreiben können. Mit diesem Prinzip lassen sich neue Verbindungen mit beliebig großen Zellen vorhersagen.

Vor kurzem hat sich Walter Steurer dem genau Entgegengesetzen zugewandt und sogenannte *High-Entropy*-Legierungen untersucht. *High-Entropy*-Legierungen haben die kleinstmögliche kubische Elementarzelle, welche ungeordnet mit mindestens vier chemischen Elementen gefüllt ist. In wenigen, aber viel beachteten Arbeiten hat Walter Steurer seit 2014 neue *High-Entropy*-Legierungen vorgestellt, welche entweder besonders hart sind oder aber supraleitend werden.

Ein weiteres Forschungthema, welches seit 2005 mit großem Erfolg von Walter Steurer verfolgt worden ist, sind photonische und phononische Quasikristalle (Steurer & Sutter-Widmer, 2007).

Walter Steurer hat zwei Bücher zur wissenschaftlichen Literatur beigetragen. Zusammen mit Sofia Deloudi hat er ein Buch über die Kristallographie von Quasikristallen geschrieben, das im Jahr 2009 beim Springer-Verlag publiziert worden ist. Zusammen mit Julia Dshemuchadse hat er 2016 ein Buch über die Strukturen und Eigenschaften von intermetallischen Phasen bei Oxford University Press publiziert.

Gerade für Walter Steurer ist die genaue Bezeichnung „Wissenschaftliche Literatur“ sehr wichtig, da neben der Wissenschaft, Literatur seine große Leidenschaft ist: Er liest mehrere Bücher pro Woche.

Für seine bahnbrechende Forschung an Quasikristallen hat Walter Steurer im Jahr 2008 den „Jean Marie Dubois Award“ erhalten.

Walter Steurer hat sich vielfältig in die wissenschaftliche Gemeinschaft eingebracht. Er hat die zehnte „International Conference on Quasicrystals (ICQ10)“ organisiert. Und er war viele Jahre Herausgeber der Zeitschrift für Kristallographie. In dieser Funktion hat er zum 125. Jubiläum der Zeitschrift für Kristallographie im Jahr 2002 ein Sondernummer zur Frage „Was ist ein Kristall / was ist Kristallographie?“ angeregt und von 125 Wissenschaftlern dazu jeweils eine einseitige Stellungname publizieren können.

Er hat zu unterschiedlichen Themen aus der Kristallographie, Beiträge zu Standardwerken verfasst, wie zum Beispiel für die „International Tables for Crystallography“.

Die bisher letzte Veröffentlichung von Walter Steurer ist im Januar 2018 in *Acta Crystallographica A* erschienen. Darin kehrt er zum Thema Quasikristalle zurück und gibt eine kritische Diskussion der offenen Fragen im Gebiet der Quasikristalle.

Es freut mich, dass sich die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie entschieden hat, die Carl-Hermann-Medaille 2018 an Professor Walter Steurer zu vergeben, und ich bedanke mich bei Ihnen für Ihre Aufmerksamkeit.

Ausgewählte Publikationen von Walter Steurer

W. Steurer (1987): (3+1)-Dimensional Patterson and Fourier methods for the determination of one-dimensionally modulated structures. Acta Crystallogr. A **43**, 36–42.

W. Steurer & J. Mayer (1989): Single-crystal X-ray study of the decagonal phase of the system Al–Mn. Acta Crystallogr. B **45**, 355–359.

W. Steurer (1989): 5-dimensional Patterson analysis of the decagonal phase of the system Al–Mn. Acta Crystallogr. B **45**, 534–542.

W. Steurer & K. H. Kuo (1990): 5-dimensional structure refinement of decagonal $Al_{65}Cu_{20}Co_{15}$. Phil. Mag. Lett. **62**, 175–182.

W. Steurer & K. H. Kuo (1990): 5-dimensional structure-analysis of decagonal $Al_{65}Cu_{20}Co_{15}$. Acta Crystallogr. B **46**, 703–712.

W. Steurer, T. Haibach, B. Zhang, S. Kek & R. Lück (2013): The structure of decagonal $Al_{70}Ni_{15}Co_{15}$. Acta Crystallogr. B **49**, 661–675.

W. Steurer & D. Sutter-Widmer (2007): Photonic and phononic quasicrystals. J. Phys. D **40**, R229–R247.

T. Weber, J. Dshemuchadse, M. Kobas, M. Conrad, B. Harbrecht & W. Steurer (2009): Large, larger, largest – a family of cluster-based tantalum copper aluminides with giant unit cells. I. Structure solution and refinement. Acta Crystallogr. B **65**, 308–317.

W. Steurer (2018): Quasicrystals: What do we know? What do we want to know? What can we know? Acta Crystallogr. A **74**, 1–11.

W. Steurer & S. Deloudi (2009): Crystallography of Quasicrystals: Concepts, Methods and Structures. (Springer Series in Materials Science, Band 126).

W. Steurer & J. Dshemuchadze (2016): Intermetallics: Structures, Properties, Statistics. (IUCr monographs on crystallography, No. 26; Oxford University Press, 2016).

Sander van Smaalen, Bayreuth

OTTO JARCHOW

26.04.1931 – 29.07.2018

Der Kristallograph Prof. Dr. Otto Jarchow, am 26.04.1931 in Lübz, Mecklenburg, geboren, begann 1951 sein Studium der Geologie/Mineralogie in Greifswald und wechselte zwei Jahre später zu Prof. Kleber an die Universität Berlin. Nach dem Diplom im Fach Mineralogie ging Otto Jarchow an die Deutsche Akademie der Wissenschaften und arbeitete mit Frau Boll-Dornberger am Institut für Strukturforschung über Fehlordnung, Polytypie und Untergruppenbeziehungen – Themen, die in den Materialwissenschaften weiterhin an Aktualität gewinnen. Seine Promotion erfolgte 1961 in Saarbrücken.

Nach der Heirat wurden 1958 und 1959 seine zwei Töchter geboren. In seiner Dissertation bestimmte O. Jarchow die fehlgeordnete Struktur von Dinatrium-dihydrogen-tetrametaphosphat mittels „direkter Methoden“. Bis 1963 war er als Assistent bei Prof. Saalfeld in Saarbrücken tätig, den er 1964 an die Universität Hamburg begleitete. Am Mineralogisch-Petrographischen Institut der Universität Hamburg forschte er über fehlgeordnete Cancrinite und erhielt für seine Arbeit 1967 den Rose-Preis. Den Ruf auf eine Professur an die Universität Lausanne lehnte er 1968 ab. Otto Jarchow habilitierte sich 1969 in Hamburg mit der Arbeit über die „Geometrische Deutung fehlgeordneter polytyper Kristalle und die praktische Anwendung bei der Strukturbestimmung von $K_4N_2(CN)_6$“ und wurde 1971 zum Professor ernannt. 1978-79 vertrat O. Jarchow den Kristallographie-Lehrstuhl in Kiel für Prof. Liebau.

Neben Untersuchungen an zahlreichen Feldspatvertretern und deren Symmetriebeziehungen von Deformationsstrukturen waren die Seltenerd-Verbindungen sowie pflanzliche Allergene und hautreizende Umwelt- und Berufsstoffe zentrale Forschungsthemen. In Kooperation mit Prof. Hausen, Hautklinik-UKE, isolierte und klärte O. Jarchow die Struktur des wichtigsten Primel-Allergens Primetin. Spätere Forschungsarbeiten betrafen organische und metallorganische Verbindungen sowie Kompositkristalle, deren Strukturen mit höherdimensionalen

Modellansätzen gelöst wurden. Jarchows Forschung führte zu intensiven internationalen Kooperationen insbesondere mit dem japanischen Kollegen Dr. K. Kato vom *National Institute for Research in Inorganic Materials I-1 Namiki, Tsukuba Ibaraki* und zu zahlreichen Einladungen zur gemeinsamen Arbeit nach Japan.

Sowohl sein Lehrangebot als auch seine menschlichen Qualitäten machten Otto Jarchow zu einem gefragten Hochschullehrer bei seinen Kolleginnen und Kollegen und den Studierenden. Am 29.07.2018 verstarb unser Kollege Jarchow im Alter von 87 Jahren.

Ulrich Bismayer, Hamburg

Ankündigungen

SAVE THE DATE

27th ANNUAL MEETING
of the GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY (DGK)

25–28 MARCH 2019
LEIPZIG

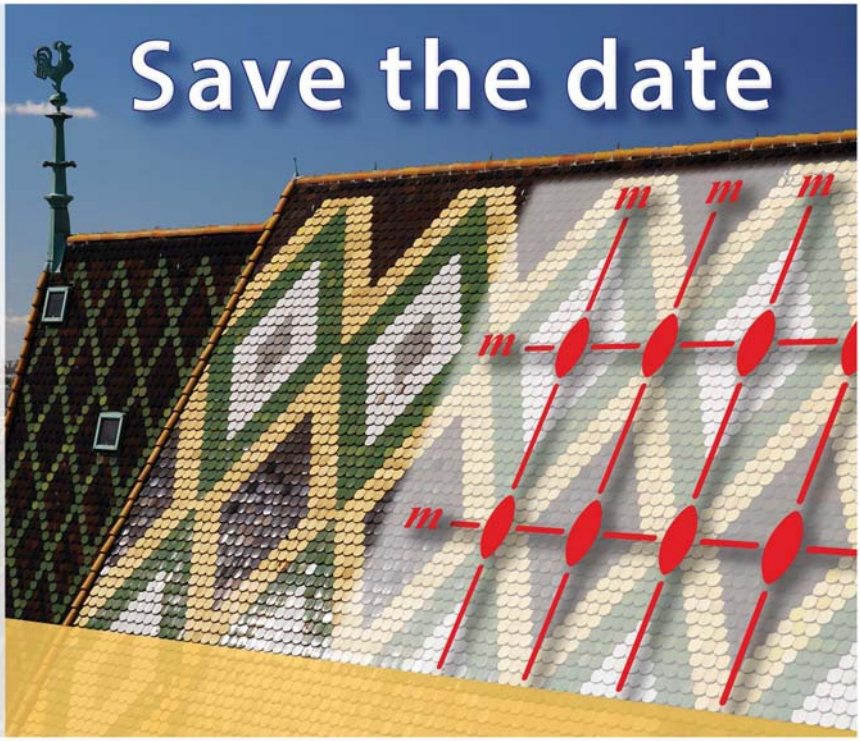
www.dgk-conference.de

UNIVERSITÄT LEIPZIG

32nd European Crystallographic Meeting
18. – 23. 08. 2019

ECM 32
VIENNA AUSTRIA 2019

Save the date



ECM 32
VIENNA AUSTRIA 2019

Looking forward to welcoming you at Vienna in August 2019 !

Kristina Djinovic-Carugo
Klaudia Hradil
Ronald Miletich

On behalf of the Organising Committee

universität wien

TU WIEN TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN Vienna | Austria

♦ 32nd European Crystallographic Meeting ♦ www.ecm2019.org ♦

BY AIR MAIL
par avion
Royal Mail

European Crystallographic Association

To

All Crystallographers
Considering to Participate in

ECM 32

18. – 23. 08. 2019, Vienna (Austria)

SNI Satellite Workshop Announcement, Sept. 19th – 20th 2018

Get the Best of All: Structure Research by Merging the Peculiarities of Synchrotron, Neutron, Electron and Ion Radiation

Nowadays challenges in physics, chemistry, biology and material sciences often require crystallographic/structural studies that combine smartly various scattering methods using complementary synchrotron, neutron and ion radiation.

The workshop consists of two parts: in the first part, the peculiarities of the different kinds of radiation and their generation will be discussed including an overview of the corresponding large scale facilities and the kind of methods they offer for structure analysis. In the second part, focusing on applications, experienced scientists will give an insight into the unique information they gain by merging the complementary methods.

The following topics are planned:

- quantum phenomena / correlated systems (magnetism and superconductivity)
- macromolecular and biological studies (life sciences)
- functional materials for energy research
- etc.

The workshop will take place from Sept. 19th 2018 afternoon (16:00 h) to Sept. 20th 2018 until lunchtime (13:00 h) on the TUM Forschungszentrum site in Garching. In addition, an optional guided tour through the Heinz-Maier-Leibnitz research reactor FRM II in the afternoon of Sept. 20th is planned at 15:00 h. Please note that participation in the guided tour requires a registration until August 31st at the latest. A registration to the SNI conference is not required. Further details can be found on the following homepage where you also will find the link to the registration: *https://wiki.mlz-garching.de/dgk-ak7:index*.

The event is organized by the working group “Neutron Scattering” of the German Crystallographic Society (DGK) with kind support by the KFN, MLZ and SNI.

seit 1997

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 ...

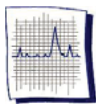
Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor
Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

Seminar „Röntgendiffraktometrie für die Praxis“ / 2x im Jahr (TAW)
sowie **problembezogene Seminare in Ihrem Haus !**

Ansprechpartner und Vertrieb des Rietveld- Programms

SiroQuant V4.0 (Sietronics Pty Ltd., Canberra, Australien)



Das Werkzeug zur quantitativen Phasenanalyse im Labor.
Bestimmung des amorphen Anteils u.a.
Alle Datenformate.
Si- Phase
Einbindung von CIF- Files oder eigenen Strukturdaten

Initiierung und Teilnahme an Round Robin bzw. Laborvergleichen

Handbuch: M. Ermrich / D. Opper
„XRD for the analyst” (ISBN 978-90-809086-0-4)
„Einführung in die Röntgenbeugungsanalyse“

Das „Röntgenlabor Dr. Ermrich“ ist akkreditiert nach DIN EN ISO/IEC 17025 für die Röntgenbeugung.

MAX VON LAUE-PREIS 2019

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

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

Wir benötigen eine Stellungnahme des Vorschlagenden sowie ausreichende Informationen zur Beurteilung der Kandidatin/des Kandidaten (Lebenslauf, Publikationsverzeichnis, Kopien ausgewählter Arbeiten). Bitte schicken Sie die Unterlagen per E-Mail mit dem Betreff „Laue-Preis“ entweder an die Vorsitzende des Preiskomitees:

Dr. habil. Alexandra Friedrich
Julius-Maximilians-Universität Würzburg
Institut für Anorganische Chemie
E-Mail: *alexandra.friedrich1@uni-wuerzburg.de*

oder an den Vorsitzenden der DGK:

Prof. Dr. Ralf Ficner
Georg-August-Universität Göttingen
Abteilung Molekulare Strukturbiologie
E-Mail: *rficner@gwdg.de*

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen der 27. DGK-Jahrestagung 2019 in Leipzig statt.

Einsendeschluss: **30. November 2018**

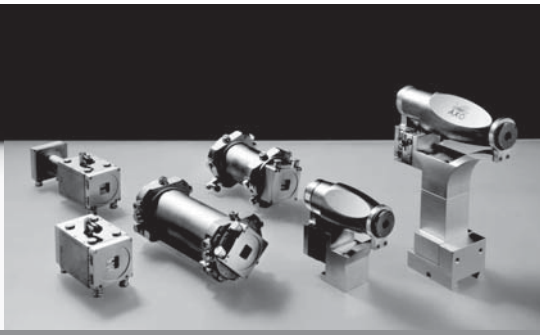
Vielen Dank!

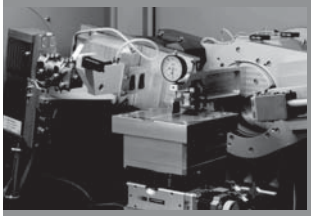
Alexandra Friedrich, Würzburg

APPLIED X-RAY OPTICS

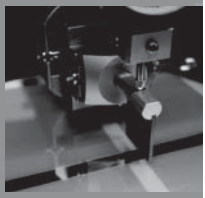
AXO

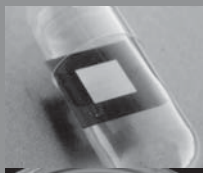
Multilayer X-ray Optics
High Precision Deposition

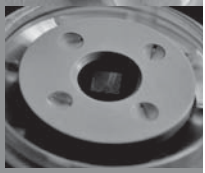


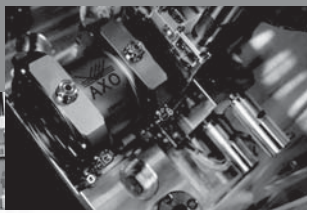


- One- and two-dimensional focusing and parallel beam multilayer X-ray optics for X-ray reflectometry, high resolution and single crystal diffraction
- Up-grade of all common X-ray systems
- Multilayer synchrotron optics from EUV to the hard X-ray region up to a substrate length of 1000 mm
- Tailored micro-focus X-ray source systems with adapted 1D or 2D optics
- Sub-nanometer precision large area deposition
- Thin film multi-element reference samples for XRF









AXO DRESDEN GmbH
APPLIED X-RAY OPTICS
MULTILAYER X-RAY OPTICS
HIGH PRECISION DEPOSITION
MORE THAN 20 YEARS EXPERIENCE IN X-RAY OPTICS AND HIGH PRECISION DEPOSITION

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

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2019

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht auch im kommenden Jahr wieder die **Will-Kleber-Gedenkmünze**, mit der hervorragende wissenschaftliche Beiträge auf ausgewählten Gebieten der Kristallographie ausgezeichnet werden.

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2018** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

Dr. Julia Dshemuchadse

University of Michigan, Ann Arbor
Department of Chemical Engineering
Biointerfaces Institute
Ann Arbor, MI, USA

E-Mail: *djulia@umich.edu*

Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze:

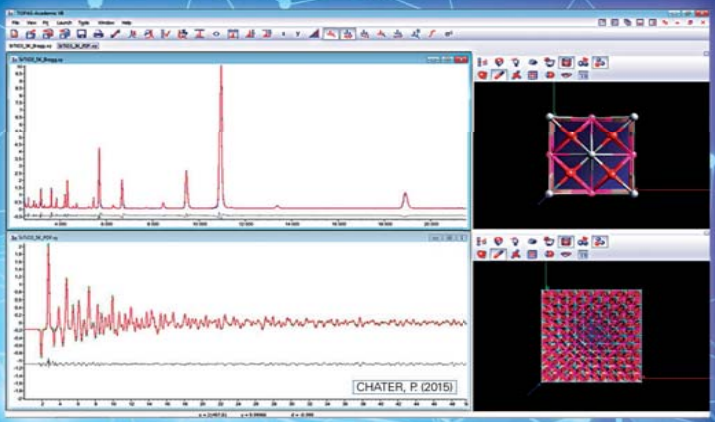
- Dr. Julia Dshemuchadse – University of Michigan, Ann Arbor
- Prof. Dr. Guntram Jordan – Ludwig-Maximilians-Universität München
- Prof. Dr. Thomas Schleid – Universität Stuttgart
- Dr. Leonore Wiehl – Technische Universität Darmstadt
- *Vorsitzender der DGK (ex officio):* Prof. Dr. Ralf Ficner – Georg-August-Universität Göttingen

Bisherige Preisträger:

- 2018 Hermann Gies
- 2017 Peter Gille
- 2016 Sander van Smaalen
- 2015 Reinhard Neder
- 2014 Bernd Müller
- 2013 Helmut Klapper
- 2012 Helmuth Zimmermann
- 2010 Hans Boysen und Friedrich Frey
- 2009 Rudolf Allmann
- 2008 Joachim Bohm

TOPAS V6

(Joint) Bragg and PDF Refinements at Lightning Speed



All relevant TOPAS functionalities for Bragg refinements are available for PDF refinements as well, e.g.

- Multiple datasets
  - Joint PDF / Bragg refinements
  - Joint X-ray and neutron data refinements
  - Joint single crystal and powder data refinements
- Structure refinement and determination
  - Simulated annealing
  - Constraints, restraints, penalties, e.g.
    - (Semi)Rigid body modeling
    - Distortion mode refinements
  - Small and big box modelling
  - Shape refinements
  - Instrument resolution functions

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL-HERMANN-MEDAILLE 2019

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht auch im kommenden Jahr wieder die **Carl-Hermann-Medaille** für das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten.

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2018** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

PD Dr. Claudia Weidenthaler

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Kaiser-Wilhelm-Platz 1
45470 Mülheim an der Ruhr

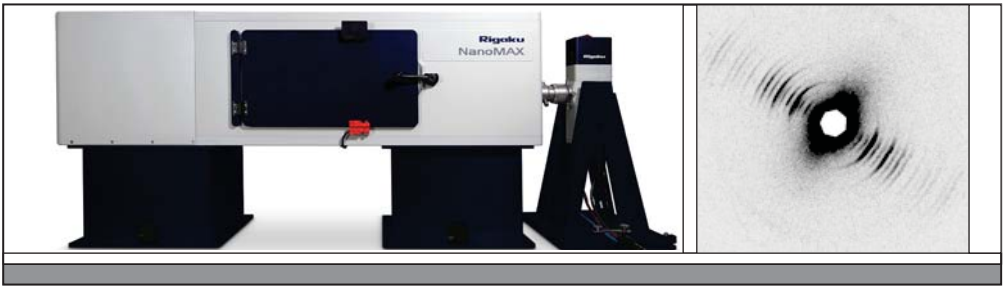
E-Mail: *weidenthaler@mpi-muelheim.mpg.de*

Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille:

- PD Dr. Claudia Weidenthaler – MPI für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr
- PD Dr. Karen Friese – Forschungszentrum Jülich
- Prof. Dr. Udo Heinemann – MDC Berlin
- Prof. Dr. Robert Dinnebier – MPI für Festkörperforschung, Stuttgart
- *Vorsitzender der DGK (ex officio):* Prof. Dr. Ralf Ficner – Georg-August-Universität Göttingen

NanoMAX™

Rigaku Innovative Technologies
NanoMAX™ Small Angle X-ray Scattering (SAXS) System



Rigaku Introduces The New NanoMAX™ Compact SAXS System

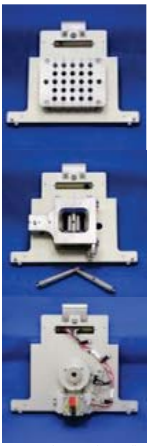
The NanoMAX™ Small Angle X-ray Scattering (SAXS) instrument features include:

A patented two dimensional Kratky block camera
- 2D Kratky beam focus at the detector therefore **desmearing is no longer needed**

Improved **compact design** system **about 1 m long**
- Q-range 0.003 $Å^{-1}$ < **q** < 3.6 $Å^{-1}$ adapt by changing detector sample distance
- High flux, about 1 order of magnitude higher flux than 3 **m** long pinhole SAXS
- Easy **q**-min/flux adjustment by changing the Kratky angle (motorized)

Featuring the Rigaku **HyPix-3000 detector**
- Beam profile matched to detector's 100 µm pixel resolution
- Wide dynamic range

Designed to use **any** of **Rigaku's X-ray Source**s
- Rigaku FR-E™ rotating anode generator
- Rigaku MicroMax 007 rotating generator
- Rigaku MicroMax 003F sealed tube micro-focus generator



From top to bottom: Flat, Capillary and Rotational Stages

Special sample **holders** for **liquids and solutions**
- Small sample volumes (down to 30 pl) can be handled
- New sample holder for anisotropic scatters, no missing information due to sample rotation and data stitching
- New SAXSLab software for remote alignment and data collection

NanoMAX™ SAXS Instrument

Rigaku Innovative Technologies

Dr. Paul Pennartz, European Channel Manager
Phone: +49 (0) 2403 15051, Email: paul.pennartz@rigaku.com
www.RigakuOptics.com/optics@Rigaku.com

Rigaku

Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie

Der Preis der „Stiftung des Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie“ soll dazu beitragen, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen.

Es werden Arbeiten ausgezeichnet, in denen entweder Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie auf Probleme einer anderen Wissenschaft (Partnerwissenschaft) oder Methoden und Betrachtungsweisen einer Partnerwissenschaft auf Probleme der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden.

Der Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie ist mit 2000 € dotiert. Er wird auf dem Ehrenabend der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie überreicht.

Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder der DGK sowie Mitglieder von Partnergesellschaften. Eigenbewerbungen von Preiskandidaten sind ebenfalls zulässig.

Vorschläge mit kurzer Begründung werden bis Freitag, den 30. November 2018, erbeten und sind per E-Mail bei dem Vorsitzenden der Preiskommission (Prof. Dr. Wulf Depmeier, Universität Kiel, *wulf.depmeier@ifg.uni-kiel.de*) einzureichen.

Aufgrund der andauernden Niedrigzinsphase konnte dieser Preis nach der Erstvergabe 2010 jahrelang nicht verliehen werden. Dass dies jetzt zur Jahrestagung 2019 wieder möglich ist, ist der großzügigen Spendenbereitschaft der Mitglieder der DGK gedankt.

Wulf Depmeier, Kiel

Tagungen und Termine

September 2018

29.08. – 02.09.2018 **AIC International Crystallography School 2018**
in Bari (Italien)

www.cristallografia.org/aicschool2018

27.08. – 01.09.2018 **BCA/CCP4 Summer School in Protein Crystallography**
an der Diamond Light Source (Großbritannien)

www.diamond.ac.uk/Home/Events/2018/BCA-Summer-School.html

02.09. – 10.09.2018 **EMBO practical course: Methods of cryo-EM and 3D image processing 2018**
in Heidelberg

www.embl.de/training/events/2018/CRY18-01

02.09. – 07.09.2018 **Indaba9: Modeling of Structures and Properties**
in Skukusa, Krüger-Nationalpark (Südafrika)

www.regonline.com/builder/site/Default.aspx?EventID=1991800

02.09. – 07.09.2018 **MATRAC 1 School: Application of Neutrons and Synchrotron Radiation in Materials Science**
in Lauenburg und Hamburg

www.hzg.de/ms/summerschool

02.09. – 06.09.2018 **SMARTER 6**
in Ljubljana (Slowenien)

https://smarter6.ki.si

02.09. – 06.09.2018 **XXIV Conference on Applied Crystallography**
in den Bieszczady Mountains nahe Przemysl (Polen)

www.cac.us.edu.pl

03.09. – 14.09.2018 **22nd Laboratory Course Neutron Scattering**
in Jülich und Garching

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

03.09. – 06.09.2018 **Photon 2018**
in Aston University, Birmingham (Großbritannien)

www.photon.org.uk/516760

03.09. – 07.09.2018 **Synchrotron Radiation and Neutrons in Art and Archaeology**
in Portmouth (Großbritannien)

www.diamond.ac.uk/Conference/SR2A-2018.html

03.09. – 07.09.2018 **XTOP2018. XIV Biennial Conference of High Resolution X-ray Diffraction and Imaging**
in Bari (Italien)

www.ba.ic.cnr.it/xtop2018

09.09.2018 **9th European Silicon Days**
in Saarbrücken/Homburg

www.9esd.com

09.09. – 14.09.2018 **19th International Microscopy Congress. IMC19**
in Sydney (Australien)

http://imc19.com

09.09. – 13.09.2018 **29th Annual Meeting of the European Society for Biomaterials (ESB2018)**
in Maastricht (Niederlande)

www.esb2018maastricht.org

10.09. – 21.09.2018 **2nd Nordic/Baltic Summer School in Neutron Scattering**
in Tartu (Estland)

https://indico.nbi.ku.dk/event/1097

10.09. – 11.09.2018 **Scottish Centre for Macromolecular Imaging – Symposium and opening**
in Glasgow (Großbritannien)

www.facebook.com/SCMICryoEM

12.09. – 14.09.2018 **3rd Meeting of the "Young Crystallographers" / „Junge Kristallograpen"**
in Aachen

http://dgk-home.de/aks/jkyc/aachen-2018

13.09. – 14.09.2018 **10th International Workshop on Radiation Damage to Biological Samples**
in Brookhaven (USA)

www.bnl.gov/rd10

13.09. – 14.09.2018 **7th French-German Workshop on Oxide, Dielectric, and Laser Crystals**
in Idar-Oberstein

schwung@fee-io.de

13.09. – 16.09.2018 **ESCG2 Second European School on Crystal Growth**
in Varna (Bulgarien)

http://escg2.eu

16.09. – 19.09.2018 **8th Conference on Electron Tomography**
in Les Diablerets (Schweiz)

www.colorado.edu/symposium/etm2018

16.09. – 20.09.2018 **ECCG6 Sixth European Conference on Crystal Growth**
in Varna (Bulgarien)

http://eccg6.eu

16.09. – 19.09.2018 **Neutrons and Biology**
in Carqueiranne (Frankreich)

https://sites.google.com/view/bioneutrons2018

16.09. – 21.09.2018 **XXII International Conference on Organic Synthesis (22-ISOC)**
in Florenz (Italien)

www.22-icos-florence.it

16.09. – 21.09.2018 **SSC2018. 13th International Conference on Solid State Chemistry**
in Pardubice (Tschechische Republik)

www.ssc-conference.com/2018

16.09. – 21.09.2018 **Synchrotron Radiation School (SR school 2018)**
in Oxford und an der Diamond Light Source (Großbritannien)

www.diamond.ac.uk/Home/Events/2018/SR-Summer-School.html

17.09. – 19.09.2018 **SNI2018: German Conference for Research with Synchrotron Radiation, Neutrons and Ion Beams at Large Facilities**
in Garching

https://indico.frm2.tum.de/event/92

17.09. – 21.09.2018 **10. Intensivkurs: „Grundlagen der Einkristallstruktur-bestimmung“**
im Kloster Hardehausen bei Warburg/Westfahlen

http://dgk-home.de/wp-content/uploads/2018/03/hardehausen2018.pdf

19.09. – 20.09.2018 **“Get the best of all”: Structure research by merging the peculiarities of synchrotron, neutron, electron and ion radiation**
in Garching

https://indico.frm2.tum.de/event/114

19.09. – 30.09.2018 **Travelling Seminar 2018 "Nanomaterials and Large Scale Research Centers"**
in München und Wien (Österreich) und Loeben (Österreich) und Trieste (Italien)

www.mesostructures.uni-bayreuth.de/en/travelling-seminar/2018

20.09. – 22.09.2018 **HEC 21. 21st Heart of Europe Bio-Crystallography Meeting**
in Quedlinburg

http://hec21.uni-halle.de

22.09. – 25.09.2018 **SEG2018. Metals, Minerals and Society**
in Keystone, Colorado (USA)

www.seg2018.org

23.09. – 27.09.2018 **Hot Topics in Contemporary Crystallography – HTCC**
in Bol, Insel Brac (Kroatien)

http://htcc2018.org

24.09. – 26.09.2018 **Electrochemistry 2018**
in Ulm

www.gdch.de/electrochemistry2018

24.09. – 26.09.2018 **30th MAX IV Laboratory User Meeting: Coherent visions**
in Lund (Schweden)

www.maxiv.lu.se/users/user-meetings/um2018

24.09. – 27.09.2018 **Biennial Meeting of the GDCh-Division of Macromolecular Chemistry**
in Karlsruhe

www.gdch.de/makro2018

24.09. – 27.09.2018 **19. Vortragstagung für Anorganische Chemie der FG Wöhler-Vereinigung und Festkörperchemie und Materialforschung**
in Regensburg

www.2018woehler-fk.de

24.09. – 28.09.2018 **ICDD Rietveld Refinement & Indexing Workshop**
in Newtown Square, Pennsylvania (USA)

www.icdd.com/education/rietveld-workshop.htm

24.09. – 28.09.2018 **MDANSE: Molecular Dynamics and Lattice Dynamics to Analyse Neutron Scattering Experiments**
in Puerto de la Cruz, Teneriffa (Spanien)

www.isis.stfc.ac.uk/Pages/MDANSE-2018.aspx

25.09.2018 **Serial Crystallography Workshop**
in Lund (Schweden)

www.maxiv.lu.se/users/user-meetings/um2018/um2018-overview-and-scope/user-meeting-2018-serial-crystallography/

26.09. – 29.09.2018 **7th Murnau Conference on Structural Biology**
in Murnau

www.murnauconference.de

26.09. – 29.09.2018 **Materials & Technologies for Energy Conversion and Storage (M-TECS2018)**
in Mumbai (Indien)

www.mtecs.co

27.09. – 09.10.2018 **The 8th Brazil School for Single Particle Cryo-EM**
in Mairipora (Brasilien)

www.brazil-school.org/2018

30.09. – 02.10.2018 **2. Jahrestagung der Fachgruppe Chemie und Energie**
in Mülheim (Ruhr)

www.gdch.de/energie2018

Oktober 2018

03.10. – 05.10.2018 **VII-th National Crystallographic Symposium NCS2018**
in Sofia (Bulgarien)

www.bgcryst.com/symp18

05.10. – 07.10.2018 **9th International Conference of the Hellenic Crystallographic Association**
in Traverse City, Michigan (USA)

http://sas2018.aps.anl.gov

07.10. – 10.10.2018 **2nd International Protein Engineering Symposium Aachen (AcES)**
in Aachen

www.aces-symposium.rwth-aachen.de

08.10. – 09.10.2018 **1st Annual CryoNet Symposium**
in Kopenhagen (Dänemark)

www.cpr.ku.dk/calendar/2018/1st-annual-cryonet-symposium/

08.10. – 14.10.2018 **ASMOSIA XII - Association for the Study of Marble & Other Stones in Antiquity XII**
in Izmir (Türkei)

http://asmosia2018.com

10.10. – 12.10.2018 **LACA3: III Meeting of the Latin American Crystallographic Association**
in Valparaíso (Chile)

https://cristalografia.cl/3rdlacameeting

10.10. – 12.10.2018 **Rencontre nationale 2018 du Réseau CRISTECH**
in Porquerolles (Frankreich)

http://cristech.cnrs.fr/spip.php?rubrique72

16.10. – 19.10.2018 **Neutrons and Food 5**
in Sydney (Australien)

www.ansto.gov.au/Events/Neutronsandfoodconference2018

21.10. – 24.10.2018 **International Workshop on Modeling in Crystal Growth (IWMCG-9)**
in Keauhou Bay, Hawaii (USA)

https://iwmcg-9.cems.umn.edu

25.10. – 26.10.2018 **Zeit-, temperatur- und ortsaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie (XIII)**
in Pfinztal

www.ict.fraunhofer.de/de/veranstaltungen_messen/veranstaltungen/roentgenworkshop.html

29.10. – 01.11.2018 **JCNS Workshop 2018**
in Tutzing

www.fz-juelich.de/jcns/JCNS-Workshop2018

November 2018

12.11. – 16.11.2018 **10th AONSA Neutron School**
in ANSTO, Sydney (Australien)

https://events01.synchrotron.org.au/event/79

13.11. – 14.11.2018 **BCA-Industrial Group Autumn meeting**
in Durham (Großbritannien)

bca@hg3.co.uk

14.11. – 16.11.2018 **Third Bunsen Colloquium on Solid-State Batteries**
in Frankfurt/Main

www.gdch.de/ssb2018

19.11. – 26.11.2018 **Solution Scattering from Biological Macromolecules**
in Hamburg

http://meetings.embo.org/event/18-sas

21.11. – 22.11.2018 **8th NRW Nano Conference**
in Dortmund

http://nanoconference.de

Dezember 2018

02.12. – 05.12.2018 **AsCA 2018/Crystal32: 15th Conference of the Asian Crystallographic Association and 32nd Conference of the Society of Crystallographers in Australia and New Zealand (SCANZ)**
in Auckland (Neuseeland)

http://asca2018.org

Überblick 2019

28.01. – 01.02.2019 **2nd Pan African Conference on Crystallography (PCCr-2)**
in Accra (Ghana)

www.pccrafrica.org

März 2019 **HERCULES European School 2019**
in Grenoble (Frankreich)

http://hercules-school.eu

03.03. – 05.03.2019 **15. Koordinationschemie-Treffen**
in München

www.cup.lmu.de/ac/daumann/kct2019

11.03. – 22.03.2019 **50th IFF Spring School 2019: "Scattering! Soft, Functional and Quantum Materials"**
in Jülich

www.iff-springschool.de

25.03. – 28.03.2019 **27th Annual Meeting of the German Crystallographic Society (DGK) 2019**
in Leipzig

www.dgk-conference.de

31.03. – 05.04.2019 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie**
in Regensburg

www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen

16.06. – 27.06.2019 **The Zurich School of Crystallography 2019: Bring Your Own Crystals**
in Zürich (Schweiz)

www.chem.uzh.ch/linden/zsc

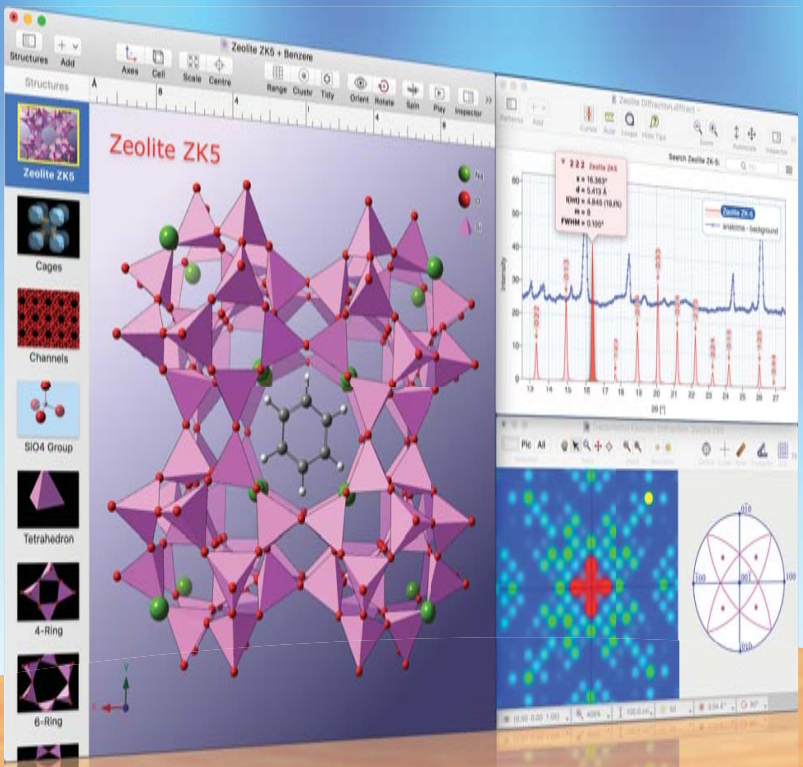
Juli 2019	**DESY Summer Students** in Hamburg *https://summerstudents.desy.de*
21.07. – 27.07.2019	**The 17th International Summer School on Crystal Growth (ISSCG-17)** in Colorado (USA) *www.crystalgrowth.org/ICCGE-19_-_ISSCG-17_Flyer_7-20-16.pdf*
28.07. – 02.08.2019	**The 19th International Conference on Crystal Growth and Epitaxy (ICCGE - 19)** in Keystone, Colorado (United States of America) *www.crystalgrowth.org/ICCGE-19_-_ISSCG-17_Flyer_7-20-16.pdf*
August 2019	**Meeting of the Young Crystallographer's of the DGK and the jDGKK** in Darmstadt *http://dgk-home.de/aks/jkyc*
18.08 – 23.08.2019	**32nd European Crystallographic Meeting ECM32** in Wien (Östereich) *https://ecm2019.org*
15.09 – 20.09.2019	**European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis 2019** in Dresden *www.ecasia2019.com*

NEW
CrystalMaker X
For Mac and Windows

CrystalMaker®

INTERACTIVE CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURES MODELLING

CrystalMaker X is the most-efficient way to "see the wood for the trees" and understand crystal & molecular structures. Import data from 42 file formats, build your own structures—or browse our integrated library of 1000+ materials: indexed, searchable, with previews and metadata. Explore dynamical properties and structural behaviour with unique, rotatable animations. CrystalMaker also works seamlessly with **CrystalDiffract®** and **SingleCrystal™** for real-time diffraction simulation & characterization.



Award-Winning Modular Software

CrystalMaker®

CrystalDiffract®

SingleCrystal™

Ideal for Teaching & Research

Mac

Windows10 Compatible

We don't compromise on quality!
Genuine native Mac & Windows software

1994 – 2018
24 Years of Innovation

we innovate • others imitate

Download a FREE Demo
Watch our New Video Tutorials
Make Crystallography Fun!

CRYSTALMAKER SOFTWARE LTD

WWW.CRYSTALMAKER.COM

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.org

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.

WWW-Redakteur:

Webmaster: Dr. Stephan Buhre – *buhre@uni-mainz.de*

DMG-Mailingliste: 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.

Bitte senden Sie den ausgefüllten und unterschriebenen Antrag an den Schriftführer der DGK:
Dr. Daniel Többens, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (HZB), Abt. EM-ASD,
Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin.

An den
Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
Herrn Prof. Dr. Ralf Ficner.

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

[ ] Frau [ ] Herr, Titel/Akad. Grad: ..... Abschluss (z. B. Chemie (Master)): .....

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

Geburtsdatum: .....

Dienstanschrift*:

Universität/Firma: .....

Institut/Abteilung: .....

Straße: .....

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

Telefon: ..... E-Mail: .....

Privatanschrift*:

Straße: .....

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

Telefon: ..... E-Mail: .....

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

Jahresbeitrag :

Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung.

Die Bankverbindung der DGK ist:
Sparda-Bank Hamburg, IBAN: DE83 2069 0500 0000 6085 99, SWIFT (BIC): GENODEF1S11

Bevorzugt sollte die Beitragszahlung über Bankeinzug erfolgen.
Füllen Sie dazu bitte die umseitige Einzugsermächtigung aus.

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

Ich habe die Erklärung zum Datenschutz zur Kenntnis genommen und bin mit der Verarbeitung meiner Daten für die genannten Zwecke einverstanden.

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

Einzugsermächtigung

Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK: DE48ZZZ00001148361

Mandatsreferenz: wird separat mitgeteilt

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: .....
(wie bei der Bank angegeben)

Bankinstitut: .....

SWIFT (BIC): |.....|.....|.....|…..|.....|…..|…..|…..|.....|.....|…..|

IBAN: |…..|…..|…..|…..| |…..|…..|…..|…..| |….|…..|…..|….| |…..|…..|…..|…..| |…..|….|….|….| |…..|…..|

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

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

AK 1	[ ]	Biologische Strukturen
AK 2	[ ]	Hochdruck-Kristallographie
AK 3	[ ]	Elektronenmikroskopie
AK 4	[ ]	Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen
AK 5	[ ]	Kristallphysik
AK 6	[ ]	Molekülverbindungen
AK 7	[ ]	Neutronenstreuung
~~AK 8~~		(seit 3/2003 zusammengelegt mit AK 11)
AK 9	[ ]	Theoretische Kristallographie
AK 10	[ ]	Mikroskopie
AK 11	[ ]	Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung
AK 12	[ ]	Spektroskopie
AK 13	[ ]	Pulverdiffraktometrie
AK 14	[ ]	Computational Crystallography
AK 15	[ ]	Mineralogische und Technische Kristallographie
AK 16	[ ]	Aperiodische Kristalle
AK 17	[ ]	Kristallographie in der Lehre
~~AK 18~~		(seit 3/2016 zusammengelegt mit AK 20)
AK 19	[ ]	Kristallchemie
AK 20	[ ]	Materialwissenschaftliche Kristallographie
AK 21	[ ]	Junge Kristallographen

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 ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

A	Ordentliche Mitglieder	35 € (+ 5 € Spende*)	
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 € (+ 5 € Spende*)	auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand	

* Die Spende wird für das Preisgeld für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen und nicht spenden möchten, können jederzeit gegenüber dem Schatzmeister von ihrem Widerspruchsrecht Gebrauch machen.

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

Mitglieder, die nicht bzw. nicht zu den geltenden Beitragssätzen bis zum 31. Januar ihren Jahresbeitrag entrichtet haben, erhalten vom Vorstand eine Aufforderung, den Jahresbeitrag innerhalb von vier Wochen auf das Konto der DGK zu überweisen:

Bankinstitut:	Sparda-Bank Hamburg
Kontoinhaber:	Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.
SWIFT (BIC):	GENODEF1S11
IBAN:	DE83 2069 0500 0000 6085 99

Das Formular für eine schriftliche Einzugsermächtigung findet sich unter folgender URL:
http://dgk-home.de/intern/mitglieder/mitgliedschaft
Die Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK lautet DE48ZZZ00001148361. Die Mandatsreferenz lautet DGK-######, wobei ###### für die persönliche Mitgliedsnummer ergänzt durch führende Nullen steht.

Die Mitgliedsbeiträge für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. (Steuernummer 27/640/58455) sind mit Steuerbescheid vom 09.09.2015 des Finanzamts für Körperschaften I, Berlin als steuerbegünstigte Zuwendungen anerkannt. Dieser Hinweis, zusammen mit dem Überweisungsbeleg ist für Zuwendungen bis zu einer Höhe von 200 € für die steuerliche Geltendmachung ausreichend.

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 6. März 2018 in Essen beschlossen.

DATENSCHUTZERKLÄRUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE BEZÜGLICH PERSONENBEZOGENER MITGLIEDERDATEN

Eine ausführliche und aktuelle Fassung der Datenschutzerklärung bezüglich aller Internetaktivitäten der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie finden Sie auf der Webseite der DGK unter *http://dgk-home.de/intern/web-seiten-der-dgk/datenschutz*. Die hier abgedruckte Datenschutzerklärung betrifft die personenbezogenen Mitgliederdaten, wie sie mit der Anmeldung bei der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. erhoben werden.

Mit dem Beitritt eines Mitglieds nimmt die DGK die im Antragsformular aufgeführten personenbezogenen Daten des Beitretenden auf. Diese Informationen werden in den EDV-Systemen des Vorstands gespeichert. Jedem Vereinsmitglied wird dabei eine Mitgliedsnummer zugeordnet.

Die personenbezogenen Daten werden dabei durch geeignete technische und organisatorische Maßnahmen vor der Kenntnisnahme Dritter geschützt. Sonstige Informationen zu den Mitgliedern und Informationen über Nichtmitglieder werden von dem Verein grundsätzlich nur verarbeitet oder genutzt, wenn sie zur Förderung des Vereinszweckes nützlich sind und keine Anhaltspunkte bestehen, dass die betroffene Person ein schutzwürdiges Interesse hat, das der Verarbeitung oder Nutzung entgegensteht.

Besondere Ereignisse des Vereinslebens werden in Pressemitteilungen, der Vereinszeitschrift, auf den Internetseiten der DGK sowie per E-Mail an die Mitglieder der DGK bekannt gemacht. Dabei können personenbezogene Mitgliederdaten veröffentlicht werden. Das einzelne Mitglied kann jederzeit gegenüber dem Vorstand Einwände gegen eine solche Veröffentlichung seiner Daten vorbringen. In diesem Fall unterbleibt in Bezug auf dieses Mitglied eine weitere Veröffentlichung.

Nur Vorstandsmitglieder und sonstige Mitglieder, die im Verein eine besondere Funktion ausüben, welche die Kenntnis bestimmter Mitgliederdaten erfordert, erhalten eine Mitgliederliste mit den benötigten Mitgliederdaten ausgehändigt. Dies gilt ebenso für zur Durchführung der in der Satzung beschriebenen Aktivitäten von der DGK beauftragte Dritte. Die von der DGK beauftragten Dritten sind zum Schutz personenbezogener Daten verpflichtet und sind nur insoweit zur Verwendung der Daten berechtigt, als dies für die Erbringung des Angebots oder Services notwendig ist.

Bei Austritt werden die Daten des Mitglieds aus dem Mitgliederverzeichnis gelöscht. Personenbezogene Daten des austretenden Mitglieds, die die Kassenverwaltung betreffen, werden gemäß der steuergesetzlichen Bestimmungen bis zu zehn Jahre ab der schriftlichen Bestätigung des Austritts durch den Vorstand aufbewahrt.