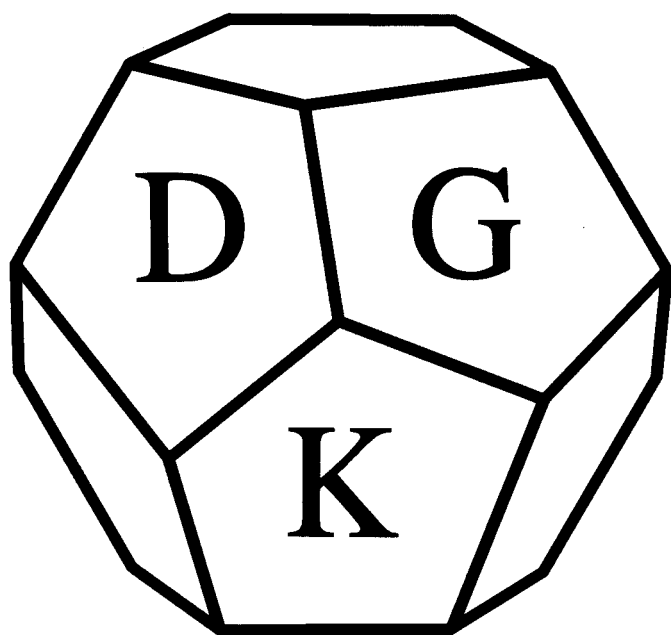




Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 30

Juli 2005

Die Mitteilungen werden von der Redaktion (Dr. Dirk Meyer) der DGK herausgegeben. Sie erscheinen in unregelmäßigen Abständen zweimal pro Jahr. Beiträge, Anregungen und Kritiken etc. sind zu richten an:

Dr. Dirk Meyer
Institut für Kristallographie und Festkörperphysik
Technische Universität Dresden
Zellescher Weg 16, 01069 Dresden
Tel.: 0351/463-32536, Fax: 0351/463-37048
Email: dirk.meyer@physik.tu-dresden.de

Vorstand

Vorsitzender: Prof. Dr. Wulf Depmeier
Institut für Geowissenschaften - Kristallographie der Universität Kiel
Olshausenstr. 40, 24118 Kiel
Tel.: 0431/880-2839, Fax: 0431/880-4457
Email: wd@min.uni-kiel.de

Stellvertretender Vorsitzender: Prof. Dr. Peter Paufler
Institut für Kristallographie und Festkörperphysik der TU Dresden
01062 Dresden
Tel.: 0351/463-4670, Fax: 0351/463-7048
Email: Paufler@physik.tu-dresden.de

Schriftführer: Dr. Karsten Knorr
Institut für Geowissenschaften - Kristallographie der Universität Kiel
Olshausenstr. 40, 24118 Kiel
Tel.: 0431/880-2839, Fax: 0431/880-4457
Email: knorr@min.uni-kiel.de

Schatzmeister: Dr. Jürgen Schreuer
Institut für Mineralogie - Abteilung Kristallographie der Universität Frankfurt
Senckenberganlage 30, 60054 Frankfurt
Tel.: 069/798-22105, Fax: 069/798-22101
Email: schreuer@kristall.uni-frankfurt.de

Vorsitzender des Nationalkomitees: Prof. Dr. Wolfgang Neumann
Institut für Physik – Kristallographie der Humboldt-Universität Berlin
Newtonstr. 15, 12489 Berlin
Tel.: 030/2093-7761, Fax: 030/2093-7760
Email: wolfgang.neumann@physik.hu-berlin.de

Homepage:
<http://opal.kristall.uni-frankfurt.de/DGK/>

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

Druck und Verarbeitung: Hundt Druck GmbH, Köln

Dieses Heft enthält je eine bezahlte Anzeige der Firmen Agfa NDT Pantak Seifert GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Impact GbR, Huber Diffraktionstechnik GmbH, RigakuMSC Ltd., Oxford Diffraction Ltd., PANalytical GmbH, Photonic Science Ltd., Röntgenlabor Dr. Ermrich, STOE & CIE GmbH und der IUCr.

Der Vorstand der DGK und die Redaktion der DGK-Mitteilungen weisen darauf hin, dass die Beiträge die Meinung des jeweiligen Autors wiedergeben.

Liebe DGK-Mitglieder,

ich hoffe sehr, daß, wenn Sie diese Zeilen lesen, schönsten Sommerwetter Ihren Sinnen schmeichelt. Genießen Sie das, selbst wenn Sie zu denjenigen gehören, die sich normalerweise so intensiv in ihre Experimente oder Bücher vertiefen, daß von der Außenwelt kaum etwas an sie dringt. Vielleicht erinnern Sie sich noch an unsere 13. Jahrestagung, die sehr zeitig im Jahr, nämlich vom 28. Februar bis 4. März 2005 in Köln stattfand. Der Jahreszeit entsprechend war es ziemlich kalt und gelegentlich schneite es sogar. Das wird bei der 14. Jahrestagung mit ziemlicher Sicherheit ganz anders sein, denn diese wird spät stattfinden, voraussichtlich vom 3. – 6. April 2006, und dazu im klimatisch begünstigten Freiburg im Breisgau.

Neben der Präsentation von neuesten wissenschaftlichen Ergebnissen und fruchtbaren Diskussionen gab es in Köln auch eine Mitgliederversammlung, die einen bedeutenden Beschluß gefaßt hat. Es wurde mit überwältigender Mehrheit beschlossen, die Jahresbeiträge zu erhöhen und zwar auf 10 Euro (ermäßigt) bzw. 30 Euro (voller Beitrag). Dem Vorstand und auch den Teilnehmern der Mitgliederversammlung war und ist voll bewußt, daß sich jeder von uns herzlich freut, wenn wieder einmal Beiträge/Gebühren/Kosten erhöht werden und in der Tat haben wir praktisch alle, sofern wir lohnabhängig sind, in den vergangenen Jahren eine Reduzierung unseres Effektiveinkommens hinnehmen müssen, zumindest ist die Entwicklung so wahrgenommen worden. Trotzdem haben wir die Beitragserhöhung beschlossen. Der Grund liegt darin, daß die DGK ihren satzungsgemäßen Auftrag mit ihren derzeitigen Einnahmen nicht mehr erfüllen konnte. Sinn und Zweck der Gesellschaft sind in ihren Statuten festgelegt. Ihretwegen genießt die DGK den Status der Gemeinnützigkeit. Die bedrängte finanzielle Lage der DGK ist hauptsächlich dadurch entstanden, daß wir mehr Arbeitskreise als je zuvor haben, die in ihrer großen Mehrheit auch noch sehr aktiv sind. Diese Aktivitäten werden, wie Sie wissen und vielleicht auch schon selbst erfahren haben, von der DGK unterstützt. Diesen erhöhten Ausgaben stehen verminderte Einnahmen aus den Überschüssen der Jahrestagungen gegenüber, so daß sich im Saldo ein Minus ergibt, das wir nun ausgleichen. Selbst nach der Erhöhung sind unsere Mitgliedsbeiträge, verglichen mit denen anderer Gesellschaften, immer noch sensationell niedrig. Vergessen Sie bei aller möglichen Verärgerung über die Beitragserhöhung bitte nicht die Vorteile, die Sie als Mitglied der DGK durch reduzierte Teilnahmegebühren bei Tagungen oder sogar durch Zuschüsse zu den Reisekosten für junge Mitglieder haben. Bleiben Sie der DGK auch nach der Beitragserhöhung treu.

Dieses ist das letzte Heft der Mitteilungen, das von den Kölner Kollegen Ladislav Bohatý und Peter Held herausgegeben wird. Ich nehme die Gelegenheit wahr, beiden im Namen der DGK herzlich für ihre großartige Arbeit in den letzten Jahren zu danken. Die Redaktion geht an Dirk Meyer in Dresden über. Ihm wünschen wir viel Erfolg und Freude an der Arbeit.

W. Depmeier

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
Vorwort des Vorsitzenden der DGK	3
In eigener Sache	5
Mitgliederversammlung in Köln	6
Victor Goldschmidt	12
Spektroskopie in Wien	22
Kölner Tagungsstatistik	26
Berichte aus den Arbeitskreisen	29
Molekülverbindungen	30
Mikroskopie	35
NMR-Spektroskopie	36
Computational Crystallography	38
Mineralogische und Technische Kristallographie	42
Grenzflächen	45
Ankündigungen	47
Tagungen & Termine	60
Homepage	62
Aufnahmeformular	63

IN EIGENER SACHE

Nach nunmehr 10 Jahren der redaktionellen Arbeit am Mitteilungsheft der DGK geht der Stafettenstab von Köln weiter an die Dresdner Gruppe um Dirk Meyer (Kontaktadresse siehe Umschlaginnenseite). Wir wünschen viel Erfolg und reibungslosen Ablauf.

Wir wollen an dieser Stelle allen Autoren der vielen Beiträge, Berichte, Protokolle, Vorworte, Kommentare und Anregungen unseren Dank für ihre Mitarbeit aussprechen. Das Mitteilungsheft einer Gesellschaft lebt nur aus deren Wirken. Daher rufen wir alle Mitglieder auf, sich auch weiter aktiv in der Gesellschaft zu engagieren – und über die vielfältigen Aktivitäten unserer Gesellschaft im Mitteilungsheft zu berichten.

Die Redaktion möchte sich bei den vielen Mitarbeiter unseres Instituts bedanken, die im Laufe der letzten 10 Jahre an der Erstellung, Druck und Versand mitgearbeitet haben. Viele unserer Doktoranden und Diplomanden unterstützten die DGK zweimal im Jahr durch Stempeln, Eintüten und Zukleben von ca. 1000 Mitteilungsheften pro Ausgabe. Auch den Schatzmeistern und Schriftführern der DGK sei für ihre stille Pflege und Bereitstellung der Mitgliederlisten und Versandadressen gedankt. Wir möchten an dieser Stelle auch den Mitarbeitern der Firma Hundt-Druck für die jahrelange gute Zusammenarbeit danken.

alle in den letzten 10 Jahren Mitwirkenden aus unserem Hause

Sonja Ahrweiler, Lkhamsuren Bayarjargal, Sevkinaz Bulut, Silvia Buschkamp, Elke Breidenbach, Roland Emmerich, Christian Engh, Hervaris Endongue, Markus Esser, Nina Gelewski, Sasha Goriounova, Ingrid Hoffstadt-Dorff, Holger Hellwig, Bernd Hinrichsen, Ingo Kerkamm, Bernhard Kläser, Martina Kresse, Helga Kruck, Michael Kugler, Markus Lindner, Natasha Machianova, Hendrik Meyer, Anton Meinhart, Julio Monteagudo, Marion Möllering, Olaf Müller, Claudia Marx, René Ochrombel, Ulrich Peuchert, Gunther Pillunat, Serguei Podlojenov, Christian Poetsch, Christian Reimann, Michael Reuß, Sven Rühle, Heide Sandler, Georg Schetter, Katja Schmid-Rausch, Steffi Seidel, Martin Selbach, Jonas Stade, Andrea Thöne, Barbara Ullrich, Volker Wirth, Jörg Zimmers

L. Bohatý und P. Held

Protokoll der Mitgliederversammlung
der
Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. (DGK)

am Dienstag, den 01.03.05, im Kurt-Alder-Hörsaal im Institut f. Anorganische Chemie,
Greinstr. 6, 50939 Köln

1. Begrüßung:

Der Vorsitzende, W. Depmeier, eröffnet die Versammlung um 18:30 Uhr und begrüßt die Anwesenden. Es wird der seit der letzten Mitgliederversammlung verstorbenen Mitglieder Dr. Robert Euler und Prof. Dr. Dr. h.c. Hans Joachim Bunge, Träger der Carl-Hermann-Medaille 2003, gedacht.

2. Feststellung der Beschlussfähigkeit:

verschoben

3. Annahme/Änderung der Tagesordnung:

Der Vorsitzende schlägt vor, als Top 10 das Thema "Arbeitskreise" zu behandeln. "Sonstiges" verschiebt sich auf Top 11. Der geänderten Tagesordnung wird zugestimmt.

4. Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 16.03.2004 in Jena

(veröffentlicht in den „Mitteilungen der DGK“, Heft 28):

Das Protokoll wird ohne Änderungen genehmigt.

5. Berichte

5.1. Bericht des Vorsitzenden (W. Depmeier):

- Die Eintragung des neuen Vorstandes und die Aktualisierung der Satzung beim Amtsgericht Charlottenburg sind erfolgt.
- Auf dem Ehrenabend wurde P. Paufler die Carl-Hermann-Medaille verliehen. Der Laue-Preisträger 2005 ist Herr Schwarz aus Braunschweig. Da er nicht an der Tagung teilnehmen konnte, sollen ihm Preisgeld und Urkunde während der nächsten Jahrestagung überreicht werden.
- Es wird auf die früher außerordentlich gute Finanzlage der DGK hingewiesen. Dadurch konnten Veranstaltungen der Arbeitskreise, sowie der Kristallographie nahestehende Veranstaltungen, großzügig unterstützt werden. Dies ist auch für die Zukunft wünschenswert, allerdings bei der momentanen Finanzlage ebenso wenig möglich, wie die Neuauflage der Broschüre "Kristallographie in Deutschland".
- Der Vorsitzende appelliert an alle Mitglieder, die Kristallographie an den Universitäten zu unterstützen und aktiv zu vertreten.
- Der Vorsitzende dankt den Organisatoren der Tagung 2005 in Köln.
- Herr Meyer aus Dresden übernimmt die Redaktion der "Mitteilungen". Herr Held und Herr Bohatý erhalten als Dank für die langjährige Herausgebertätigkeit der "Mitteilungen" ein kleines Präsent.
- Der Vorsitzende teilt mit, dass eine Verbindungsperson zu den IUCr-Newsletters gesucht wird. Die Öffentlichkeitsarbeit wurde vom Vorstand kritisch diskutiert. Es wird ein Kollege/eine Kollegin gesucht, welche(r) aktuelle Themen kristallographischer

Forschung für die interessierte Öffentlichkeit aufbereitet und diese dann Presse, Funk und Fernsehen zur Verfügung stellt.

5.2. Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees:

Der Vorsitzende, W. Depmeier, gibt in Vertretung des erkrankten Kollegen Neumann eine kurze Zusammenfassung. Er berichtet, dass die DFG auch in diesem Jahr den jährlichen Beitrag der DGK zur IUCr übernommen hat, daraus aber kein Automatismus erwachse. Auf kommende internationale Tagungen wird hingewiesen.

5.3. Bericht des Schriftführers (K. Knorr):

- In 2004 wurden die für die Satzungsänderung und die Registrierung des geschäftsführenden Vorstands beim Amtsgericht Charlottenburg nötigen Unterlagen vorbereitet und eingereicht.
- Die vereinheitlichte Mitgliederdatenbank von Schriftführer und Schatzmeister wird seit dem Spätsommer 2004 beim Schatzmeister in Frankfurt/Main geführt.
- Die Mitgliederzahl ist gewachsen. Die Gesellschaft hat 1072 Mitglieder, von denen 1055 stimmberechtigt sind.
- Den AK-Sprechern wird für die aktive Werbung von Mitgliedern ausdrücklich gedankt.

5.4. Bericht des Schatzmeisters (J. Schreuer):

Die Jahresbilanz 2004 (Anhang) ist vor allem durch den vom Finanzamt Kiel-Nord geforderten Abbau von Rücklagen geprägt. Ein direkter Vergleich mit den Bilanzen der Vorjahre ist allerdings schwierig, da auf Grund der Umstellungen in der Mitgliederverwaltung der Jahresbeitrag 2004 erst im Januar 2005 eingezogen wurde und daher in der Abrechnung für 2004 nicht in Erscheinung tritt. Unter Berücksichtigung dieser Beiträge reduziert sich das Defizit für 2004 von EUR 15.914,37 auf ca. EUR 7.000, womit die Vorgaben des Finanzamtes weitgehend erfüllt sind.

Bei näherer Betrachtung der Bilanz fällt auf, dass abgesehen von etwas höheren Ausgaben für Verwaltung (neue Mitgliederdatenbank) und Mitteilungen (zusätzlich Druck und Versand eines Mitgliederverzeichnisses), keine ungewöhnlich hohen Posten auf der Ausgabenseite zu finden sind. Dass trotzdem ein erhebliches Minus resultiert, ist vor allem eine Folge verminderter Einnahmen. Bis 2003 warfen die Jahrestagungen jährlich Überschüsse bis zu EUR 10.000 ab, die von der DGK zu satzungsgemäßen Zwecken, insbesondere der Förderung von Arbeitskreisaktivitäten, verwendet wurden. Die Inanspruchnahme externer Hilfe für Organisation und Durchführung der Jahrestagungen hat seit 2004 zu ausgeglichenen Tagungsbudgets geführt. Die abnehmende Personaldecke der ausrichtenden Institute läßt bei gleichzeitig steigenden Ansprüchen der Teilnehmer auch in der Zukunft keine Besserung erwarten.

Im Hinblick auf den Laue-Preis ist anzumerken, daß auch in Zeiten niedriger Zinsen der jährliche Zinsertrag für die Vergabe eines Preises in Höhe von EUR 1.500 ausreicht, ohne den Kapitalstock abzuschmelzen. Zwar ist der Kapitalstock in Höhe von EUR 33.953,62 auf den Laue-Konten I, II und III vom Finanzamt akzeptiert worden, allerdings darf sich der Betrag nicht weiter erhöhen. Dies bedeutet, dass einerseits keine weiteren Spenden für diesen Zweck zulässig sind und andererseits die nicht für Laue-Preise verwendeten Zinserträge von der DGK zeitnah für andere satzungsgemäße Zwecke verwendet werden müssen. Aus diesem Grunde wurden im Jahr 2004 EUR 2.000 vom Laue-Sparbuch dem DGK-Kapital zugeführt und an die Arbeitskreise ausgeschüttet.

5.5. Bericht der Kassenprüfer (L. Wiehl, H. Zimmermann):

Die Prüfer berichten, dass bei der Kassenprüfung alles für richtig und ordentlich befunden wurde.

5.6. Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen (L. Bohatý):

Es werden die Übergabe des Amtes an Herrn Meyer (Dresden) sowie der Redaktionsschluß für Heft 30 mitgeteilt.

5.7. Bericht des Redakteurs der Homepage (W. Depmeier in Vertretung S. Rönnebeck):

Da Frau Rönnebeck nicht in einem kristallographischen Institut arbeitet, ist es nötig, sie regelmäßig mit Informationen zu versorgen. Dazu sollen von allen kristallographischen Instituten verantwortliche Ansprechpartner benannt werden.

5.8. Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand (K. Knorr berichtet in Vertretung aus einem Bericht von U. Bismayer):

- Unser Mitglied Friedrich Liebau wurde auf der DMG-Tagung 2004 Ehrenmitglied der DMG.
- Auch in diesem Jahr fördert die DMG Doktorandenkurse, z.T. gemeinsam mit Arbeitskreisen der DGK (z.B. "Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung", Ruhruniversität Bochum, Michael Fechtelkord)
- aktuelle Tagungstermine finden sich auf der Webseite der DMG, die DMG Tagung 2005 findet in Aachen statt.

5.9. Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand:

W. Depmeier berichtet in Vertretung von Herrn Höche, dass der Vorstand der DGK der DPG vorschlagen möchte, diesen Posten mit Herrn Braden zu besetzen.

5.10. Bericht des Vertreters der DGK in der DPG:

Herr Braden berichtet, dass die DPG 2005 das Einsteinjahr begeht. Die DPG hat sich gegen Bachelor-Abschlüsse als "Regelabschluss" ausgesprochen und ist für die Erhebung von Studiengebühren. Die momentane Arbeitslosenquote bei Physikern beträgt nur ca. 3%.

zu Top 2: Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt.

6. Entlastung des Vorstands:

Die Kassenprüfer schlagen der Mitgliederversammlung die Entlastung des Vorstands vor. Dem wird zugestimmt.

7. Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr:

Frau Wiehl und Herr Zimmermann werden als Kassenprüfer im Amt bestätigt.

8. Jahresbeitrag für das folgende Geschäftsjahr:

Der Schatzmeister erläutert nochmals, dass den jährlichen Einnahmen der DGK von ca. 10.000 EUR aus Mitgliedsbeiträgen Ausgaben von ca. 5.000 EUR für die Mitteilungen und 10.000 EUR zur Förderung von Arbeitskreisen gegenüberstehen. Es gibt keine zu verbrauchenden finanziellen Reserven mehr und Jahrestagungen werden kaum mehr

Überschüsse erwirtschaften. Weiterhin besteht im Vorstand, sowie im erweiterten Vorstand, Konsens über die Weiterführung der gedruckten Version der Mitteilungen sowie eine weitere Förderung der Arbeitskreise. Daher stellt der Schatzmeister den Antrag auf Anhebung der Mitgliedsbeiträge ab 2006 auf 25 EUR für Vollmitglieder und 10 EUR ermäßigt.

Herr Müller fragt an, ob es Ermäßigungen für Doppelmitgliedschaften gäbe. Diese sind seit mehreren Jahren abgeschafft.

Herr Ahsbahr fragt, ob weitere Überschüsse abgebaut werden könnten. Herr Depmeier antwortet, dass die momentanen Rücklagen den möglicherweise anfallenden Jahresbeitrag der DGK bei der IUCr, sowie eine Risikoabdeckung eines möglichen Defizits der nächsten Jahrestagung sicherstellen. Weitere Rücklagen gibt es nicht.

Herr Bohatý erklärt, dass ein Beitrag von 25 EUR für Vollmitglieder sehr günstig sei und stellt den weitergehenden Antrag einer Anhebung der Beiträge auf 30 EUR für Vollmitglieder (ermäßigt 10 EUR).

Herr Burzlaff unterstützt den Antrag von Herrn Bohatý und fragt nach dem Anteil der GDCh an der Tagungsorganisation 2005. Herr Bohatý erläutert die von der GDCh erbrachten Leistungen und erklärt, dass diese mit ca. 20.000 EUR berechnet werden.

Dem Antrag von Herrn Bohatý wird mit 10 Gegenstimmen zugestimmt. Damit erhöht sich der Jahresbeitrag ab 2006 auf 30 EUR für Vollmitglieder und ermäßigt 10 EUR für Studenten/Doktoranden, Pensionäre sowie arbeitslose Mitglieder.

9. Jahrestagungen:

Frau Röhr lädt, auch im Namen der Kollegen Cröll, Hillebrecht und Danilewski, zur Jahrestagung 2006 nach Freiburg ein. Die Tagung soll in der ersten Aprilwoche im Kollegiengebäude der Universität stattfinden. Die Tagungsorganisation soll über den Verein „Kongress und Kommunikation“ erfolgen.

R.X. Fischer lädt zur gemeinsamen Tagung mit den niederländischen Kollegen für 2007 nach Bremen ein.

10. Arbeitskreise:

Herr Lehmann berichtet, es bestünden Unklarheiten über die Zuordnung von Tagungsbeiträgen zu entweder dem Themenschwerpunkt des AK 6 (Molekülverbindungen) oder des AK 19 (Kristallchemie). Es wird vorgeschlagen, zukünftig Strukturen, welche in der Cambridge Structure Database deponiert würden, im AK 6 und Strukturen, die in der Inorganic Structure Database deponiert würden, im AK 19 zu behandeln. Eine Abstimmung der AK-Sprecher untereinander mit Mitteilung an den Vorstand wird erbeten.

11. Sonstiges:

Herr Allmann weist darauf hin, dass 50% der auf Postern während der DGK-Tagungen präsentierten Kristallstrukturen später nicht publiziert würden. Er bittet den Vorstand zu prüfen, ob die Möglichkeit bestünde, die Daten in Karlsruhe bei der ICSD zu hinterlegen.

Der Vorsitzende schließt die Mitgliederversammlung um 19:36 Uhr.

Prof. Dr. Wulf Depmeier
(Vorsitzender)

PD Dr. Karsten Knorr
(Schriftführer)

Anhang zum Bericht des Schatzmeisters (J. Schreuer)

Kapital der DGK

(Vergleich der Salden zum 30.12.2003 und 30.12.2004)

Konto	29.12.03	30.12.04	Veränderung
Giro	696.40	663.37	-33.03
Cash (Sparbuch III)	15,149.89	41.67	-15,108.22
Sparbuch I	10,896.54	11,111.45	214.91
Sparbuch II	1,098.77	110.74	-988.03
Summe	27,841.60	11,927.23	-15,914.37
Laue I	20,451.68	20,451.68	.00
Laue II	12,782.30	12,782.30	.00
Laue III	719.64	719.64	.00
Laue Sparbuch	3,545.28	2,050.84	-1,494.44
Summe	37,498.90	36,004.46	-1,494.44

Kassenbericht – DGK Jahresbilanz 2004

Jahresbilanz 2004 (DGK-Kapital)	
Einnahmen	
Mitgliedsbeiträge	468.97
Spenden	.00
Berichte	167.61
Broschüre	103.50
Umbuchung Laue Sparbuch	2,000.00
Anzeigen	3,345.00
Zinsen	318.66
Summe	6,403.74
Ausgaben	
Medaillen	-7.20
Reisekosten	-875.95
Porto	-133.78
Verwaltung	-3,609.68
Druckkosten	-8,622.73
AKs	-5,418.77
sonst. Förderung	-2,500.00
ECA	-1,150.00
Summe	-22,318.11
Gesamtbilanz	-15,914.37
Mitgliedsbeiträge 2004	8,840.00
(Bankeinzug 01/2005)	
	-7,074.37

Jahresbilanz 2004 (Laue-Kapital)	
Einnahmen	
Zinsen	2,005. 56
Summe	2,005.56
Ausgaben	
Umbuchung Giro	-2,000.00
Laue-Preis I	-1,500.00
Summe	-3,500.00
Gesamtbilanz	-1,494.44



Viktor Goldschmidt (1853 – 1933)

Jeder Benutzer der Bibliothek eines mineralogischen Instituts kennt die Rücken des 18-bändigen (60 cm Regallänge) „Atlas der Kristallformen“ von Victor Goldschmidt. Nur wenige wissen jedoch, dass dessen Autor nicht der berühmte Geo- und Kristallchemiker Victor Moritz Goldschmidt (1888 - 1947) ist, sondern Victor (Mordechai) Goldschmidt (1853 - 1933), der ebenfalls bedeutende Beiträge zur Kristallographie geleistet hat. (Die Angabe in der Brockhaus Enzyklopädie, dass Victor Mordechai Goldschmidt ein Onkel von Victor Moritz Goldschmidt sei, ist nicht richtig.)

Victor Mordechai Goldschmidt wurde am 10. 2. 1853 als fünftes von sieben Kindern in Mainz geboren; sein Vater, Salomon Benedikt Goldschmidt (1818 - 1906), betrieb einen Eisenhandel en gros und ein Bankgeschäft; seine Mutter Josephine Porges, Edle von Portheim (1822 - 1869), entstammte – wie auch Victor Mordechais spätere Frau Leontine – einer wohlhabenden Prager Familie, die, aus kleinsten Verhältnissen heraus, in kürzester Zeit zu den führenden Industriellen Böhmens zählte und es zu großem Wohlstand brachte. – Josephines Vater, Leopold Juda Porges (1785 - 1869), war Sohn unbemittelter Eltern und betrieb zunächst einen kleinen Liqueur-Handel. Mit seinem Bruder Moses Porges (1781 - 1870) gründete er 1808 in einem dunklen Keller der Prager Altstadt einen Baumwoll-Druck-Laden mit nur einem Druckstock. Durch Fleiß und Geschick wuchs das Unternehmen rasch, und bereits im Jahre 1843 beschäftigte die Firma „Porges Brothers“ 700 Arbeitnehmer. Nach einer Werksbesichtigung durch den österreichischen Kaiser Ferdinand I. wurde den Porges-Brüdern die Wahl zwischen einem Orden oder einem Adelstitel angeboten. Sie antworteten, dass sie eine solche Ehre nicht annehmen möchten, solange sie, als Juden, nicht dieselben Bürgerrechte besäßen, derer sich der letzte ihrer Arbeiter erfreut. Der Appell verhallte im zuständigen Ministerium ungehört, und die Brüder wurden 1841 in den erblichen Adelsstand als „Edle von Portheim“ erhoben.

Nach dem Abitur in Mainz (1870) begann Victor Goldschmidt auf Wunsch seines Vaters – die Familie besaß Hüttenwerke – ein Ingenieurstudium an der Gewerbeakademie Berlin. Nach zwei Semestern vertauschte er die hektische Großstadt mit dem stillen Freiberg in Sachsen und bestand dort 1874 sein Examen als Hütteningenieur. Dort leistete er auch seinen Militärdienst ab; später wurde er Oberleutnant der Reserve. Im Rahmen seines Studiums in Freiberg hatte er besondere Freude an den Vorlesungen des Mineralogen Albin Weisbach. Goldschmidt beschreibt später begeistert die bezaubernde Atmosphäre der Kleinstadt und der Bergakademie, über der immer noch der Atem Abraham Gottlob Werners wehte; Weisbach hütete wie ein Hohepriester das Andenken an Werner, besonders den Raum, der Werners private Mineralsammlung barg. Dem von Goldschmidt hochverehrten Weisbach widmete er sein erstes großes Werk, den „Index der Kristallformen“, und später, 1902, verfasste er den Nachruf für Weisbach im Centralblatt für Mineralogie. – Von 1875 bis 1879 arbeitete er als Assistent für Hüttenkunde bei H. Th. Richter, Professor für Lötrohrprobierkunst an der Bergakademie Freiberg, der gemeinsam mit Ferdinand Reich das Element Indium entdeckt hat. – Goldschmidts Jahre in Berlin und Freiberg wurden ausführlich von H. J. Rösler (2004) beschrieben.

Von 1878 bis 1882 studierte er in München, wo er vorwiegend chemische Vorlesungen, u.a. bei v. Baeyer und O. und E. Fischer hörte. 1879 ging er nach Heidelberg, wo er 1880 bei Harry Rosenbusch mit einer Arbeit „Über Verwendbarkeit einer Kaliumquecksilberjodidlösung bei mineralogischen und petrographischen Untersuchungen“ promovierte. 1882 bis 1887 war er in Wien, wo er sich unter dem Einfluss von Aristide Brezina (k.k. Naturhistorisches Hofmuseum) und Heinrich v. Foullon (k.k. Geologische Reichsanstalt) zunehmend der

Kristallographie zuwandte. Hier veröffentlichte er den ersten Band seines „Index der Kristallformen der Mineralien“.

1888 kehrte er zurück nach Heidelberg und habilitierte sich mit seiner, bereits 1887 erschienenen, Arbeit „Über Projektion und graphische Krystallberechnung“.

Im Herbst 1888 heiratete er seine 10 Jahre jüngere Cousine Leontine Porges, Edle von Portheim (1863 - 1942), aus Prag, die ihm eine treusorgende und kongeniale Lebensgefährtin und Mitarbeiterin wurde; sie war eine Tochter des Textilfabrikanten Eduard Porges, eines Bruders seiner Mutter Josephine. – Goldschmidt war im jüdischen Glauben aufgewachsen und konvertierte um diese Zeit zum Christentum, vielleicht, weil seine Frau katholische Christin war.

Das Ehepaar bezog in Heidelberg eine Villa in der Gaisbergstraße 8, wo es bis in die dreißiger Jahre wohnen blieb. Das Haus fiel später einigen der wenigen Bomben, die im Verlauf des zweiten Weltkriegs auf Heidelberg fielen, zum Opfer. – Sein ererbtes Vermögen und insbesondere dasjenige seiner Frau ermöglichten es Goldschmidt, dort ein selbstfinanziertes, privates „Mineralogisch-Kristallographisches Institut“ einzurichten, das 1895 in das erste Obergeschoss des Hauses Hauptstraße 48 verlegt wurde.

1893 wurde Goldschmidt zum außerordentlichen Honorarprofessor der Universität Heidelberg ernannt und 1909 vom Großherzog von Baden zum ordentlichen Honorarprofessor.

Goldschmidt scharte bald zahlreiche Schüler und „Post-Docs“ aus dem In- und Ausland um sich. Darunter seien einige prominente genannt: Robert Schröder (der Goldschmidts Werk und seine Methoden später in Heidelberg fortführte; 1950 erschien im Springer-Verlag sein Buch „Krystallometrisches Praktikum“), C. Palache (USA), A.E. Fersman (Russland), Mary W. Porter (England) und M.A. Peacock (Kanada).

1894/95 machte das Ehepaar Goldschmidt eine Weltreise (über USA und Kanada nach Japan, China, Ceylon, Indien und Ägypten), von der sie zahlreiche ethnographische Stücke mitbrachten, die den Grundstock der späteren Sammlungen des Völkerkundemuseums bildeten.

1916/1919 gründete das Ehepaar Goldschmidt die „Josephine und Eduard von Portheimstiftung für Wissenschaft und Kunst“, zu Ehren der Mutter des Stifters und des Vaters der Stifterin mit dem Zweck, „in der Förderung von Wissenschaft und Kunst der Heidelberger Universität helfend zur Seite zu stehen durch Schaffung von Instituten, Sammlungen und Forschungsmöglichkeiten ...“. Im Rahmen dieser Stiftung wurden gegründet: das ethnographische Institut, in das die umfangreiche private Sammlung der von den beiden Goldschmidts zusammengetragenen völkerkundlichen Sammlungsstücke eingebracht wurde und das heute noch als „Völkerkundemuseum der von-Portheim-Stiftung“ existiert; das Anthropologische Institut; das Biomechanische Institut; das Institut für Volkskunde und Volkskunst; das Prähistorische Museum. Das kristallographische Privatinstitut Goldschmidts wurde 1919 in die Stiftung eingebracht. Die meisten dieser Institute existieren heute nicht mehr, weil die Kostensteigerung nach dem ersten Weltkrieg mit den Mitteln der Stiftung nicht mehr aufgefangen werden konnte. Daher ging die Stiftung schon 1919 in die Obhut des Landes Baden über. Um seiner Stiftung ein würdiges Domizil zu schaffen, erwarb Goldschmidt 1922 aus dem Besitz des Prinzen Wilhelm von Sachsen-Weimar-Eisenach dessen Palais in Heidelberg in der Hauptstraße 235, das bis heute als Palais Weimar bekannt ist und wo auch heute noch das Völkerkundemuseum untergebracht ist.

Zur Veröffentlichung seiner fachwissenschaftlichen Beiträge gründete Goldschmidt 1913 die Zeitschrift „Beiträge zur Kristallographie und Mineralogie“. Zur Förderung auch anderer Ergebnisse – aber wesentlich Heidelberger Ursprungs – begründete er 1922 die „Heidelberger Akten der von-Portheim-Stiftung“.

Im Jahr 1917 wurde Goldschmidt zum geheimen Hofrat ernannt.

Der Ausbruch und Verlauf des ersten Weltkriegs hatte Goldschmidt in eine ernste psychische Krise gestürzt. Depressive Phasen machten zeitweise sogar stationäre Aufenthalte in Kliniken erforderlich. Er überwand die Krankheit nicht zuletzt durch den liebevollen Beistand seiner Frau. – Die Inflation und das Erstarken eines Antisemitismus in den zwanziger Jahren erfüllte das Ehepaar mit ernststen Sorgen. Goldschmidt war zu schwach, sich eines Assistenten zu entledigen, der nach seinem Tode Leiter seines kristallographischen Instituts wurde, NSDAP-Mitglied war und eine intrigante Rolle spielte. Goldschmidt war Ende der zwanziger Jahre als Vorsitzender des Kuratoriums der Portheim-Stiftung schon praktisch entmachtet und musste tatenlos zusehen, wie die Völkerkunde zunehmend in eine Rassenkunde im Sinne der nationalsozialistischen Ideologie umgemünzt wurde.

1933 beschloss das Ehepaar Goldschmidt daher, den 80. Geburtstag Victors nicht in Deutschland zu verbringen; sie fuhren nach Salzburg, wo sie im Salzburger Hof wohnten. Dort erkrankte Goldschmidt an einem Magenleiden, wahrscheinlich Magengeschwüren, die, gefolgt von einem Magendurchbruch, zu seinem Tod am 8. Mai 1933 führten. Den an seine Heidelberger Adresse gerichteten Einschreibebrief mit der Mitteilung, dass er gemäß Gesetz zur Wiederherstellung des Berufsbeamtentums als Nichtarier entlassen worden sei, hat ihn nicht mehr erreicht. – Seine Asche wurde auf dem Heidelberger Bergfriedhof beigesetzt.

Sein privates Kristallographisches Institut wurde 1938 dem Mineralogisch-Petrographischen Institut der Universität angegliedert. – Seine Frau erlebte während der Nazi-Herrschaft schreckliche Jahre der Demütigung, Sperrung ihres Vermögens, Ausweisung aus ihrer Wohnung, entwürdigende Kennzeichnungspflicht, Schikanen von Polizei und Partei, Beschimpfungen und bittere Enttäuschung über das Abwenden langjähriger Bekannter. Sie nahm sich am 25. August 1942, dem Tage, an dem sie nach Theresienstadt deportiert werden sollte, das Leben. Ihr gesamter Haushalt, der auch den wissenschaftlichen Nachlass ihres Mannes enthielt, geriet in die Hände der Gestapo. Auf ein Gesuch des Heidelberger Mineralogischen Instituts hin wurde lediglich ein Teil des Nachlasses übergeben; der andere Teil ist verloren gegangen.

Das wissenschaftliche Œuvre Goldschmidts lässt sich in durch die folgenden Überschriften grob einteilen in: (1) Goniometrie, (2) Auswertung goniometrischer Messungen und Tabellenwerke, (3) Komplikationsgesetz, (4) Erweiterung des Komplikationsgesetzes auf andere wissenschaftliche und künstlerische Bereiche.

(1) In Zusammenarbeit mit dem Mechaniker Peter Stoe entwickelte Goldschmidt das Zweikreis-Goniometer, das sich unter dem Namen „Goldschmidt-Goniometer“ weltweit durchsetzte. Stoe hatte bereits 1887 eine Firma zum Bau und Vertrieb derartiger Geräte gegründet. Ab 1893 wurden diese stetig verbesserten Goniometer weltweit ausgeliefert. – Das Zweikreisgoniometer war, parallel und unabhängig, 1874 von Miller und 1889 von Fedorov entwickelt worden.

(2) Goldschmidts Ziel war, den molekularen Aufbau der festen Körper und die Wirkungsweise der intermolekularen Kräfte zu ergründen; und als eines der Mittel zur Lösung dieser Aufgabe sah er die systematische Beschreibung der Kristallformen an. – Die Basis der Auswertung kristallometrischer Messungen bilden geeignete Projektionen. Goldschmidt bedient sich hierzu der etwa 50 Jahre vorher von Franz Neumann in die Kristallographie eingeführten gnomonischen und stereographischen Projektion. In seiner Habilitationsschrift beschrieb er ihre Eigenschaften und Anwendungsmöglichkeiten eingehend.

Die mit sehr großem Fleiß zusammengetragenen Messungen an zahlreichen gängigen Mineralarten fanden ihren Niederschlag in drei großen Tabellenwerken: (i) „Index der Krystallformen der Mineralien“ (3 Bände, 1886, 1890, 1891), (ii) „Krystallographische Winkeltabellen“

(1897), und schließlich (iii) der große „Atlas der Krystallformen“ (9 Tafel- und 9 Textbände; 1913 - 1923). Im letzteren werden – alphabetisch geordnet – Daten, Fundorte und Literaturangaben von 538 Mineralarten aufgelistet. Die Tafelbände enthalten allein 30000 Abbildungen von Kristallformen und Trachten.

Ein besonderes Verdienst Goldschmidts bestand darin, statt der bis dahin üblichen Tabellen von Winkeln, die je zwei Flächen miteinander bilden (bei n Flächen also bis zu $n \cdot (n-1)$ Winkelangaben), nur die Raumwinkelkoordinaten „Azimut φ “ und „Poldistanz ρ “ des Durchstoßpunktes der Flächennormale auf der Lagekugel anzugeben, woraus dann alle interessierenden Winkel leicht berechnet werden können. Auch durch die Hinzunahme von vier zusätzlichen Winkelwerten zur Herstellung umorientierter stereographischer Projektionen sowie von drei zusätzlichen Koordinatenwerten zur Zeichnung von gnomonischen Projektionen beträgt der Platzbedarf der Goldschmidtschen Tabellen nur etwa 10% des Platzbedarfs der Tabellen alten Stils. Eine Reproduktion der neun Tafelbände des Atlas der Kristallformen kann im Netz unter www.meinemineraliensammlung.de/victor/goldschmidt eingesehen werden. (Es ist sehr bezeichnend für die verbreitete Unkenntnis über die Existenz zwei verschiedener „mineralogischer“ Goldschmidts, dass auf dieser Homepage neben einem Text von Victor (Mordechai) Goldschmidt ein Photo von Victor Moritz Goldschmidt abgedruckt ist.)

(3) Der Begriff, den man im Besonderen mit dem Namen Goldschmidt in Verbindung bringt, ist das „Komplikationsgesetz“, das die morphologische Bedeutung von Flächen innerhalb einer Zone beschreibt. Goldschmidt leitete es aus umfangreichen Beobachtungen empirisch ab. Bei der statistischen Untersuchung über die Häufigkeit des Auftretens von beobachteten Wachstumsflächen fand Goldschmidt heraus, dass sich die Repräsentationspunkte tautozonaler Flächen auf den Zonengeraden der gnomonischen Projektion in gesetzmäßiger Weise anordnen.

Goldschmidt wählte innerhalb einer Zone zwei besonders prominente Flächen, die zugleich auch anderen wichtigen Zonen angehören (beispielsweise (001) und (010)), als „Hauptknoten“ aus und ordnete ihnen, unter Bezug auf die Koordinaten der gnomonischen Projektion, die Werte „0“ und „ ∞ “ zu. Nach Wahl eines dazwischenliegenden „dominanten Knotens“, dem die „1“ zugeordnet wird, werden nun nach dem Ableitungsschema der Brocot-schen Reihen (jedes zwischenzuschubende Glied der nachfolgenden Reihe ergibt sich aus: (Zähler + Zähler) geteilt durch (Nenner + Nenner) der vorangehenden darüber stehenden Glieder) „Normalreihen“ N_i gebildet:

N ₀	0/1 =	0								∞ = 1/0
N ₁		0				1				∞
N ₂		0		1/2		1		2		∞
N ₃		0	1/3	1/2	2/3	1	3/2	2	3	∞
⋮										
⋮										
⋮										
N _n		0	1/n	usw.		1	usw.	n		∞

Zum Beispiel könnten den Zahlen der Normalreihe N_3 die folgenden Flächen zugeordnet werden:

N_3	0	1/3	1/2	2/3	1	3/2	2	3	∞
	(001)	(013)	(012)	(023)	(011)	(032)	(021)	(031)	(010)

Die entscheidende Aussage ist, dass (in der statistisch überwiegenden Zahl der Fälle) der dominante Knoten (1) zwischen zwei zueinander reziproken Zahlen steht und dass die zugehörigen Flächen mit vergleichbarer Bedeutung (Größe) als Wachstumsflächen auftreten. Weiterhin treten einfache Flächen (die niedrig indizierten Normalreihen zugehören) häufiger auf als die „komplizierten“ (daher auch der Name!); selten muss in praktischen Fällen die Normalreihe N_3 herangezogen werden, die Reihe N_4 fast nie. – Diese Aussagen gelten für alle Kristallsysteme. – In der als Zitat angegebenen Arbeit von M. Buerger (1936) findet sich eine ausführlichere Beschreibung.

Für einen modernen Kristallographen erscheint das Komplikationsgesetz relativ trivial; denn jede Linearkombination der Millerschen Indizes von zwei Flächen (als Komponenten des Flächennormalenvektors im reziproken Gitter), $\mathbf{H} = (h_1, h_2, h_3)$ und $\mathbf{K} = (k_1, k_2, k_3)$, $l_i = a \cdot h_i + b \cdot k_i$ (a und b seien ganze Zahlen), führt auf den Flächennormalenvektor $\mathbf{L}$ einer tautozonalen Fläche; je größer die l_i , um so kleiner sind die d -Werte der zugehörigen Netzebenen, d.h. um geringer ist – nach den gängigen Vorstellungen über das Kristallwachstum nach Bravais, Friedel oder Donnay, – die morphologische Bedeutung der Fläche $\mathbf{L}$.

(4) Nach der Entdeckung der Bedeutung der Normalreihen in der Kristallographie vermutete Goldschmidt eine entsprechende Bedeutung der Normalreihen auch in anderen Bereichen von Natur und Kunst. Goldschmidt war von dem Gedanken beseelt, dass ein universelles Gesetz der Harmonie die Welt beherrscht.

(i) Besonders naheliegend war die Anwendung in der Musik. Goldschmidt hatte schon bei der Entwicklung der Kristallformen darauf hingewiesen, dass seine Wortwahl: „zwischen zwei Knoten spannt sich eine Zone“ dem Gleichnis des Spannens einer schwingenden Saite entnommen ist. Wegen des Zusammenhangs der Normalreihen mit der Harmonie in der Musik benannte er die Normalreihen auch „harmonische Reihen“ („Über Harmonie und Komplikation“, Springer, 1901).

Bekanntlich stehen die Schwingungszahlen der Dur-Tonleiter in den nachstehenden Verhältnissen

c	d	e	f	g	a	h	c'
1	9/8	5/4	4/3	3/2	5/3	15/8	2

Wenn man die Normalreihe N_3 (siehe oben) um die Zahlen $(2/3)$, $(3/2)$ und (3) vermindert und um die, eigentlich höheren Komplikationen zugehörigen, Werte $[1/7]$ und $[7]$ erweitert und diese Zahlen, p , einer Transformation $(2p+1)/(p+1)$ unterwirft, erhält man die gewünschten Brüche:

N_3 :	0	$[1/7]$	1/3	1/2	$(2/3)$	1	$(3/2)$	2	(3)	$[7]$	∞
	1	$[9/8]$	5/4	4/3	$(7/5)$	3/2	$(8/5)$	5/3	$(7/4)$	$[15/8]$	2
					(ges)		(as)		(b)		

Bezeichnenderweise führen die „nicht-harmonischen“ Zahlen „ $1/7$ “ und „ 7 “ auf die „dissonanten“ Akkorde Sekunde und Septime, während die den niedrigindizierten Normalreihen zuzuordnenden Töne „harmonisch“ im Sinne von „ästhetisch angenehm“ und „wohl-tuend“ sind.

Die hier nur kurz angedeuteten Gesetze hat Goldschmidt in großem Umfang erweitert und zur Analyse klassischer Musikstücke (Volkslieder, sowie Teile aus Werken von Bach und Beethoven) benutzt („Materialien zur Musiklehre“, Heidelberg, 1925).

Die Goldschmidtschen Regeln zur Musikkunde wurden von D. Baeumer (1984) in ihrer Dissertation sehr ausführlich und kritisch diskutiert.

(ii) An die Untersuchung der Harmonie der Töne schloss Goldschmidt Erörterungen über die Harmonie der Farben an („Farben in der Kunst“, 1919).

Obwohl die Fraunhoferschen Linien des Sonnenspektrums von verschiedenen Elementen herrühren, lassen sie sich überraschend gut durch N_3 (wiederum ohne $2/3$ und $3/2$) mit der zuvor bereits benutzten Transformation $(2p+1)/(p+1)$ beschreiben:

N_3	0	1/3	1/2	1	2	3	∞
N_3 , transformiert :	1	5/4	4/3	3/2	5/3	7/4	2
Fraunhofersche Linien:	H	F	E	D	C	B	A

Die Wellenlängenverhältnisse, bezogen auf die D-Linie (589.3 nm) als = 1.5 gesetzt, betragen – in recht guter Übereinstimmung – :

1.01	1.24	1.34	1.5	1.67	1.75	1.94
grau	blau	grün	gelb	rot	karmin	braun

In der aufsteigenden Ordnung der Normalreihen sah Goldschmidt die historische Entwicklung des Farbensinns in der Geschichte der Menschheit:

N_0 (Vorzeit)	0 dunkel						∞ hell
N_1 (Urzeit)	0 braun			1 gelb			∞ grau
N_2 (Vorblüte)	0 braun		1/2 rot	1 gelb	2 grün		∞ grau
N_3 (Verfeinerung)	0 braun	1/3 karmin	1/2 rot	1 gelb	2 grün	3 blau	∞ grau

(iii) Die Normalreihe N_3 erweist sich auch geeignet, die Abstände der Planeten von der Sonne zu beschreiben („Über Harmonie im Weltraum“, 1906).

Mit Sonne und Weltraum als Endknoten „0“ und „ ∞ “ ergibt sich für die äußeren Planeten die folgende Reihe (darunter: die Verhältnisse der Abstände bezogen auf Saturn =1):

Sonne	Jupiter	Saturn	Uranus	Neptun	Pluto	Weltraum
0	1/2	1	2	3	4	∞
	0.54	1	2.01	3.15	4.15	

und für die inneren Planeten, mit Sonne = 0 und Jupiter = ∞ , bezogen auf Erde = 1 :

Sonne	Merkur	Venus	Erde	Mars	Jupiter
0	1/3	2/3	1	3/2	∞
	0.39	0.72	1	1.52	

Es sei betont, dass sich der Abstand des später, nämlich erst 1930, entdeckten Pluto recht gut in die Goldschmidtsche Reihe einfügt (was für die „klassische“ Bode-Titius-Reihe absolut nicht zutrifft).

(5) Unter den weiteren Arbeiten Goldschmidts sei, neben verschiedenen Untersuchungen über Zwillingsbildung, das mit A. Fersman publizierte Buch „Der Diamant“ hervorgehoben,

in welchem der morphologische Nachweis „einer schwachen Hemiedrie“ (-43 statt m-3m) erbracht wird.

Das Werk Goldschmidts fand weniger in Deutschland als vielmehr im Ausland Beachtung. Seine Verdienste wurden gewürdigt durch zahlreiche Mitgliedschaften in – vorwiegend ausländischen – „Akademien der Wissenschaften“ sowie Ehrenmitgliedschaften in – vorwiegend ausländischen – wissenschaftlichen Gesellschaften. A.E. Fersman, der von 1907 bis 1909 in Heidelberg weilte, hatte Gelegenheit, Einblick in die Heidelberger Universitäts-Kreise zu gewinnen und beschreibt in seinem Nachruf (1959), wie Goldschmidt – maßgeblich durch den Einfluss des streng protestantischen Harry Rosenbusch und im Klima einer schon damals antisemitischen Atmosphäre – von allen offiziellen Ämtern ferngehalten wurde. Trotz weltweiter Anerkennung wurde ihm von der Universität lediglich eine Assistentenstelle zur Verfügung gestellt.

In allen Erinnerungen von Zeitgenossen und in Nachrufen wird die menschliche Größe und Humanität Goldschmidts, sowie seine Güte und Hilfsbereitschaft hervorgehoben. Jedem seiner Schüler widmete er persönliche Zuwendung, indem er beispielsweise oft schon ab 6 Uhr morgens in seiner Villa mit seinen Doktoranden am Mikroskop saß.

Bis ins hohe Alter war er der Mineralogie verbunden. Hierfür spricht beispielsweise, dass Will Kleber im Rahmen seines Mineralogie-Studiums in Heidelberg, 1927 - 1931, Goldschmidts Schüler war. Ab 1931 (Goldschmidt war 78 Jahre alt !) hat Kleber eine Tätigkeit als Hilfsassistent bei Goldschmidt wahrgenommen (Wondratschek, 1971). Wenn sich Kleber 1936 mit einer Arbeit über die Beziehung zwischen Morphologie und Kristallstruktur habilitierte, dürfte dies auf den Einfluss Goldschmidts zurückzuführen sein.

Mit 70 Jahren, 1923, schreibt er im Schlusswort des neunten und abschließenden Bandes seines „Atlas der Kristallformen“ : „Und wenn ich am Abend des Lebens dies Werkzeug betrachte, so möchte ich die Hände nicht in den Schoß legen. Auf den Abend folgt die Nacht, und es ist eine einzigartige Freude, in die stille Nacht hinein zu arbeiten, bis das Öl in der Lampe ausgebrannt ist und sie erlöscht. Dann gehen wir friedlich zur Ruhe.“

Mein besonderer Dank gilt Frau Prof. D. Lattard (Heidelberg) für die Anregung zu diesem Artikel und die Bereitstellung zahlreicher Unterlagen. – Sehr ausführliche Angaben zum Leben Goldschmidts finden sich in der Dissertation von Frau C. Schlichtenberger.

Literatur:

BAEUMER, D.: Victor Goldschmidts Harmonielehre der Kristalle. Verlag für systematische Musikwissenschaft, Bonn, 1984.

BERDESINSKI, W.: Victor Goldschmidt 1853 - 1933. In: Semper Apertus (Festschrift 600 Jahre Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg), Bd.II, 1985, 506 - 515.

BUERGER, M.J.: The law of complication. Americ. Mineralogist **21**, 1936, 702 - 714.

FERSMAN, A.E.: Victor Goldschmidt. Fortschr. Miner. **37**, 1959, 207 - 212.

GOLDSCHMIDT, V. Liste seiner 177 Veröffentlichungen (bis 1928). In: Festschrift zum 75. Geburtstag von Victor Goldschmidt, herausgegeben von H. Himmel, 1928.

LATTARD, D.: Ein Rückblick auf 150 Jahre Geschichte der Mineralogie an der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg. Berichte der DMG, Beih. z. Eur. J. Mineral. Vol. **13**, 2001, No.1, 1-14.

RÖSLER, H.J.: Der Kristallograph Victor Goldschmidt. Veröffentlichungen der Bibliothek "Georgius Agricola" der TU Bergakademie Freiberg, Nr. 137, 2004.

SCHLICHTENBERGER, C.: Die Ordnung der Welt, die Sammlungsgrammatik Victor Goldschmidts. Centaurus, Pfaffenweiler, 1998.

WONDRATSCHEK, H.: Will Kleber †. Fortschr. Miner. **48**, 1971, 175 - 185.

Horst Küppers, Kiel

SPEKTROSKOPIE IN WIEN

6th EMU School Spectroscopic Methods in Mineralogy, 30.8. - 8.9.2004
5th European Conference on Mineralogy and Spectroscopy (ECMS), 4. - 8.9.2004

Unter der Schirmherrschaft der European Mineralogical Union (EMU) werden seit geraumer Zeit regelmäßig Schools über ausgewählte Kapitel der Mineralogie veranstaltet, wobei es Ziel ist, die Breite dieses Wissensgebietes zwischen Feldbeobachtung und Labor, physikalischen und chemischen Eigenschaften von Mineralen und verwandten anorganischen Verbindungen, Materialcharakterisierung in Theorie und Praxis bis zur technische Anwendung darzulegen. Der Bogen spannt sich dabei vom Realbau der Kristalle, über Umweltmineralogie und Petrographie bis hin zur Kristallographie. Zuletzt war Spektroskopie der Schwerpunkt. Die 6th EMU School wurde überschrieben mit "Spectroscopic Methods in Mineralogy" und fand vom 30. August bis zum 8. September 2004 in Wien, Österreich, statt. In diese School war die "5th European Conference on Mineralogy and Spectroscopy (ECMS)" vom 4. bis zum 8. September 2004 eingebunden. Die Organisation von School und Tagung wurde zur Gänze von Mitarbeitern des Instituts für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien getragen, die wissenschaftliche Leitung lag in den Händen von PROF. DR. ANTON BERAN und PROF. DR. EUGEN LIBOWITZKY. Als Tagungsort diente das Geozentrum der Universität Wien, das durch die Weitläufigkeit des modernen Baus und die gute Anbindung an das Stadtzentrum durch öffentliche Verkehrsmittel sich wieder einmal als nahezu ideal für eine derartige Veranstaltung erwies.

Konventionelle Untersuchungen der Kristallstruktur mittels Beugungsmethoden geben Auskunft über den Aufbau der kristallisierten Materie. Dabei wird allerdings über zahlreiche Phänomene gemittelt, da von einer im Prinzip unbegrenzten Periodizität ausgegangen wird. Zunehmend wird es auch für technologische Fragestellungen wichtig, über Fehlernordnungen Information zu erhalten. Physikalische Eigenschaften werden vielfach über Defektstellen kontrolliert. Spektroskopische Methoden ermöglichen die Untersuchung lokaler Symmetrie, Besetzung, Koordinationszahl, Valenz, Fehlstellen, u.s.w. im Gitterbau Kristalls. Spektroskopische Untersuchungen lassen also Details eines Kristallaufbaues bzw. dessen Realstruktur erkennen. Dementsprechend groß war das Interesse an diesen Veranstaltungen. Die Teilnehmer kamen aus 23 Ländern, insbesondere seien die zahlreichen Gäste aus Italien, Deutschland und Frankreich genannt, aber auch Wissenschaftler aus Schweden, Finnland, Portugal und selbst aus den USA und Australien scheuten die weite Anreise nicht. Kollegen aus finanziell schwächer gestellten Staaten (so z.B. aus Polen, Rußland und der Ukraine) konnten dank der gewährten Subventionen finanzielle Unterstützungen gewährt werden, die ihnen das Kommen erleichterte. Die Zusammenarbeit mit einem EU Projekt ermöglichte zahlreichen Studenten aus Griechenland, Italien, Polen, Rumänien und Ungarn die Reise nach Wien. Auch aus anderen Staaten war der Anteil an Studenten erfreulich groß.

Zur Untersuchung stehen heute eine Reihe von Methoden zur Verfügung, die wesentlichsten sind: Infrarot Spektroskopie, Raman Spektroskopie, Lumineszenz, UV-VIS-NIR Spektroskopie, Röntgenabsorptionsspektroskopie (XANES und EXAFS), Elektronenspinresonanz, Kernspinresonanzspektroskopie oder Mössbauerspektroskopie. Bei all diesen Methoden wird die Wechselwirkung zwischen Strahlung und der zu untersuchenden Probe analysiert. Fast das gesamte Spektrum der elektromagnetischen Strahlung wird verwendet, um Auskunft über chemische Bindungen zu erhalten, aber auch zur Lösung struktureller Detailprobleme oder zur Bestimmung der Kationenverteilung oder Valenz von Kationen genutzt. Ziel der EMU School war es, einen Überblick der wesentlichsten heute zur Verfügung stehenden Unter-

suchungsmethoden, deren Möglichkeiten und Grenzen vorzustellen. Die Teilnehmer an der School sollten in die Theorie und Praxis eingeführt werden. Es wurde zuerst eine theoretisch gehaltene Einführung gegeben. Darüber erläuterten aktuelle Beispiele die Anwendungsmöglichkeiten der vorgestellten Methoden. Die ersten fünf Tage waren den einzelnen spektroskopischen Methoden selbst gewidmet. Nach einer Einführung in die Theorie und Anwendung der jeweiligen Strahlungsart sowie deren Wechselwirkung mit der Materie erfolgte stets eine Erörterung der theoretischen, mathematischen und physikalischen Grundlagen für den Aufbau der jeweiligen Instrumente sowie der Meß- und Auswerteverfahren. Als Vortragende konnten folgende Kollegen gewonnen werden:

C.A. GEIGER (Kiel)	‘Introduction to spectroscopy’, Spectroscopy review: garnets‘
L. NASDALA (Mainz)	‘Luminescence techniques’, ‘Raman spectroscopy’
M. WILDNER (Wien)	‘Optical spectroscopy’
A. BERAN (Wien), E. LIBOWITZKY (Wien)	‘Infrared spectroscopy’
G. AMTHAUER (Salzburg), C. MCCAMMON (Bayreuth)	‘Mössbauer spectroscopy’
M. FECHTELKORD (Bochum), S. KOHN (Bristol)	‘NMR spectroscopy’
L. GALOISY (Paris), A. MOTTANA (Rom)	‘XAS spectroscopy’

Allen, die durch ihren großartigen Einsatz zum Gelingen der School beigetragen haben, sei an dieser Stelle sehr herzlich gedankt.

Mit diesem Grundwissen ausgestattet ging es dann zum zweiten und speziellen Teil. Es stießen zusätzlich einige mit der Spektroskopie vertraute Wissenschaftler dazu, sodaß letztlich 155 Teilnehmer insgesamt gezählt werden konnten. Ziel dieses Teils der Veranstaltung war es, einerseits einen regen wissenschaftlichen Austausch im Rahmen der ECMS zu ermöglichen, andererseits dem jungen Publikum einen Einblick zu geben, wie und wozu man das eben gelernte anwenden kann. Anhand einer großen Fülle an Beispielen konnten die Möglichkeiten aber auch die Probleme und Grenzen der spektroskopischen Methoden demonstriert werden. Die Schwerpunkte wurden in vier Plenarvorträgen gelegt:

H. KUZMANY (Wien)	‘Raman and optical spectroscopy for structural analysis on nanomaterials’
P. SAINCTAVIT (Paris)	‘Strength of polarisation dependent X-ray absorption in mineralogy: application to the colour of gemstones and to paleomagnetism’
J.F. STEBBINS (Stanford)	‘Measuring the state of order in silicate minerals and glasses: solid-state Nuclear Magnetic Resonance’
A. WOODLAND (Frankfurt)	‘Applications of Mössbauer spectroscopy in mantle petrology’

Die Teilnehmer stellten begleitend ihre Forschungsergebnisse in sieben Mikrosymposien vor, eines jeweils vormittags bzw. nachmittags. Parallelveranstaltungen wurden dabei bewußt vermieden um die Möglichkeit zu gewährleisten, daß alle Vorträge auch gehört werden können. Bei einem kleinen Kreis wie in diesem Fall ist es durchaus machbar. Weitere Beiträge wurden als Poster präsentiert; die Zeitspanne von jeweils zwei Stunden wurde dafür nachmittags intensiv genutzt. Bei Kaffee und Tee sowie dem einen oder anderen Glas Wein und Bier ergaben sich lebhaft und interessante Diskussionen. Die Zusammenfassungen der 99 einzelnen Beiträge wurden in den “Mitteilungen der Österreichischen Mineralogischen Ge-

sellschaft" (Band 149) gedruckt. Ausführliche Originalarbeiten werden in einem Sonderheft der Zeitschrift 'Mineralogy and Petrology' erscheinen.

Neben dem wissenschaftlichen Programm wurde auch für das leibliche Wohl der Teilnehmer gesorgt. So gab es eine Ice-Breaker-Party in der Universität zur Eröffnung. Der für Wien charakteristische Heurigenbesuch durfte natürlich auch nicht fehlen. Zu Beginn der ECMS überbrachte E. TILLMANNS während der Opening Ceremony die Grußadressen der Universität Wien, der Fakultät für Naturwissenschaften und Mathematik der Universität, sowie der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft. Bei der anschließenden Welcome Party wurden die Teilnehmer auch mit den neu eingetroffenen Gästen in entspannter und geselliger Atmosphäre rasch bekannt. Die Einbindung aller in den bereits gewohnten Tagesablauf erfolgte somit unkompliziert. Großen Anklang fand auch das allgemein als Höhepunkt des geselligen Beisammenseins empfundene Conference Dinner. Der unmittelbaren Nähe des Geozentrums der Universität zur Wirkungsstätte von Franz Schubert wurde durch ein Orgelkonzert in der Lichtentaler Kirche Rechnung getragen, sodaß auch der künstlerische Aspekt nicht zu kurz kam.

Im Rahmen jeder EMU School wird ein Handbuch mit gleichlautendem Titel herausgegeben. Die Vortragenden wurden und werden stets gebeten einen Artikel als Begleittext zu verfassen. Es soll einerseits das Basiswissen als Manuskript vorliegen und durch zahlreiche Beispiele bereichert werden. Andererseits werden auch ergänzende Kapitel angestrebt. Die einzelnen Beiträge werden international referiert. Von den wissenschaftlichen Leitern der Tagung wird das Buch editiert. Die preiswerte Schriftenreihe richtet sich einerseits als Nachschlagewerk an den erfahrenen Wissenschaftler, andererseits bietet sie für Forschungsvorhaben mit einer neuen Methode eine wichtige Einstiegshilfe. Bisher sind erschienen (Details sind unter der homepage <http://www.univie.ac.at/Mineralogie/EMU/> verfügbar):

Vol. 1 (1997): "Modular Aspects of Minerals", S. MERLINO ed., 448 Seiten

Vol. 2 (2000): "Environmental Mineralogy", D.J. VAUGHAN & R. WOGELIUS eds., 434 Seiten

Vol. 3 (2001): "Solid Solution in Silicate and Oxide Systems of Geological Importance", C. GEIGER (Kiel, Germany), ed., 466 Seiten

Vol. 4 (2002): "Energy Modelling in Minerals", C.M. GRAMACCIOLI, ed., 425 Seiten

Vol. 5 (2003): "Ultra-high Pressure Metamorphism", D.A. CARSWELL & R. COMPAGNONI eds., 508 Seiten, eine CD-ROM mit zusätzlichen farbigen Abbildungen (F. ROLFO ed.) liegt bei

Vol. 6 (2004): "Spectroscopic Methods in Mineralogy", A. BERAN & E. LIBOWITZKY, eds., 659 Seiten

Es war sicherlich anfänglich ein Experiment, die EMU School mit einer internationalen Tagung zu verbinden, da der Kreis der Interessenten prinzipiell verschieden ist. Erwartet man zu einer School Teilnehmer, die sich erst mit einer neuen Methode vertraut machen wollen, wird eine Tagung primär von Wissenschaftlern besucht, die seit längerer Zeit aktiv in einer speziellen Disziplin arbeiten. Der überaus gute Erfolg erlaubt es retrospektiv diese Kombination als sehr positiv zu bewerten. Es ist nicht zuletzt eine sehr berechtigte Tradition an Universitäten, daß gerade die ersten einführenden Lehrveranstaltungen von den erfahrendsten Universitätslehrern gehalten werden. Der umfassende Überblick des Vortragenden ermöglicht es erst soweit zu vereinfachen und trotzdem wissenschaftlich korrekt zu bleiben, daß der Anfänger dem Unterricht problemlos folgen kann. Es gehört wohl zu den größten Anforderungen an einen Vortragenden, daß trotz starker Vereinfachung eines wissenschaftlichen Sachverhaltes auch ein kritischer Fachkollege an keiner Stelle des Vortrages Einwendungen bezüglich einer

sachlich unrichtigen Abhandlung des vorgestellten Themas haben kann. Durch das Zusammentreffen von Studenten und arrivierten Fachkollegen konnten bei diesen Veranstaltungen Interessen geweckt sowie Theorie und Praxis in geradezu idealer Weise verbunden werden.

Von den Teilnehmern wurde die gesamte Veranstaltung im Allgemeinen als wissenschaftlich überaus informativ eingestuft und darüber hinaus als sehr angenehm empfunden, wobei natürlich die Nähe zu den vielen Sehenswürdigkeiten von Wien das ihre dazu beigetragen hat. Es war eine eindrucksvolle Veranstaltung mit vielen sehr schönen wissenschaftlichen Ergebnissen, fruchtbaren Diskussionen und neuen Bekanntschaften. Für junge Kollegen, sei es noch während des Studiums oder gerade auf den allerersten Stufen einer wissenschaftlichen Karriere ist es ungemein wichtig mit arrivierten Wissenschaftlern zusammenzutreffen. Wir freuen uns auf die nächsten EMU Schools:

2005: 'Mineral behaviour at extreme conditions' (Heidelberg, Organisator: R. MILETICH)

2006: 'Technical mineralogy: silicate based materials' (Fribourg, Organisator: B. GROBÉTY)

Herta Effenberger, Wien

KÖLNER TAGUNGSSTATISTIK

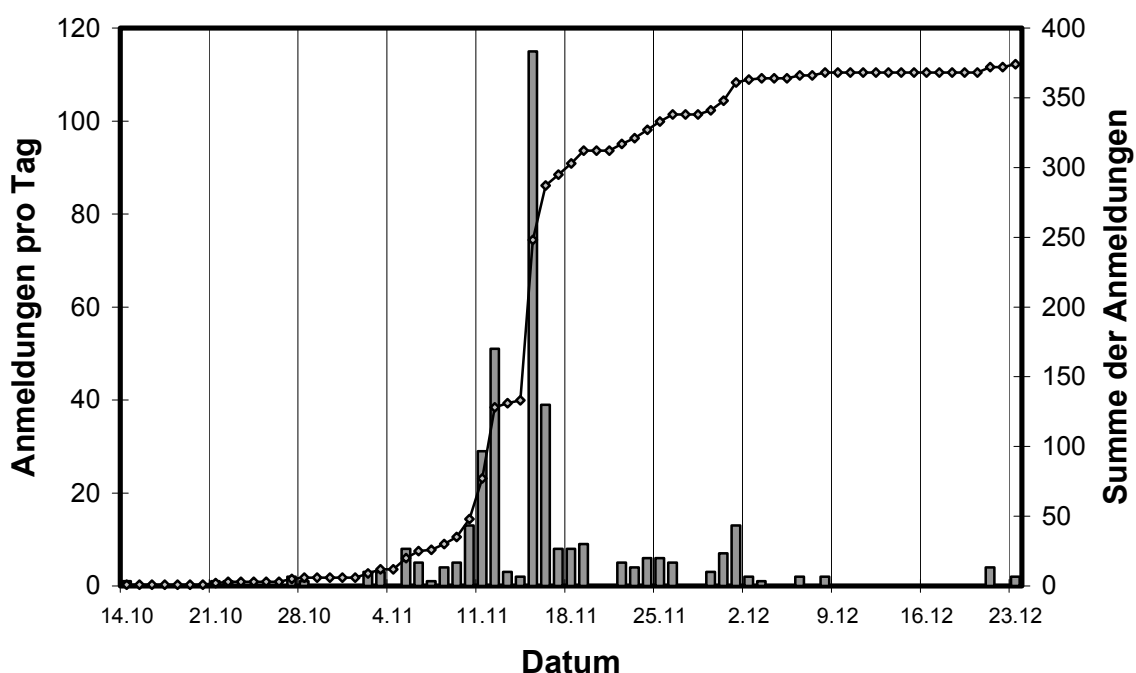
Wie üblich möchten die Tagungsorganisatoren einen kleinen Überblick über die Zahlen und Fakten der Kölner Frühjahrstagung geben.

Die Tagung war mit 510 angemeldeten Teilnehmer aus 13 Ländern gut besucht. 64 Teilnehmer kamen aus dem nahen und fernen Ausland (Österreich: 29; Schweiz: 17; USA: 4; Spanien: 3; Großbritannien, Niederlande, Tschechien je 2; Kanada, Frankreich, Irland, Russische Föderation, Schweden je 1). Mit einem Anteil von ca. 20% waren Frauen deutlich unterrepräsentiert.

Das wissenschaftliche Programm teilte sich in 145 Vorträge (Plenarvorträge: 8, Max von Laue-Preisträgervortrag: 1, Themenschwerpunkte 95, Arbeitskreise: 18, DGKK: 23) und 259 Poster (Themenschwerpunkte: 80, Arbeitskreise: 167, DGKK: 12). Über 20 wissenschaftliche Beiträge wurden sowohl als Vortrag wie auch in form eines Posters präsentiert. Die beitragsgrößte Gruppe war – wie seit vielen Jahren – der Themenbereich Kristallchemie mit 83 Postern.

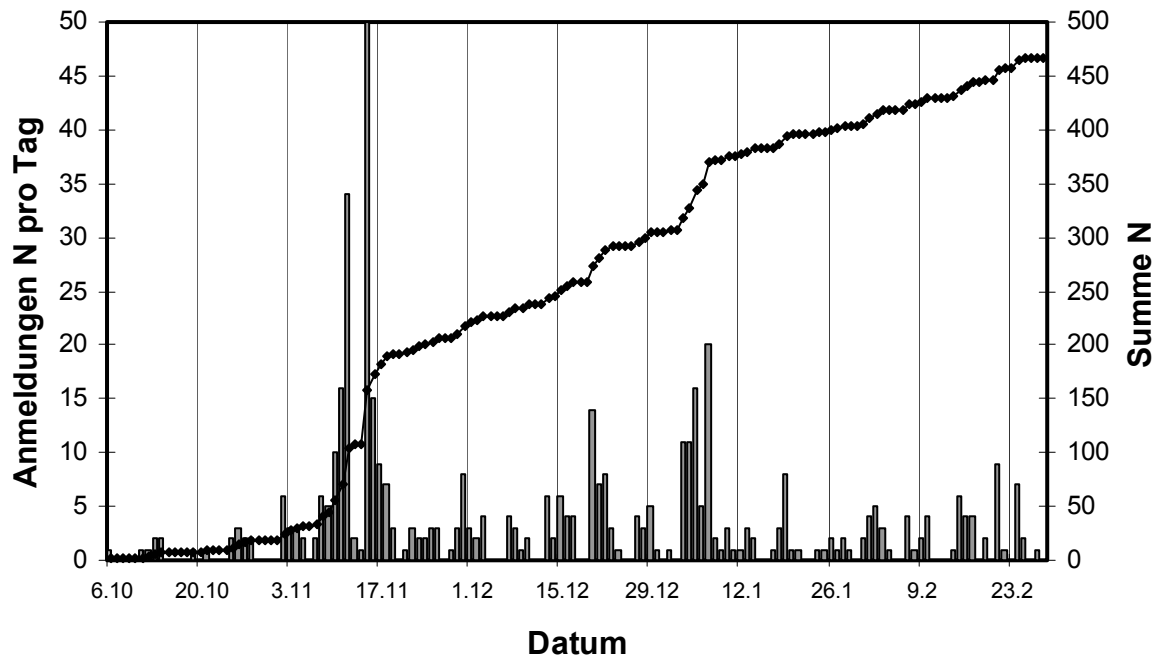
Erfreulich für die Tagungsorganisatoren war die hohe Zahl von 75% von Beiträgen, die vor dem Anmeldeschluss eingereicht worden waren.

Verlauf der Beitragsanmeldungen



Fast 80% der 395 Abstracts waren nahezu tadellos – wenn man von unterschiedlicher Zitierweise absieht. Ungefähr 12% der „zu bemängelnden“ Beiträge konnten mit einer kurzen Email abgeklärt werden. Der Rest bedurfte einer mehr oder minder intensiven Nacharbeit. Wir bedanken uns für die gute Zuarbeit!

Verlauf der Teilnehmeranmeldung



(ohne 8 Vortragende und 35 Vorortanmeldungen)

Ein Blick auf die Teilnehmeranmeldung zeigt eine eher schleppende Anmeldung. Für zukünftige Tagungen möchten wir zu Bedenken geben, dass die Organisatoren bereits sehr früh die ungefähre Teilnehmerzahl wissen müssen (z.B. für den Druck des Abstractbandes etc.).

Noch eine Notiz am Rande:

Ungewöhnlich für Köln war die Tagesdurchschnittstemperatur von -2°C während der Tagung.

Das Organisationsteam
DGK-, DGKK- & NK-ÖAW-Tagung
Köln 2005

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN:

FEHLER, FALLEN UND PROBLEME IN DER EINKRISTALLSTRUKTURANALYSE

2. Kieler Workshop vom 1. bis 5. August 2004

Nach wie vor die wahrscheinlich wichtigste Methode zur Strukturbestimmung in der Chemie ist die Einkristallstrukturanalyse. Zunehmend den Händen weniger Experten entglitten wird diese mittlerweile in vielen Arbeitskreisen routinemäßig eingesetzt, ohne dass ein spezialisierter Kristallograph zu Rate gezogen werden muss. Diese Entwicklung führt nicht nur dazu, dass sich die Anzahl der Strukturanalysen vervielfältigt hat, sondern es besteht auch leichter die Gefahr, dass Fehler vom ungeübten Nutzer nicht erkannt werden oder eigentlich lösbare "Problemstrukturen" unnötig aufgegeben werden. Diesen Problemen entgegenzuwirken war das Ziel des "2. Kieler Workshops über Fehler, Fallen und Probleme der Einkristallstrukturanalyse", der – organisiert von Dr. Christian Näther – vom 1. bis 5. August 2004 stattfand.

Das Besondere des Kieler Kurses besteht darin, dass im Gegensatz zu den meisten Vorlesungen und Kursen zur Kristallstrukturanalyse nicht die Betrachtung theoretischer Zusammenhänge im Vordergrund steht, sondern das Erkennen und Lösen von Problemen anhand von praktischen Beispielen gelernt wird. Alle Teilnehmerinnen und Teilnehmer des diesjährigen Workshops (in verschiedensten Stadien der Ausbildung von Diplomanden über Doktoranden bis zu festangestellten Mitarbeitern von Serviceabteilungen) führen Röntgenstrukturanalysen in ihren Einrichtungen selbständig durch und waren somit gespannt, alles über "Fehler, Fallen und Probleme", die diese Methode mit sich bringt, zu erfahren. Die Erwartungen sollten nicht enttäuscht werden: In straffem Programm wurden sämtliche Schritte einer Strukturanalyse von der Datensammlung bis zur Auswertung der Strukturen behandelt, wobei das Hauptaugenmerk auf Fehler und Fallen gelegt wurde, die bei der Strukturlösung und -verfeinerung auftreten können. Aber auch andere Aspekte, wie z.B. Verzwilligungen wurden angesprochen. Gerade dieses Thema bereitete vielen Teilnehmern erhebliches Kopfzerbrechen, aber umso größer war dafür die Freude, wenn das richtige Zwillingsgesetz schließlich gefunden war und die Güteparameter in den Keller sausten. Die einzelnen Abschnitte wurden von den Dozenten Dr. Christian Näther (Universität Kiel) und Dr. Michael Bolte (Universität Frankfurt/Main) durch kurze Vorlesungen eingeleitet, den Hauptanteil der Zeit bildeten jedoch die Übungen, in denen Probleme aus der Praxis von den Teilnehmerinnen und Teilnehmern selbständig oder bei Bedarf auch mit Hilfe der Dozenten am PC gelöst wurden. Die noch verbleibenden Fragen konnten dann noch in den sich anschließenden, ausführlichen Seminaren aus dem Weg geräumt werden. Sowohl die Vorlesungen als auch die Übungen sind in einem umfangreichen und sehr informativen Handbuch zusammengefasst, das sicher auch bei zukünftigen Problemen noch nützlich sein wird.

Wie bereits im letzten Jahr zeigte sich Kiel zur Workshopzeit auch in Bezug auf das Wetter von seiner allerbesten Seite. Der Workshop begann am Sonntagabend mit einem gemütlichen Beisammensein im "Storchennest", am Montag konnte man sich bei lauem Sommerabendwetter in der Forstbaumschule, wahrscheinlich einem der schönsten Biergärten Norddeutschlands, zu mehr oder weniger fachlichen Diskussionen inspirieren lassen. Die Lösung der theoretischen Übungsaufgaben am "freien" Dienstagnachmittag ging beim Plätschern der Wellen und praller Sonne am Ostseestrand leicht von der Hand und das gemeinsame Barbecue am Mittwochabend zeigte, dass neben fundierter Kenntnis von Raumgruppen und Symmetriebeziehungen der Austausch mit Fachkolleginnen und -kollegen sicherlich ebenfalls sehr gewinnbringend ist.

Alles in allem ging das praxisorientierte Konzept des 2. Kieler Workshops hervorragend auf und die unzähligen Aha-Effekte während des Kurses werden die eigene Arbeit der meisten Teilnehmerinnen und Teilnehmer sicherlich sehr bereichern. Die Teilnahme an diesem Workshop kann somit auch nachfolgenden Generationen von „Nachwuchskristallographen“ nur wärmstens ans Herz gelegt werden.

Großer Dank gilt daher Christian Näther und Michael Bolte für die ausgezeichneten Vorlesungen und die engagierte Betreuung der Übungen. Christian Näther sei nochmals gedankt für die hervorragende Organisation des Workshops.

Robert Wolf, Universität Leipzig, August 2004

GRUNDLAGEN DER EINKRISTALLSTRUKTURBESTIMMUNG

3. Intensivkurs des AK Chemische Kristallographie der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie und des AK Molekülverbindungen der DGK vom 13. bis 17. September 2004 im Zistersienserklöster Hardehausen

Mittlerweile bereits zum dritten Mal fand der Intensivkurs – Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung in der Zeit vom 13. bis 17. September 2004 statt. Im Jahre 2000 erstmals veranstaltet, wendet sich der - in Form einer Sommerschule abgehaltene - Intensivkurs vor allem an den wissenschaftlichen Nachwuchs, um in Zeiten zunehmender „black-box-Automatisierung“ der Einkristallstrukturanalyse essentielle Grundlagen zu vermitteln.

Das wissenschaftliche Programm umfasst alle Abschnitte einer Kristallstrukturanalyse, beginnend bei der Messung bis hin zur Interpretation der Daten. Diese Inhalte wurden in bewährter Weise durch einzelne Vorträge erläutert, immer wieder unterbrochen von längeren Übungen in kleinen Gruppen, in denen das eben Erlernte vertieft wurde. Bewusst wurde dabei auf den Einsatz von Computern verzichtet, sondern mit Papier und Bleistift gearbeitet. Dennoch geht auch dieser Intensivkurs mit der Zeit. Wurde noch vor vier Jahren bedarfsgemäß ausführlich auf die Besonderheiten der Datensammlung und der anschließenden Datenreduktion mit konventionellen Punktzählerdiffraktometern eingegangen, ergab eine ad-hoc Umfrage unter den 33 Teilnehmern, dass diese ausschließlich moderne Flächenzählerdiffraktometer im Einsatz haben. Entsprechend hat sich auch der Schwerpunkt bei der Messung von Einkristalldaten und insbesondere der anschließenden Auswertung verlagert.

Von besonderer Bedeutung für das Verständnis der kristallographischen Grundlagen ist die Symmetriellehre. Nach den Erfahrungen der Vorjahre wurde diesem Teil noch größeres Gewicht beigemessen. Unter anderem auch durch eine Einführung zur Symmetrie von Punktgruppen, in lockerer Atmosphäre am ersten Abend. Darüber hinaus erscheint es aber angebracht, auf eine intensivere Beschäftigung mit Symmetrie im Chemiestudium, vor allem hinsichtlich der Symmetrie im Festkörper, hinzuwirken. Im weiteren Verlauf des Programms konnte die Funktionsweise der Fouriertransformation am eindimensionalen Beispiel anschaulich nachvollzogen werden und wurde anschließend in Form zweidimensionaler Projektionen an einer realen Kristallstruktur demonstriert. Hierbei konnte die Bedeutung der Auflösung und der Einfluß starker Beugungsintensitäten gezeigt werden. Die Lösung des zentralen Problems der Kristallstrukturanalyse, die Phasenbestimmung, wurde getrennt für die Patterson und die Direkten Methoden diskutiert. An zahlreichen Beispielen konnte die korrekte Interpretation der Pattersonfunktion geübt werden, einschließlich einiger „Kopfnüsse“, wie der simultanen Bestimmung von zwei Schweratomlagen. Wenig Begeisterung lässt sich im allgemeinen für die komplexe Mathematik der direkten Methoden erzielen. Trotzdem bietet die längst als historisch einzustufende symbolische Addition eine Methode, auf deren Basis auch mit Papier und Bleistift eine direkte Phasenbestimmung möglich ist und die statistische Abhängigkeit von Amplitude und Phase der Strukturfaktoren begreifbar wird.

Einer kurzen Einführung in die Grundlagen der least-squares-Verfeinerung folgte eine ausführliche Behandlung der typischen Programm Ein- und Ausgabe unter besonderer Berücksichtigung von a priori Randbedingungen (Constraints und Restraints), dem Problem von Fehlordnung sowie der speziellen Behandlung der Wasserstoffatome. Ergänzt wurde dieser Teil des Kurses von einer Betrachtung der häufigsten Zwillingsprobleme, die zunehmend an Bedeutung gewinnen.

Der letzte Vormittag war dann der (Fehl-) Interpretation von Kristallstrukturen gewidmet. Hier gaben seltsame anisotrope Auslenkungsparameter (Temperaturrellipsoide) und ungewöhnliche Koordinationsgeometrien den Teilnehmern Gelegenheit, das in den ersten vier Tagen Erlernte als „Strukturdetektive“ anzuwenden.

Zum großen Erfolg der Veranstaltung (mein Eindruck nach Auswertung der Fragebögen) trugen auch wieder die hervorragende Atmosphäre des Tagungsortes, das ehemalige Zistersienserkloster Hardehausen südlich von Paderborn, und das Rahmenprogramm bei. Letzteres umfasste neben dem schon erwähnten Symmetrieabend eine Wanderung durch das umliegende Eggegebirge und zwei Volleyballabende für den körperlichen Ausgleich. Wer noch weitere geistige Nahrung wünschte, dem bot eine Abendveranstaltung mit Problemstrukturen und eine Einführung in die Cambridge Datenbank alternative Betätigungsfelder. Gemeinsam traf man sich dann wieder in der Bierschwemme, um bei lokalem Gebräu den Tag ausklingen zu lassen.

Dieser Bericht darf nicht enden, ohne den übrigen Mitwirkenden und unseren Sponsoren meinen besonderen Dank auszusprechen. Die Vorträge wurden in engagierter Weise von M. Bolte (Frankfurt), U. Englert (Aachen), U. Flörke (Paderborn) und P. Jones (Braunschweig) gehalten, die alle auch noch persönlich eine Übungsgruppe betreut haben. In letzterer Funktion wurde unser Team durch M. Nieger (Bonn) ergänzt, der erstmalig dabei war und wie wir alle von der Begeisterung für die Sommerschule angesteckt worden ist. Gespannt freuen wir uns auf den vierten Intensivkurs 2006.

Christian W. Lehmann (Mülheim an der Ruhr)

AK MIKROSKOPIE

Aktivitäten für 2005

- Fortbildung auf dem Gebiet der messenden Mikroskopie durch je ein Rundtischgespräch und ein Workshop.
- Neu- und Weiterentwicklung mikroskopischer Untersuchungs- und Auswerteverfahren besonders auf dem Gebiet der messenden Polarisationsmikroskopie.
- Entwicklung eines Fehlerkatalogs über Fehlerquellen und deren Behebung im Rahmen der messenden Mikroskopie gemeinsam mit dem Arbeitskreis „Mikroskopie der Kunststoffe und Kunststoffverbunde“ der DGM.

Veranstaltungen für 2005:

Ende April: Rundtischgespräch des Arbeitskreises in Jena mit anschließendem Workshop

„Messung optischer Daten mit dem Mikroskop“

In der Veranstaltung werden keramische, metallische, polymere und biologische Materialien behandelt. Eigene Proben können zu der Veranstaltung mitgebracht werden. Aus Zeit- und Kapazitätsgründen sollten diese für die Untersuchungen bereits präpariert sein. Die Veranstaltung ist für die Arbeitskreismitglieder kostenlos.

Interessenten (auch Nichtarbeitskreismitglieder) melden sich per E-Mail bitte direkt beim Sprecher des Arbeitskreises.

Dr. Jörg Trempler
Sprecher des Arbeitskreises 10
Email: joerg.trempler@iw.uni-halle.de

APPLICATION OF SOLID STATE NMR SPECTROSCOPY IN MINERALOGICAL AND GEOSCIENCES RESEARCH

Shortcourse des AK NMR Spektroskopie vom 17.-20.5.2005 in Bochum

Under the initiative and guidance of PD Dr. Michael Fechtelkord, the workshop of NMR spectroscopy took place at the Institute for Geology, Mineralogy and Geophysics at the Ruhr University in Bochum from 17-20th May.

The topic of solid state NMR attracted a group of about 10 people of different nationalities, from different universities (Hamburg, Innsbruck, and Bochum), federal research centres (BAM and GFZ Berlin), and even from the industry (PCI Augsburg). Amongst the participants were physicists, chemists, pharmacists, crystallographers and mineralogists.

The starting lecture - a theoretical introduction to the method and its history - was followed by the more extensive basics of ^1H spin-lattice relaxation and an experimental demonstration.

That afternoon, first experiments were carried out by the participants: Temperature dependent measurements of tetramethylammoniumiodide. From that data the activation energy of some molecular-dynamic processes could be obtained. Later on, the first social event – the ice-breaker party - took place, with a lot of interesting interdisciplinary talk.

On the second day basics of magnetic dipolar interactions, of the chemical shift, as well as the routine technique of magic angle spinning (MAS) were presented. In practice, data were collected on minerals containing ^{29}Si , ^{19}F and ^1H .

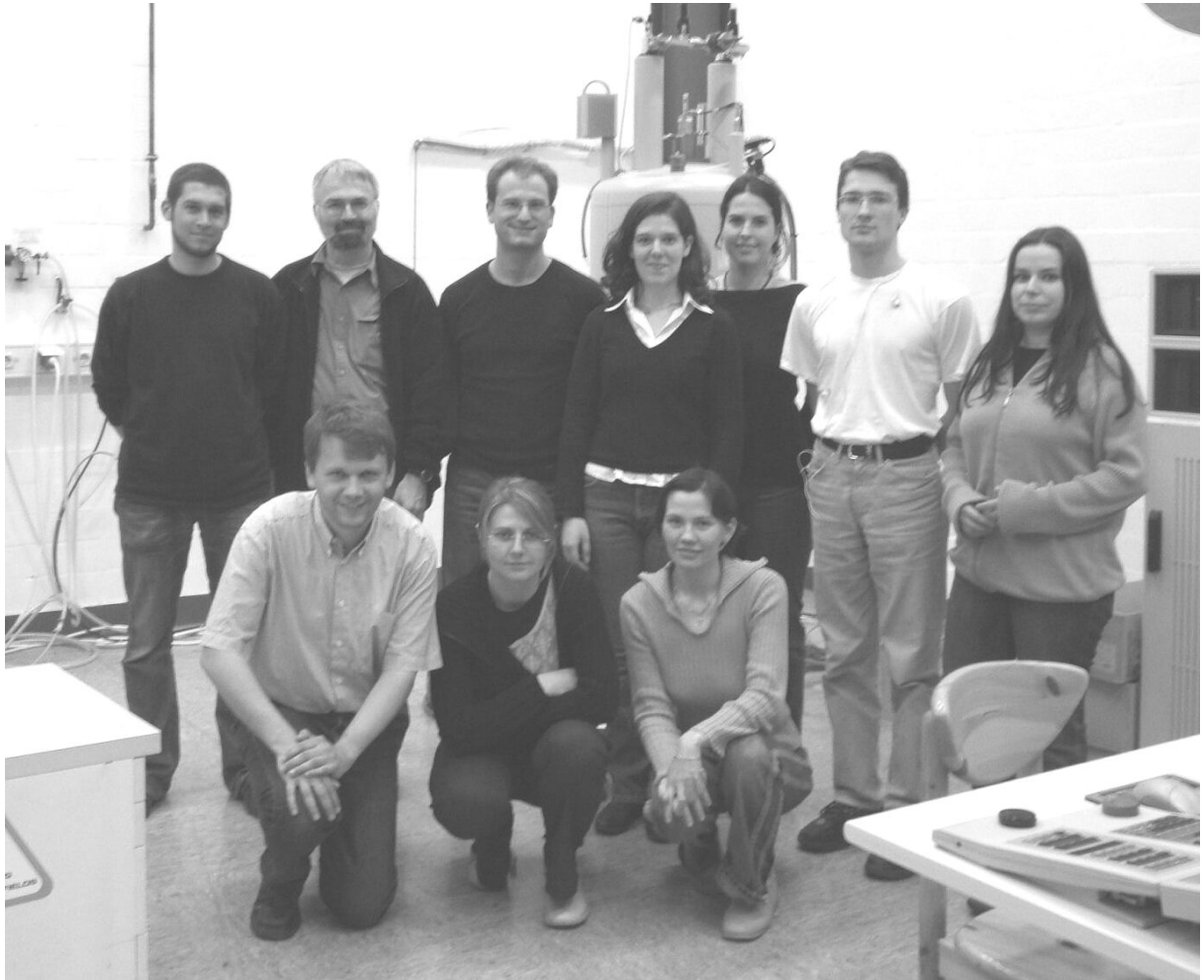
Practical evaluation of the obtained spectra was done using the WinFit software. Starting with basic examples (Lorentzian and Gaussian line shapes) we moved on to more complex cases including anisotropy of chemical shift for static and also MAS data.

The third day was dedicated to more sophisticated methods, such as cross-polarization experiments and the INADEQUATE (Incredible natural abundance double quantum transfer experiment) experiment. After a long afternoon interpreting the data from this day experiments, the course was continued at the “Summa cum laude”, where Michael Fechtelkord has proven that he is also a very skilled lecturer at the “Kegelbahn”. The results of the “skittles-ball-spin-experiments” were ranging from “inadequate” to “magic”.

The third day started with the theoretical basics of quadrupolar interactions of first and second order. Furthermore, most recent methodical developments in solid state NMR spectroscopy were presented: Rotational echo double resonance (REDOR), satellite transition spectroscopy (SATRAS), double rotation (DOR) and Multi-Quantum magic angle spinning (MQMAS). The data – obtained in the accompanying experiments (^{23}Na MAS NMR and ^{27}Al MAS NMR SATRAS) – was evaluated in the afternoon.

The main objectives of the workshop were reached: To give an introduction to the routine NMR techniques, as well as the latest developments in this method. Applications were demonstrated with many interesting examples. Beyond the topic of this course the exchange between scientists and institutions was support.

Biljana Lazic and Hannes Krüger, Innsbruck





AK COMPUTATIONAL CRYSTALLOGRAPHY

März 2004 bis März 2005

- 1) Im Zeitraum vom 27.09. bis zum 01.10.2004 organisierte Björn Winkler in Zusammenarbeit mit Michele Warren und Artem Oganov einen CECAM Workshop in Lyon zu dem Thema *First-Principles Simulations: Perspectives and Challenges in Mineral Sciences*. Der im Rahmen dieser Veranstaltung bearbeitete Themenkreis umfasste
 - i) Probleme im Zusammenhang mit den entsprechenden Näherungsverfahren,
 - ii) Schwierigkeiten bei der Behandlung nicht-periodischer Systeme wie fehlgeordneter fester Lösungen, Defektstrukturen und Grenzflächen,
 - iii) die zur Beschreibung realer Strukturen erforderlichen Dimensionen, sowie
 - iv) Probleme hinsichtlich der Genauigkeiten von Theorien im Zusammenhang mit der Interpretation experimenteller mineralogischer Daten.

Die 27 Beiträge verschiedener Autoren wurden im Band Nr. 14 der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK publiziert.

- 2) Vom 20.02. bis 22.02.2005 organisierte Gerhard Raabe in Aachen ein Workshop zu dem Thema *Molecular Dynamics and Crystallography*, zu dem fünf Hauptredner eingeladen waren. An dem Workshop nahmen 26 Personen teil.
 - i) Robert Jones aus Jülich sprach über die theoretischen Grundlagen von Dichtefunktional Rechnungen und ihre Verwendung zur Parametrisierung von Kraftfeldern.
 - ii) Marc Meunier aus Cambridge berichtete über verfügbare Programme für klassische Simulationen kristalliner Festkörper, sowie über neuere Entwicklungen auf diesem Gebiet, wobei er besonderes Gewicht auf die Berechnung der elektrostatischen Wechselwirkung auf Grundlage von Mono- und Multipol-Näherungen legte.
 - iii) Dominik Marx aus Bochum trug über die Grundlagen der *ab initio*-Molekulardynamik und ihre Anwendungen in der Kristallographie vor. Er verglich im Rahmen seines Vortrags verschiedene dynamische Modelle, die aus der näherungsweisen Behandlung der vollständigen *Schrödinger-Gleichung* für Kerne und Elektronen folgen, wobei die *Car-Parrinello*-Methode im Vordergrund stand.
 - iv) Björn Winkler behandelte im Rahmen seines Vortrags ebenfalls die Grundlagen der DFT-Theorie und ihre Umsetzung in praktische Rechnungen im Bereich periodischer Strukturen. Beispiele ihrer Anwendung betrafen vor allen Dingen die Berechnung der physikalischen Eigenschaften von Nano-Röhren.
 - v) Peter Kroll aus Aachen berichtete über die Anwendung von *ab initio*-Moleküldynamik zur rechnerischen Ermittlung physikalischer Eigenschaften amorpher Festkörper, wobei er besonderes Gewicht auf amorphes Siliziumnitrid, α - Si_3N_4 , und seine Derivate α - $\text{Si}_3\text{B}_3\text{N}_7$, α - SiNO und α - SiC legte.

Von den Teilnehmern trugen zum Abschluss der Veranstaltung vor:

Reinhard Neder (Würzburg, *Simulation of defect structures and diffuse scattering*),

Thomas Bredow (Hannover, *Oxygen defects and nitrogen doping in zirconia: a quantum-chemical study*),

Dirk Lamoen und John Tatini Titantah (Antwerpen, *sp^2/sp^3 characterization of carbon materials from DFT calculations*) und

Nikoly Zotov (Bonn, *Comparison and development of potentials for MD simulations of Fe-Pt alloys*).

Gerhard Raabe, Aachen

KERAMISCHE BIOMATERIALIEN

Am **20. und 21. Oktober 2005** findet am Universitätszentrum Medizintechnik (UZMT) der Ruhr-Universität Bochum der 3. Workshop „*Keramische Biomaterialien*“ des Arbeitskreises 15 (Mineralogische und Technische Kristallographie) der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) statt.

Zur Reparatur von Defekten des menschlichen Körpers werden seit längerer Zeit Biomaterialien eingesetzt, die die gesamte Palette der Werkstoffe umfassen: Metalle, Keramiken, Polymere und Verbundwerkstoffe. Diese Werkstoffe müssen einerseits *biokompatibel* sein, um jegliche zytotoxische Wirkung auf das gesunde umgebende Gewebe zu minimieren. Andererseits müsse sie *mechanisch stabil* sein über Zeiträume von 20 Jahren, und insbesondere Dutzende Millionen von Lastwechseln ermüdungsfrei überstehen. Das sind Eigenschaftsprofile, die an die Obergrenze dessen reichen, was mit heutigen Technologien und Materialien zu erreichen ist. Bei lasttragenden Implantaten, wie Hüft- und Knieendoprothesen, Kieferprothesen, Knochenersatz im maxillar-mandibularen Bereich, und Zahnimplantaten kommen noch hohe Anforderungen hinzu in Bezug auf *chemische Stabilität* und *Dauerhaftigkeit der Grenzfläche* des Implantats zum Gewebe. Eine entscheidende Rolle spielen darüber hinaus die vielfältigen und äußerst komplexen Wechselwirkungen der Biomaterialien mit körpereigenen Proteinen, Enzymen und Wachstumsfaktoren, die eine schnelle und vollständige Integration des Fremdkörpers ‚Implantat‘ ermöglichen. Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Biomaterialien vereint in interdisziplinärer und synergistischer Arbeitsweise den Erfahrungsschatz von Materialwissenschaftlern, Mineralogen, Physikern, Chemikern und Kristallographen, aber auch Biologen, Mediziner und Biochemikern. Der Workshop ist Fortsetzung der sehr erfolgreichen Veranstaltungen im Juni 2002 und Oktober 2003, jeweils in Freiberg.

Der Workshop beginnt am Donnerstag, dem 20. Oktober 2005, 13:00 im Internationalen Begegnungszentrum der Ruhr-Universität Bochum und endet am Freitag, dem 21. Oktober 2005 gegen 17:00. Es werden folgende Sitzungen stattfinden, zu denen Beiträge erbeten werden:

Sitzung A: Biokeramiken: Herstellung, Eigenschaften, Anwendungen I (Vorsitz: Prof. Dr. Robert B. Heimann, Ruhr-Universität Bochum)

Sitzung B: Biokeramiken: Herstellung, Eigenschaften, Anwendungen II (Vorsitz: Prof. Dr. Roger Thull, Universität Würzburg)

Sitzung C: *In vitro* und *in vivo*-Stabilität von Implantatbeschichtungen (Vorsitz: Prof. Dr. Herbert Jennissen, Universität Duisburg-Essen)

Sitzung D: Biologische Wechselwirkungen von Biokeramik und Gewebe (Vorsitz: Prof. Dr. Ulrich Gross, Freie Universität Berlin)

Für Hauptvorträge konnten gewonnen werden:

Prof. Dr. Lech Pawlowski, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille („Modelling of the technological process of plasma spraying of hydroxyapatite and laser treatment of sprayed coatings“) und Frau Prof. Dr. Dörte Stachel, Otto-Schott-Institut für Glaschemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena („Struktur und Eigenschaften kristalliner und glasiger Calciumphosphate“).

Wir würden uns freuen, Ihre Vortrags- oder Posteranmeldung, begleitet von einer maximal zweiseitigen Zusammenfassung, bis zum **30. Juni 2005** elektronisch unter

robert.heimann@ocean-gate.de oder horst.pentinghaus@itc-tab.fzk.de

zu erhalten. Zur Deckung der Unkosten wird ein Betrag von EUR 35,00 erhoben. Dieser Betrag enthält die Kosten für Konferenzmaterial einschließlich Abstraktverzeichnis, Pausenversorgung, sowie ein Mittagsbüffet am 21. Oktober. Zusätzlich wird der Besuch einer Vorführung des Musicals „Starlight Express“ angeboten. Ein begrenztes Kartenkontingent wurde reserviert. Interessenten mögen sich bitte mit dem Sekretariat des UZMT (Frau A. Biesalski, Tel: 0234/32-27209, annette.biesalski@rub.de) in Verbindung setzen. Reservierung eines Hotelzimmers in unmittelbarer Nähe des Konferenzortes ist gleichfalls über das Sekretariat möglich.

Prof. Dr. Horst J. Pentinghaus
Univ.-Prof. Dr. Robert B. Heimann

AK GRENZFLÄCHEN

Im März 2004 wurde durch die Mitgliederversammlung auf der Jenaer Jahrestagung die Gründung des Arbeitskreises Grenzflächen beschlossen. Die konstituierende Sitzung des neuen Arbeitskreises fand am 17. März 2004 ebenfalls noch auf der Jahrestagung in Jena statt. In dieser Sitzung wurde Guntram Jordan (Bochum) zum Sprecher des Arbeitskreises gewählt. Die Zahl der Mitglieder des Arbeitskreises Grenzflächen ist seither auf 25 angewachsen. Als erste Kommunikationsplattform nach außen wurden für den Arbeitskreis Grenzflächen Internetseiten erstellt. Die Seiten werden als Gruppendienst von der Ruhr-Universität Bochum zur Verfügung gestellt. Die Adresse lautet:

<http://www.rub.de/dgk-ak18>

Die Seiten sind auch über die Homepage der DGK zu erreichen. Weiterhin erhielt der Arbeitskreis von der Ruhr-Universität eine Email-Adresse (*dgk-ak18@rub.de*), über die der Sprecher erreichbar ist, der dann wiederum umgehend die Mitglieder des Arbeitskreises informieren kann.

Auf der Kölner Jahrestagung 2005 betreute der Arbeitskreis Grenzflächen gemeinsam mit dem Arbeitskreis Kinetik der DGKK den Themenschwerpunkt „Kinetik und Mechanismen von Grenzflächenreaktionen – 6. Kinetikseminar“. Zu diesem gemeinsamen Symposium lagen insgesamt 28 Beiträge vor. Die Beiträge verteilten sich auf eine Postersession und zwei Vortragssessions. Die Vortragssessions fanden an zentraler Stelle zwischen den einzelnen Kerntagungen der DGK und DGKK statt. Das Symposium konnte daher arbeitskreis- und gesellschaftsübergreifend verschiedene Forschungsansätze erfolgreich zusammenzuführen und war somit sicherlich auch für Nicht-Arbeitskreismitglieder eine interessante Veranstaltung. Um den Teilnehmern des Symposiums ausreichend Möglichkeit und Raum zum Kennenlernen und Diskutieren zu bieten, fand am Abend des Themenschwerpunkts noch ein Postsymposium statt. Da nach Vorträgen meist nur Zeit für eine oder zwei Fragen bleibt, bestand insbesondere auf dem Postsymposium ausreichend Gelegenheit zu einer vertieften Diskussion.

Interessenten an der Kristallographie der Grenzflächen werden gebeten, dem Sprecher eine kurze Email zu schicken, um in das Mitgliedsverzeichnis des AK aufgenommen werden zu können. Als Mitglied des AK werden Sie direkt per Email über die neuesten Aktivitäten des AK informiert. Nichtmitglieder werden gebeten, die Internetseiten des AK zu beachten.

Guntram Jordan, Bochum

ANKÜNDIGUNGEN:

3. Kieler Workshop über

"Fehler, Fallen und Probleme in der Einkristallstrukturanalyse"

des Arbeitskreises "Molekülverbindungen" der DGK in Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis
"ChemKrist" der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh.

vom 17.07.2005 - 21.07.2005

im Institut für Anorganische Chemie der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Kurzübersicht:

Die Einkristall-Röntgenstrukturanalyse ist eine der genauesten und die mit Abstand am weitesten verbreitete Methode zur Bestimmung der Struktur kristalliner Verbindungen. Durch die Entwicklung immer leistungsfähigerer Programme und Geräte können die meisten Strukturbestimmungen heutzutage im Routinebetrieb durchgeführt werden. Dennoch treten immer wieder Probleme auf, die eine Strukturbestimmung erschweren oder gänzlich verhindern. Diese führen dazu, daß ein Kristall entweder gar nicht erst gemessen wird, sich die Struktur nicht lösen läßt oder Probleme bei der Strukturverfeinerung auftreten. Selbst dann, wenn eine Strukturbestimmung anscheinend erfolgreich abgeschlossen worden ist, können sich dennoch Fehler eingeschlichen haben die nur sehr schwer zu erkennen sind. All diesen Problemen möchte sich dieser Workshop widmen. Der Kurs ist daher in die folgenden Themenschwerpunkte gegliedert:

- *Probleme bei der Bestimmung des Kristallsystems, der Laue-Symmetrie und der Raumgruppe*
- *Probleme bei der Strukturlösung*
- *Probleme bei der Strukturverfeinerung*
- *Verzwilligungen*
- *Beurteilung der Güte eines Strukturmodells*

Der Kurs richtet sich in erster Linie an Mitarbeiter, welche im Rahmen ihrer Tätigkeit Strukturbestimmungen selbständig durchführen, unabhängig davon ob diese ausgehend von bereits gemessenen Daten nur die Strukturlösung und -verfeinerung durchführen oder auch für die Datensammlung verantwortlich sind.

Unkostenbeitrag:

Die Teilnahmegebühr am Workshop beträgt 60 € (120 € für Teilnehmer aus der Industrie). Darin enthalten sind die Kosten für die Praktikumsunterlagen, Getränke und Gebäck sowie evtl. ein Zuschuss zum gemeinsamen Grillabend.

Weitere Informationen

Weitere Informationen zum Workshop finden sich auf der Homepage des Arbeitskreises "Chemische Kristallographie" unter der folgenden URL-Adresse:

www.chemkrist.de

Workshop

Jenseits der Röntgenröhre

Chemische Kristallographie unter Einsatz von Großforschungseinrichtungen

HASYLAB / DESY

Hamburg

05. bis 07. September 2005

Veranstalter:

Arbeitskreis Chemische Kristallographie
der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie und
AK Molekülverbindungen der DGK

Themenkomplexe:

- PETRA III
- FRM II
- zeitaufgelöste Kristallographie
- Elektronendichte
- SANS
- Anomale Kleinwinkelstreuung
- EXAFS
- Magnetstrukturen
- Topologie
- Mikro RFA

Weitere Information

<http://www.chemkrist.de>



Neutronenstreuung für Kristallographen

29-30.09.2005 LMU und TU München

Der Kurs soll eine Einführung in die Neutronenstreuung geben mit der speziellen Ausrichtung auf kristallographische Anliegen. Er richtet sich an Studenten, die an Diplom- oder Doktorarbeit arbeiten oder kurz davor stehen, und an alle Wissenschaftler, die einen Einstieg in die Neutronenstreuung suchen. Die Übersicht der vorgestellten Techniken behandelt Pulver- und Einkristall-Beugungsmethoden zur Untersuchung der Kristall- und magnetischen Struktur, inelastische Streumethoden zur Bestimmung von strukturellen und magnetischen Anregungen, sowie die Analyse der diffusen Streuung aufgrund von nur kurzreichweitiger Ordnung. Der Kurs soll die Teilnehmer auch in Hinblick auf praktische Aspekte zum Erlangen der Neutronenmesszeit beraten, also darlegen, wo und wie man Proposals stellen kann. Den Teilnehmern des Ferienkurses wird die Möglichkeit gegeben, ihre eigenen Themenstellungen auf Postern vorzustellen und somit intensiv mit den verschiedenen Experten zu diskutieren. Am zweiten Tag werden Experimentiereinrichtungen im FRM-II besichtigt.

Eine Teilnahmegebühr wird nicht erhoben.

Vorträge :

- | | |
|--|--------------------------------------|
| • Einführung | M. Braden (Uni. Köln) |
| • Pulvermethoden (Kristallstruktur) | R. Gilles (FRM-II) |
| • Pulvermethoden (Magnetismus) | W. Kockelmann (ISIS) |
| • Einkristall-Beugung (Struktur) | H. Boysen (LMU,FRM-II) |
| • Einkristall-Beugung (Magnetismus) | A. Gukasov (LLB) |
| • Inelastische Neutronenstreuung (Phononen) | M. Braden (Uni. Köln) |
| • Inelastische Neutronenstreuung (Magnetismus) | P. Böni (FRM-II) |
| • Diffuse Streuung | F. Frey (FRM-II) |
| • Texturanalyse | H. G. Brokmeier (GKSS, TU Clausthal) |
| • Flugzeitmethoden – weiche Materie | W. Petry (FRM-II) |

Anmeldungen können Sie per e-mail einreichen

(Geben Sie bitte an, ob Sie ein Poster vorstellen möchten):

Prof. Dr. Markus Braden braden@ph2.uni-koeln.de

Internet : opal.uni-frankfurt.de/DGK → Arbeitskreis Neutronen → Aktivitäten

Veranstaltungsort : Institut für Kristallographie LMU München
und FRM-II Garching

6TH AUTUMN SCHOOL ON X-RAY SCATTERING FROM X-RAY SCATTERING FROM SURFACES AND THIN LAYERS

vom 18.9. - 21. 9. 2005 auf Smolenice/Castle in der Westslovakei

Vom 18. bis 21. 9. 2005 findet auf Smolenice/Castle in der Westslovakei die 6th Autumn School on X-ray scattering from X-ray scattering from surfaces and thin layers statt. Wie in den früheren Jahren wendet sich die Schule vor allem an Diplomanden, Doktoranden und junge Wissenschaftler, die dort ihre (auch unfertigen) Arbeiten zu Themen der Röntgendiffraktometrie, - reflektometrie, diffuse Streuung, Röntgenkleinwinkelstreuung u.a. vorstellen können. Zur Einführung werden Tutorials zu Themen der Röntgenstreuung präsentiert. Die Konferenz ist das wichtigste Arbeitstreffen des AK11 der DGK : "Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung" und wird von der DGK finanziell unterstützt.

Details findet man auf der Webseite

<http://kfes-80.karlov.mff.cuni.cz/Smolenice-2005/>

Ullrich Pietsch (im Namen der Organisatoren)

Arbeitskreissprecher:

Dr. Michael Fechtelkord
Institut für Geologie, Mineralogie und
Geophysik
der Ruhr-Universität Bochum
Universitätsstr. 150

D-44801 Bochum

Email: Michael.Fechteltkord@ruhr-uni-bochum.de
Internet: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12>
Telefon: 0234-32-24380
Telefax: 0511-32-14433

Einladung

zum

14. NMR-Workshop des AK 12 - NMR-Spektroskopie

„Strukturelle Identifizierung von Protonen in Mineralen und technischen Materialien mittels ^1H Festkörper NMR Spektroskopie“

vom

06. - 07. Oktober 2005

am

Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum
Universitätsstr. 150, 44801 Bochum

Themen:

- Eigenschaften des ^1H Isotops und typische Wechselwirkungen (Chemische Verschiebung und homonukleare dipolare Wechselwirkung).
- Protonenumgebungen in protonenhaltigen Mineralen – Hydroxyl-, Wasser- und freie Protonen – und deren typische Signalformen und -lagen
- Untersuchungen von technischen Protonenleitern mittels ein- und zweidimensionaler NMR Methoden (2D NOESY)
- Sensitivitätssteigerung des ^1H Signals in stark protonenhaltigen Materialien und Mineralen sowie nominell protonenfreien Mineralen durch Multipulssequenzen in Kombination mit MAS (CRAMPS, MREV-8, BR-24, WAHUHA-4)
- Bestimmung von Protonenabständen in Mineralen und technischen Materialien über die Dipolwechselwirkung (zweites Moment, Pake Dublett)
- Beobachtung und Auswertung von Protonendynamik mittels Festkörper NMR Spektroskopie

Der Workshop umfasst jeweils morgens einen Theorieteil von ca. 2 Stunden. Die Messungen werden anschließend an einem BRUKER ASX 400 Festkörper-NMR Spektrometer durchgeführt und ausgewertet. Grundkenntnisse in der Festkörper Kernspinresonanz-Spektroskopie sind ausreichend.

Infos und Anmeldungen über den AK-Sprecher: Dr. Michael Fechtelkord, Bochum und über das Internet unter: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/indexw.htm>

4TH EUROPEAN CHARGE-DENSITY MEETING (ECDM IV)

vom 25.1. bis 29.1. 2006 in Brandenburg/Havel

Vom 25. bis 29.1. 2006 wird in Brandenburg/Havel das 4th European charge-density meeting (ECDM IV) stattfinden. Diese Konferenz beschäftigt sich mit der Messung und Interpretation von hochaufgelösten Elektronendichteverteilungen in molekularen Kristallen und setzt damit eine Europäische Tradition fort, die mit den Konferenzen in Nancy (Frankreich), Sitges (Spanien) und Sandberg-Esstate (Dänemark) begonnen wurde. Themenschwerpunkte sind deshalb : neue Methoden der Messung , topologische Analyse und vergleichende *ab initio* Berechnungen von experimentellen Ladungsdichten. Immer größere Bedeutung gewinnen dabei Techniken, die Ladungsdichten in angeregten elektronischen Zuständen oder unter Einfluss externer Felder untersuchen.

Die Konferenz wird gleichzeitig als erstes Berichtsmeeting des neuen DFG Schwerpunktsprogramms (SPP 1178) „Experimentelle Ladungsdichten als Schlüssel zum Verständnis chemischer Wechselwirkungen“ genutzt, in dessen Rahmen ca. 30 deutsche Gruppen eine Förderung erfahren.

Bisher gibt es in der DGK noch keinen speziellen Arbeitskreis zu diesem interessanten Themenschwerpunkt. Die Mitglieder des AK6 "Molekülverbindungen" dürften sich aber speziell angesprochen fühlen.

Nähere Angaben zur Konferenz findet man auf der Webseite:

www.roentgen.physik.uni-potsdam.de/ecdm

Ullrich Pietsch (Konferenz Organisator)



Die 14. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie 2006 findet vom

Montag, 3. April (Beginn: 13 Uhr)

bis

Donnerstag, 6. April 2006 (Ende: ca. 14 Uhr)

an der Albert-Ludwigs-Universität in Freiburg/Breisgau (Kollegiengebäude I) statt.

Hierzu laden Sie die veranstaltenden Institute (Kristallographisches Institut, Institut für Anorganische und Analytische Chemie und Institut für Organische Chemie und Biochemie) herzlich ein.

Weitere Informationen finden Sie auf unseren Web-Seiten unter

www.dgk-2006.de



TAGUNGEN UND TERMINE

17. – 21.07.2005 **3. Kieler Workshop über „Fehler, Fallen und Probleme in der Einkristallstrukturanalyse“ des AK Molekülverbindungen der DGK mit dem AK ChemKrist der FG Analytische Chemie der GDCh in Kiel.**
- Kontakt: <http://www.chemkrist.de>
07. – 08.06.2005 **International workshop on crystalline and amorphous alkaline and alkaline-earths silicate hydrates: Relation between structure and properties des FZ Karlsruhe zus. mit dem AK Mineralogische und Technische Kristallographie am FZ Karlsruhe.**
- Kontakt: Prof. Dr. H. Pöllmann (poellmann@geologie.uni-halle.de)
http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG_DGK.htm
23. - 31.08.2005 **XX IUCr Congress in Florenz, Italien.**
- Kontakt: <http://www.iucr2005.it/>
29. - 30.08.2005 **IOth European Conference an Solid State Chemistry hosted by Department of Engineering Materials in Sheffield.**
- Kontakt: <http://www.sheffield.ac.uk/materials/ecssc/>
05. – 07.09.2005 **Workshop „Jenseits der Röntgenröhre“ des AK Molekülverbindungen der DGK gemeinsam mit der FG Analytische Chemie der GDCh im HASYLAB/DESY in Hamburg.**
- Kontakt: <http://www.chemkrist.de>
18. - 21.09.2005 **6th Autumn School on X-ray scattering from X-ray scattering from surfaces and thin layers.**
- Kontakt: <http://kfes-80.karlov.mff.cuni.cz/Smolenice-2005/>
19. - 21.09.2005 **XXVI. Arbeitskreistagung „Strukturen und Strukturbildungsprozesse im intermediären Strukturbereich nichtkristalliner Materialien“ des AK Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen der DGK zum Thema in Wolfersdorf.**
- Kontakt: Prof. Dr. B. Müller (bernd.mueller@uni-jena.de)
29. - 30.09.2005 **Kurs „Neutronenstreuung für Kristallographen“ des AK Neutronenstreuung der DGK in München.**
- Kontakt: Prof. Dr. M. Braden (braden@ph2.uni-koeln.de)
<http://opal.kristall.uni-frankfurt.de/DGK/>

04. - 07.10.2005 **Fortbildungskurs zur “Anwendung der Gruppentheorie in der Kristallchemie” des AK Kristallchemie der DGK gemeinsam mit der FG Festkörperchemie und Materialwissenschaften der GDCh.**
- Kontakt: Prof. Dr. U. Müller (g-u-kurs@chemie.uni-marburg.de)
<http://www.chemie.uni-marburg.de/g-u-kurs/>
05. - 06.10.2005 **5. Diskussions- und Arbeitstagung des AK 15 Mineralogische und Technische Kristallographie in Halle/Saale.**
- Kontakt: Prof. Dr. H. Pöhlmann (poellmann@geologie.uni-halle.de)
http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG_DGK.htm
06. - 07.10.2005 **14. NMR-Workshop “Strukturelle Identifizierung von Protonen in Mineralen und technische Materialien mittels ^1H Festkörper NMR Spektroskopie” des AK NMR-Spektroskopie in Bochum.**
- Kontakt: Dr. M. Fechtelkord (Michael.Fechteltkord@ruhr-uni-bochum.de)
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12>
06. - 07.10.2005 **International Workshop on “Watching the Action: Powder Diffraction at non-ambient conditions” of the MPI for Solid State Research in Stuttgart.**
- Kontakt: Prof. Dr. M. Jansen (J.Knapp@fkf.mpg.de)
<http://www.fkf.mpg.de/xray/>
20. - 21.10.2005 **3. Workshop „Keramische Biomaterialien“ des AK Mineralogische und Technische Kristallographie in Bochum.**
- Kontakt: Prof. Dr.H.J. Pentinghaus (horst.pentinghaus@itc-tab.fzk.de)
Prof. Dr. R.B. Heimann (robert.heimann@ocean-gate.de)
08. - 09.12.2005 **Seminar „Röntgendiffraktometrie“ der Technischen Akademie Wuppertal e.V. in Altdorf bei Nürnberg.**
- Kontakt: Dr. M Ermrich (roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de)
<http://www.roentgenlabor-ermrich.de>
25. - 29.01.2006 **4th European charge-density meeting (ECDM IV) in Brandenburg.**
- Kontakt: www.roentgen.physik.uni-potsdam.de/ecdm
03. - 06.03.2006 **14. Jahrestagung der DGK an der Albert-Ludwigs-Universität in Freiburg/Breisgau.**
- Kontakt: <http://www.dgk-2006.de>

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

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

opal.kristall.uni-frankfurt.de/DGK/

Verantwortlich für die Gestaltung der DGK Homepage ist Frau Dr. Silke Rönnebeck (Kiel). Anregungen, Informationen etc, aber auch kritische Anmerkungen sind willkommen:

Emailadresse:

- Frau Dr. Silke Rönnebeck: roennebeck@ipn.uni-kiel.de

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

Auch die Deutsche Mineralogische Gesellschaft DMG hat ihre eigene Homepage im Internet:

www.dmg.uni-koeln.de

Der WWW-Server der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft e.V. dient als Fixpunkt für die elektronische Kommunikation innerhalb der DMG sowie zur Verbreitung von Informationen über die DMG und die Mineralogie als Wissenschaft im Internet.

Der WWW-Server wird vom Institut für Mineralogie und Geochemie der Universität zu Köln technisch bereitgestellt und betreut.

WWW-Redakteur: Frank Brenker (brenker@min.uni-koeln.de).

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

Die Homepage der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung DGKK

www.dgkk.de

wurde generalüberholt. 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-Administrator: Sabine Bergmann und Uwe Rehse (rehse@ikz-berlin.de)

Antrag auf Aufnahme in die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

An den Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK),
Herrn Prof. Dr. W. Depmeier, Institut für Geowissenschaften - Kristallographie der Universität Kiel,
Olshausenstr. 40, 24118 Kiel

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

Name : Vorname(n) :

Titel/Akad.Grad : Beruf (z.B. Dipl.- Min.) :

Dienstanschrift : Geburtsdatum :(fakultativ)

Institut/Firma :

Straße : Ort : Land (falls≠D):

Telefon : Fax :

Privatanschrift : E-mail :

Straße : Telefon :

Ort : Land (falls≠D) :

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

Jahresbeitrag

Mitglieder (ohne Ermäßigung)	15,-- EURO
Mitglieder mit Ermäßigung (Studierende, Doktoranden, Arbeitslose, Pensionäre)	5,-- EURO

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

Ich möchte Mitglied der nebensächlich angekreuzten Arbeitskreise sein.

Ich bin damit einverstanden, daß die Postadresse, Telefon- und Fax-Nr. und e-mail-Adresse in die Home-Page der DGK aufgenommen werden.

Ort, Datum : Unterschrift :

Der Antrag wird befürwortet von folgenden DGK-Mitgliedern :

	Name	Ort	Unterschrift
1			
2			

Wenn Sie mit der Beitragszahlung über Bankeinzug einverstanden sind, füllen Sie bitte den anhängenden Abschnitt aus .

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

Bank : BLZ :

Kto.-Nr. :

Titel, Vorname und Name :

Ort, Datum : Unterschrift :

Arbeitskreise der DGK

- 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 [] Hochauflösende Streuung und Synchrotron-Strahlung
- AK 9 [] Theoretische Kristallographie
- AK 10 [] Mikroskopie
- AK 11 [] siehe AK 8
- AK 12 [] NMR-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 [] Oberflächen und Grenzflächen
- AK 19 [] Kristallchemie

