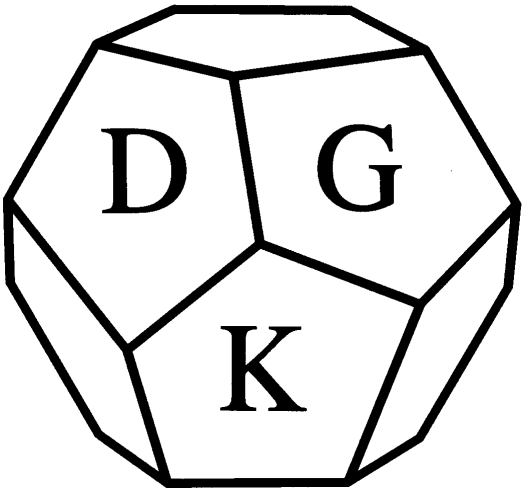


Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 47 August 2017

D
G
K

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

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen: AXO Dresden GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Maker Software Ltd., Dectris Ltd., Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Jena Bioscience GmbH, PANalytical GmbH, Applied Rigaku Technologies Inc., Rigaku Innovative Technologies Inc., Röntgenlabor Dr. M. Ermrich, STOE & Cie GmbH, World Scientific Publishing Co Pte Ltd.

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

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

Druck und Bindung:
UNIdruckerei.de
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351-3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

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

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

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

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

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

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

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

Liebe Mitglieder der DGK,

wie die Zeit vergeht! Dieses wird nun mein letztes Grußwort werden – im nächsten Jahr werde ich diese Aufgabe an meinen Nachfolger/Nachfolgerin weitergeben. So möchte ich Sie ein letztes Mal ganz herzlich als Leser der 47. Mitteilungen unserer Gesellschaft begrüßen.

Ein ereignisreiches Jahr liegt hinter uns und ein nicht minder Aufregendes wartet auf uns. In wenigen Wochen startet in Hyderabad der *24th Congress and General Assembly* der IUCr! Haben Sie schon ihr Visum – und den Kampf um das passende (sowohl von der Größe als auch der Qualität) Foto hinter sich? Ich würde mich jedenfalls sehr freuen, zahlreiche DGK-Mitglieder in Hyderabad begrüßen zu können! Die DGK hat dazu Reisestipendien ausgelobt und damit neun jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern die Teilnahme ermöglicht. Ich freue mich auf spannende Berichte für unsere Mitteilungen.

Aber blicken wir zurück: Zur 25. Jahrestagung hatte Prof. Ehrenberg und sein Team nach Karlsruhe ans KIT geladen. Diesen Kollegen und Kolleginnen gilt mein ganz besonderer Dank! Ein interessantes Programm erwartete die Teilnehmer. In sechs Plenarvorträge und 18 Mikrosymposien präsentierte sich die kristallographische Forschung in ihrer ganzen Breite. Die Mitgliederversammlung erfreute sich einer regen Beteiligung – mein Dank an alle, die anwesend waren. Die durchgeführten Wahlen erwiesen sich auf Grund der zahlreichen Kandidaten als sehr spannend. Ich danke allen, die sich zur Wahl gestellt haben. Das erfordert Mut und ist keineswegs selbstverständlich!

Wir haben wieder eine neue Beitragsordnung verabschiedet und ich hoffe, dass viele Mitglieder auch mit der Spende einverstanden sind (d. h. keinen Widerspruch einlegen). Damit wird es uns möglich sein, auf dem Ehrenabend der nächsten DGK-Jahrestagung 2018 den bisher nur einmal vergebenen Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie zu vergeben. Die Auslobung für diesen Preis sowie für alle anderen Preise der DGK finden Sie auch in diesem Mitteilungsheft. Dem Organisationsteam um Prof. Epple schon jetzt einen herzlichen Dank für die Bereitschaft, die Jahrestagung in Essen auszurichten!

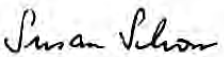
Für die Jahrestagung 2019 haben wir sogar ein Organisationstrio! Den Professoren Sträter, Öckler und Kohlmann sei herzlich gedankt für ihre Bereitschaft! Oder muss ich Professorinnen sagen? An der Uni Leipzig gilt ja die weibliche Anrede als die allgemein zu verwendende…

An dieser Stelle möchte ich auch den aktiven Arbeitskreissprechern danken! Mit Doktorandenkursen und Workshops gestalten sie ein lebendiges DGK-Leben. Der Vorstand der DGK hofft, möglichst alle Arbeitskreise wieder etwas zu beleben. Wir haben uns schon „Aktivierungsgedanken“ gemacht und wollen diesen Prozess im nächsten Jahr auf der Jahrestagung in Essen anstoßen.

Ich wünsche Ihnen schöne Sommerferien und sehe Sie vielleicht in Hyderabad!

Herzliche Grüße,

Ihre



Susan Schorr, DGK-Vorsitzende, Berlin

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 28.03.2017 in Karlsruhe 9

Anlage zu Punkt 6.1: Bericht der Vorsitzenden 15

Anlage zu Punkt 6.2: Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees 17

Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters 19

Anlage zu Punkt 6.5: Bericht der Kassenprüfer 23

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

Anlage zu Punkt 6.7 und 6.8: Bericht des Vertreters der DPG und DGK im Vorstand der DGK und DPG 27

Rückblick zur 25. Jahrestagung der DGK in Karlsruhe 30

Bericht zur ECM30 in Basel 33

Berichte der Stipendiaten zur ECM30 in Basel 36

HERCULES European School: 5 Wochen mit Röntgenstrahlen und Neutronen 40

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht zum DGK-AK1-Workshop „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ 45

XXXV. Arbeitstagung des Arbeitskreises nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen 47

Bericht des AK6 „Molekülverbindungen“ zur Sommerschule Hardehausen 2016 49

DGK-AK7-Workshop „Breaking the Walls: Complementary of Synchrotron and Neutron Scattering“ 50

Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2016 53

Bericht zum 17. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ 55

Rückblick zum DGK/DMG Ph.D. Student Course „Basics and Applications of the Rietveld Method“ 58

Report on the 9th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals 60

Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“ 63

Bericht vom „2nd Meeting of the DGK’s Young Crystallographers“ 66

Personalia:

Jubilare 2017 71

Laudatio anlässlich der Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2017 an Thomas A. White 72

Laudatio anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2017 an Peter Gille 75

Laudatio anlässlich der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2017 an Wolfgang Neumann 79

Erika Pohl-Ströher 83

Ernst Egert 85

Ankündigungen:

DGK-Tagung 2018 in Essen 95

PLATON Workshop in Crystallography 96

All-New 64-Bit CrystalMaker X 98

Max von Laue-Preis 2018 101

Aufruf zu Nominierungen für Carl-Hermann-Medaille und Will-Kleber-Gedenkmünze 2018 102

Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 103

Tagungen und Termine 105

Homepages von DGK, DMG und DGKK 120

Aufnahmeformular 121

Arbeitskreise der DGK 122

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 123

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 28.03.2017 IN KARLSRUHE

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der Jahrestagung 2017 der DGK am Dienstag, dem 28. März 2017, 14:00–16:00 Uhr, im Audimax A (Gebäude 30.95) des Karlsruher Instituts für Technologie, Straße am Forum, 76131 Karlsruhe, statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

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

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Laut Teilnehmerliste sind 66 Mitglieder anwesend. Die Zählung der Anwesenden zu Beginn der Versammlung ergab 89. Nach § 9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind. Bei derzeit 1105 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 56 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird unverändert angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 15.03.2016 in Stuttgart

Das Protokoll wird – wie in Heft 46 der DGK-Mitteilungen ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

In Gedenken an die verstorbenen Mitglieder erhebt sich die Versammlung zu einer Schweigeminute. Zum Zeitpunkt der Mitgliederversammlung sind namentlich bekannt:

- Prof. Dr. Ernst Egert
  Institut für Organische Chemie der Universität Frankfurt
  † 10.06.2016
- Prof. Dr. Heiko Lueken
  Institut für Anorganische Chemie der Technischen Hochschule Aachen
  † 05.08.2016

- Dr. Helmut Siegert
  Institut für Kristallographie der Universität Köln
  † 25.10.2016
- Prof. Dr. Emil Eberhard
  Institut für Mineralogie der Leibniz Universität Hannover
  † 27.01.2017

6 Berichte

6.1 Bericht der Vorsitzenden

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

6.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees

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

Wulf Depmeier hat sich bereit erklärt, für das Amt des IUCr-Präsidenten zu kandidieren. Als Mitglied im *Executive Committee* der IUCr wurde Manfred Weiss (HZB, Berlin) vorgeschlagen. Weitere 14 Mitglieder der DGK wurden für die Mitarbeit in 14 der insgesamt 21 Kommissionen nominiert.

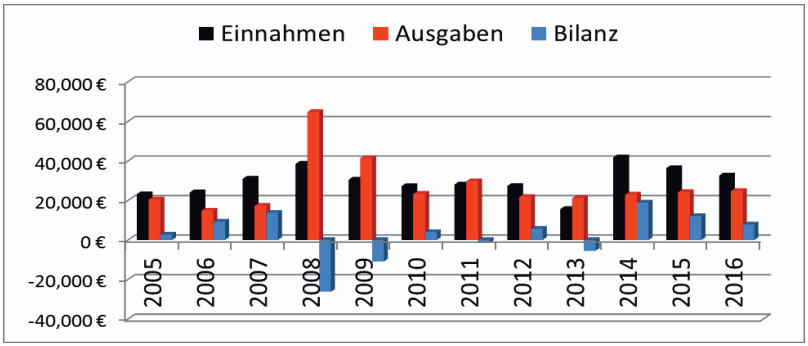
6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet über die Entwicklung von Mitgliederzahlen und Datenbestand. Im Jahr 2016 (11.03.2016–10.03.2017) gab es 27 Eintritte und 16 Austritte. Die DGK hatte am 24.03.2017 insgesamt 1117 Mitglieder, davon 840 Vollmitglieder, 126 Studenten und Doktoranden, 14 Arbeitslose, 96 Pensionäre, 23 Dauermitglieder, 6 Ehrenmitglieder, 8 Institute und 4 weitere unpersönliche Mitglieder. Die Anzahl der jüngeren Mitglieder (Studenten und Doktoranden) ist erfreulicherweise angestiegen.

Problematisch ist die immer noch recht hohe Anzahl an Mitgliedern, deren korrekte E-Mail-Adresse (415 Mitglieder) oder Postadresse (202 Mitglieder) nicht bekannt ist. Von 160 Mitgliedern ist beides nicht bekannt. Versuche, dieses zu beheben, waren bislang nur eingeschränkt wirksam.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann legt die Einnahme-Überschuss-Rechnung für 2016 sowie den Haushaltsplan für 2017 vor. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Da jetzt im dritten Jahr ein Überschuss besteht, sollte dieser ausgeglichen werden. Dies wurde beim Haushaltsplan sowie bei der vorgeschlagenen Beitragsordnung berücksichtigt.



6.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüferin Petra Becker-Bohatý legt ihren Bericht zur Prüfung der Kassenunterlagen der DGK für das Geschäftsjahr 2016 vor. Aufgrund eines längeren Auslandsaufenthalts des Kassenprüfers Jürgen Schreuer wurde die hier vorliegende Prüfung nur durch die Kassenprüferin Petra Becker-Bohatý vorgenommen. Die Prüfung ergab keine Unstimmigkeiten und die Verwendung der Mittel erfolgte satzungsgemäß. Der ausführliche Kassenprüfungsbericht folgt als Anlage.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Der ausführliche Bericht von Ulrich Bismayer ist angehängt.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

Der ausführliche Bericht von David Rafaja ist angehängt.

6.8 Bericht des Vertreters der DGK im Vorstandsrat der DPG

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

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Die Redaktion der Mitteilungen, Hartmut Stöcker und Dirk C. Meyer, dankt allen Autoren für ihre Beiträge zum letzten Heft. Dank gilt auch den Werbekunden, die meist schon über viele Jahre zur Finanzierung des Heftes beitragen. Für das nächste Heft 47 freuen wir uns bereits auf Beiträge und Berichte, vor allem aus den Arbeitskreisen, und laden alle Mitglieder dazu ein, das Heft mit zu gestalten. Redaktionsschluss wird wie in den vorherigen Jahren der 31. Mai sein.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Im letzten Jahr (April 2016 bis März 2017) wurden die Webseiten der DGK 152.000 Mal aufgerufen (*Pageviews*). Das Interesse ist also etwas geringer als im letzten Jahr. 33 DGK-Mitglieder haben derzeit die Möglichkeit, Webinhalte an verschieden Orten der DGK-Homepage zu verändern. Es wird darauf hingewiesen, dass jederzeit neue *Accounts* erstellt werden können und somit die Möglichkeit besteht, Inhalte der DGK-Homepage redaktionell zu betreuen (so zum Beispiel Webseiten von DGK-Arbeitskreisen, hier wäre eine aktivere Beteiligung der

Arbeitsgruppenmitglieder wünschenswert). Eine sehr aktive Gruppe bei der Webseitenbetreuung sind die Jungen Kristallographen (AK21), wobei hier insbesondere der von AK21-Mitgliedern betreute Blog *http://dgk-home.de/dgkzweinull* zu nennen ist.

7 Entlastung des Vorstands

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

8 Annahme der Beitragsordnung

Die Mitgliederversammlung beschließt mit einer Enthaltung und zwei Gegenstimmen die am Ende dieses Heftes abgedruckte Beitragsordnung. Diese ist gegenüber der bisherigen Beitragsordnung wie folgt geändert:

Der Beitrag für ordentliche Mitglieder wird von 40,- € auf 35,- € geändert, der Beitrag für Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand wird von 15,- € auf 10,- € geändert. Zusätzlich zum Beitrag wird von ordentlichen Mitgliedern und Mitgliedern im Ruhestand bzw. Vorruhestand eine Spende in Höhe von 5,- € erbeten, welche für das Preisgeld des Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verwendet wird. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen und nicht spenden möchten, müssen dies bitte dem Schatzmeister mitteilen.

9 Wahlen

9.1 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Petra Becker-Bohatý und Ulrich Pietsch werden ohne Gegenstimmen und mit einer Enthaltung als Kassenprüfer für das Jahr 2017 gewählt.

9.2 Wahl zum Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille

Es müssen vier Mitglieder des Preiskomitees gewählt werden. Die Abstimmung erfolgt in geheimer Wahl. Jedes Mitglied der DGK, welches auf der Mitgliederversammlung anwesend ist, kann bis zu vier Stimmen abgeben, wobei pro Kandidat nur eine Stimme vergeben werden kann. Die Kandidaten und Stimmergebnisse sind:

Robert Dinnebier	48
Ullrich Englert	37
Karen Friese	45
Udo Heinemann	47
Gerhard Raabe	22
Jürgen Schreuer	37
Ulrich Schwarz	23
Claudia Weidenthaler	53
Björn Winkler	25

Zu Mitgliedern des Preiskomitees für die Carl-Hermann-Medaille wurden damit gewählt: Claudia Weidenthaler, Robert Dinnebier, Udo Heinemann, Karen Friese.

9.3 Wahl zum Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze

Es müssen vier Mitglieder des Preiskomitees gewählt werden. Die Abstimmung erfolgt in geheimer Wahl. Jedes Mitglied der DGK, welches auf der Mitgliederversammlung anwesend ist, kann bis zu vier Stimmen abgeben, wobei pro Kandidat nur eine Stimme vergeben werden kann. Die Kandidaten und Stimmergebnisse sind:

Julia Dshemuchadse	61
Guntram Jordan	49
Alexander Pöthig	35
Stefan Stöber	44
Thomas Schleidt	57
Leonore Wiehl	63

Zu Mitgliedern des Preiskomitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze wurden damit gewählt: Leonore Wiehl, Julia Dshemuchadse, Thomas Schleidt, Guntram Jordan.

10 Jahrestagungen 2018 und 2019

Die 26. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie findet vom 5. bis 8. März 2018 in Essen statt. Tagungsort ist der Campus Essen der Universität Duisburg-Essen. Organisator der Tagung ist Matthias Epple.

Die 27. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie findet 2019 in Leipzig statt. Organisatoren sind Norbert Sträter, Oliver Oeckler und Holger Kohlmann.

11 Sonstiges

Zu diesem Tagungsordnungspunkt gibt es keine Beiträge.

Daniel M. Többens

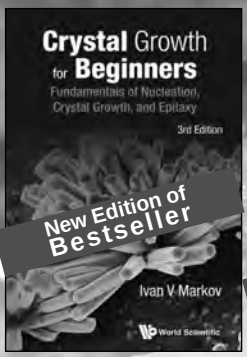
Daniel Többens
(Schriftführer)

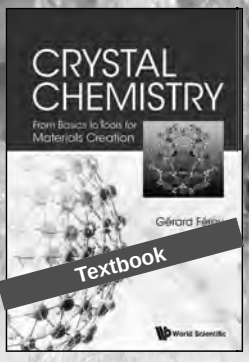
World Scientific
Connecting Great Minds

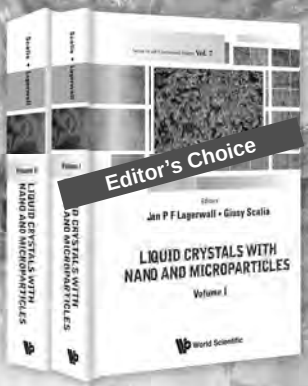
Enter WSDGK2017 to enjoy

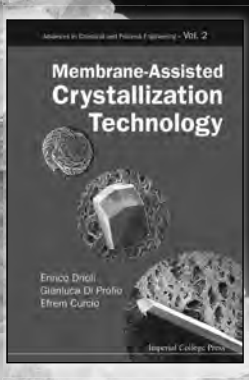
25% off ALL books
(valid until 30 September 2017)

Books on Liquid Crystals & Crystallography









Crystal Growth for Beginners
Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy
3rd Edition
by **Ivan V Markov**

Crystal Chemistry
From Basics to Tools for Materials Creation
by **Gérard Ferey**

Liquid Crystals with Nano and Microparticles (In 2 Volumes)
edited by
Jan P F Lagerwall & **Giusy Scalia**

Membrane-Assisted Crystallization Technology
by **Enrico Drioli, Gianluca Di Profio** & **Efrem Curcio**

For more titles visit our e-catalogue at
www.worldscientific.com/page/crystal-2016
or scan the QR code

www.worldscientific.com

ANLAGE ZU PUNKT 6.1:

BERICHT DER VORSITZENDEN

Freistellungsantrag für die Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2013–2015

Antrag auf Freistellung für die Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie wurde beim Finanzamt für Körperschaften Berlin I eingereicht. Dem Antrag wurde mit einem Freistellungsbescheid vom 15.02.2017 stattgegeben. An dieser Stelle möchte ich mich für die Unterstützung bei der Erstellung des Freistellungsantrages beim Schatzmeister, Herrn Lehmann, recht herzlich bedanken.

Antrag auf Übernahme des IUCr-Mitgliedsbeitrages für 2016

Als Vorsitzende der DGK und Mitglied des Nationalkomitees für Kristallographie habe ich bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Namen der DGK um erneute Übernahme des fälligen IUCr-Jahresbeitrags in Höhe von 10.000 CHF für 2016 gebeten. Der Antrag wurde positiv beschieden. Die Überweisung durch die DFG wurde in Schweizer Franken vorgenommen, so dass ein Fehlbetrag durch Währungsumrechnungen vermieden werden konnte.

Aktivitäten zur Erhöhung der Sichtbarkeit der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie sowie des Fachgebietes Kristallographie

Vom 23. bis 25.03.2017 habe ich an der Konferenz AnalytiX 2017 in Fukuoka, Japan, teilgenommen und im Track „Crystallography" ein Symposium zum Thema „Crystallography in Materials Science" organisiert. Die Konferenzorganisatoren hatten angefragt, ob die DGK als *Supporting Organisation* der Veranstaltung auftreten wollte. Nach Rücksprache mit dem DGK-Vorstand, der diese Anfrage positiv beantwortet hatte, war die DGK *Supporting Organisation* dieser Konferenz. Damit erschien die DGK mit Name und Logo in den Konferenzunterlagen.

Der Vorsitzende des wissenschaftlichen Programmkomitees der „1st Panafrican Conference on Crystallography" (PCCr-1), Claude Lecomte, hat die DGK um Unterstützung gebeten. In Absprache mit dem DGK-Vorstand hat sich dieser entschlossen, die PCCr-1 mit 400 € zu unterstützen. Damit hat die DGK auch der IYCr2014 *Legacy Resolution*, in der ein „to built capacity in developing regions of the world" gefordert wird, entsprochen.

Zur 3. Konferenz der „Bangladesh Crystallograpic Association" (Dezember 2016) wurde eine Grußadresse der DGK übermittelt (verlesen von Prof. Rüscher, Universität Hannover in der *Inaugural Session* der Konferenz). Bei deren Abfassung hat mich der Schriftführer, Herr Többens, sehr unterstützt. Dafür möchte ich mich recht herzlich bedanken.

Verleihung der Insignien eines Offiziers im französischen Orden der Akademischen Palmen an Prof. H. Fuess

Philippe Etienne, Botschafter der französischen Republik in Deutschland, hatte am 26.10.2016 in die Französische Botschaft in Berlin zu einem Festakt eingeladen. Auf dieser Veranstaltung wurden Herrn Prof. Fuess die Insignien eines Offiziers im französischen Orden der Akademischen Palmen verliehen. Leider konnte ich wegen Terminüberschneidungen nicht an dem Festakt teilnehmen.

Mitgliederversammlung der Bundesvereinigung Materialwissenschaften und Werkstofftechnik BVMatWerk

Auf der Mitgliederversammlung der BVMatWerk am 28.11.2016 habe ich die DGK vertreten. Auf der Versammlung wurde ein neuer Vorstand der BVMatWerk gewählt (Vorsitzende: Dr. Ursula Eul, FhG-LBF, stellv. Vorsitzender: Dr. Peter Dahlmann, Stahlinstitut VDEh).

Susan Schorr, Berlin

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DER VORSITZENDEN DES NATIONALKOMITEES

ECM30

Im Rahmen der *Councils* der ECM30 in Basel am 29. und 30.08.2016 wurde Deutschland durch Jürgen Schreuer, Claudia Weidenthaler und Susan Schorr vertreten. Es standen keine Personalwahlen an. Als neues Mitglied der ECA wurde Albanien/Kosovo aufgenommen. Außerdem wurde eine neue *General Interest Group* (GIG3) „Education in Crystallography" eingerichtet. Die Satzung des Bertaut-Preises wurde geringfügig angepasst. Der Schatzmeister der ECA Christian Lehmann teilt mit, dass die ECM29 einen Überschuss erwirtschaftet hat, der über die ECA zeitnah verausgabt werden soll. Die ECM30 verzeichnete 920 Teilnehmer, davon 179 Studierende, 35 Wissenschaftler im Ruhestand und 25 Begleitpersonen. Nach der IUCr in Hyderabad, Indien vom 21. bis 28.08.2017 wurden folgende ECM-Tagungsorte festgelegt:

2018: ECM31, Oviedo, Spanien, 22.–27.08.2018
2019: ECM32, Wien, Österreich, 18.–23.08.2019
2020: IUCr, Prag, Tschechien, 22.–30.08.2020

Desweiteren wird die Reihe der *European Crystallography School* (ECS) mit der ECS4 in Warschau, Polen, 02.–07.07.2017 fortgeführt. Die Lehrunterlagen abgeschlossener ECS stehen über die Webseite der ECA für alle nach Registrierung zum Download bereit. Der Fokus aller bisherigen Veranstaltungen lag auf Symmetrielehre und Beugungsmethoden:

ECS1 (2014): Padua, Italien
ECS2 (2015): Mieres, Spanien, 35 studentische Teilnehmer
ECS3 (2016): Bol, Kroatien, 76 studentische Teilnehmer

ECA-Preise

Der neunte Max-Perutz-Preis der ECA (für signifikante Beiträge auf dem Gebiet der Kristallographie) wurde an Dr Václav Petříček vom Institut für Physik an der Tschechischen Akademie der Wissenschaften in Prag verliehen. In seinem Programm JANA ermöglicht er Kristallographen und Chemikern die Anwendung der Theorie aperiodischer Strukturen. Damit eröffnete er den Zugang zu Materialien aller Substanzklassen ohne dreidimensionale Translationssymmetrie.

Den achten Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis der ECA und der „European Neutron Scattering Association" (ENSA) erhielt Dr. Linda Reinhard vom Karolinska Institut am DESY, Hamburg. Sie wurde für ihre bahnbrechenden Beiträge zur Kristallstrukturanalyse von Enzymen und die Optimierung der Proteinpräparation für Beugungsarbeiten geehrt.

IUCr-Kongress

Der 24. IUCr-Kongress findet in Hyderabad, Indien vom 21. bis 28.08.2017 statt. Die Nominierungen für das *Executive Committee* und die Kommissionen der IUCr wurden von der Vorsitzenden fristgerecht an den *IUCr Executive Secretary* gesendet. Wulf Depmeier hat sich bereit erklärt, für das Amt des IUCr-Präsidenten zu kandidieren. Als Mitglied im *Executive Committee* wurde Manfred Weiss (HZB, Berlin) vorgeschlagen. Weitere 14 Mitglieder der DGK wurden für die Mitarbeit in 14 der insgesamt 21 Kommissionen

nominiert. Die Wahlen finden auf der *IUCr General Assembly* in Hyderabad statt. Deutschland hat vier Stimmen (Mitglieder des NK oder Vertreter), die vorher schriftlich mitgeteilt werden müssen (*IUCr Executive Secretary*).

Commission	**Name**
Biological Macromolecules	Norbert Sträter (Uni Leipzig), Manfred Weiss (HZB, Berlin)
Charge, Spin and Momentum densities	Birger Dittrich (Uni Düsseldorf)
Crystal Growth and Characterization of Materials	Detlef Klimm (IKZ, Berlin)
Crystallographic Computing	Kay Diederichs (Univ. Konstanz)
Crystallography of Materials (*ad interim*)	Barbara Albert (TU Darmstadt)
High Pressure	Andrzej Grzechnik (RWTH Aachen)
Inorganic and Mineral Structures	Thorsten M. Gesing (Uni Bremen)
Mathematical and Theoretical Crystallography	Peter Zeiner (Uni Bielefeld)
Neutron Scattering	Martin Meven (MLZ, Aachen)
NMR Crystallography and Related Methods	Jürgen Senker (Uni Bayreuth)
Powder Diffraction	Robert Dinnebier (MPI Stuttgart)
Small-Angle Scattering	Ulrich Bismayer (Uni Hamburg)
Structural Chemistry	Christian W. Lehmann (MPI-KoFo, Mülheim)
Synchrotron and XFEL Radiation	Thomas Tschentscher (DESY, Hamburg)

Ute Kolb, Mainz

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschuss-Rechnung 2016 der DGK			
Einnahmen 2016			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2016	23.620,00 €	24.345,00 €
	Barzahler 2016	725,00 €	
	Bankeinzug rückwirkend	0,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,15 €	2,97 €
	Cashkonto 850	2,82 €	
Entnahme Rücklage	Dauermitglieder		182,17 €
Arbeitskreise	Einnahmen	2.950,00 €	3.271,22 €
	Rückzahlungen	321,22 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.800,00 €
Summe Einnahmen			**32.601,36 €**
Ausgaben 2016			
Mitteilungen			-7.031,20 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	0,00 €	-495,00 €
	Rücklastschriften	-495,00 €	
Administration	Bankgebühren	-190,50 €	-1.853,14 €
	Stornokosten	-45,55 €	
	Medaillenprägung	-128,43 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-1.190,16 €	
	Reisekosten & Spesen	-298,50 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatWerk		-1.200,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-11.082,74 €	-14.182,74 €
Reisestipendien	ECM Basel	-1.200,00 €	
Veranstaltungen	PCCr-1	-400,00 €	
Max-von-Laue Preisgeld	Dr. Francesca Fabbiani	-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			**-24.762,08 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2016			
Einnahmen	Zinsen Rücklagenkonto	0,29 €	0,29 €
Ausgaben	Einzahlung DGK 2016	-182,17 €	-182,17 €
Überschuss 2016			**-181,88 €**
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2016			**7.657,40 €**

Kontoführung DGK 2016			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Giro	1.255,07 €	3.174,12 €	1.919,05 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.276,86 €	2.094,98 €	-181,88 €
Sonderkonto AK 21	1.000,75 €	918,16 €	-82,59 €
DKG-Cash 085	25.013,68 €	31.016,50 €	6.002,82 €
Guthaben der DGK	**29.546,36 €**	**37.203,76 €**	**7.657,40 €**

Haushaltsvoranschlag 2017 der DGK			
Einnahmen 2017			
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2017	20.000,00 €	21.000,00 €
	Barzahler 2017	1.000,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Entnahme Rücklage	Dauermitglieder		150,00 €
Spenden	Preisgeld Liebau-Stiftung		2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	0,00 €	0,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.000,00 €
Summe Einnahmen			**27.150,00 €**
Ausgaben 2017			
Mitteilungen			-7.000,00 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	0,00 €	-1.000,00 €
	Rücklastschriften	-1.000,00 €	
Administration	Bankgebühren	-250,00 €	-1.150,00 €
	Geschäftsstelle	-500,00 €	
	Reisekosten & Spesen	-400,00 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatWerk		-1.200,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-12.000,00 €	-19.500,00 €
Reisestipendien	IUCr XXIV Hyderabad	-6.000,00 €	
Rücklage Reisestipendien		0,00 €	
Max-von-Laue Preisgeld	Auszahlung	-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			**-29.850,00 €**
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2017			**-2.700,00 €**

Jahresabrechnung 2016 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2016			
Zinsen	Laue-Sparbuch 920	0,00 €	7,57 €
	Laue-Kapital 930	7,57 €	
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			**7,57 €**
Ausgaben 2016			
Laue-Preis 2016	Dr. Francesca Fabbiani		0,00 €
Summe Ausgaben (Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen)			**0,00 €**
Überschuss Einnahmen und Ausgaben 2016			**7,57 €**
Kontoführung 2016			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Laue-Sparbuch 920	64,30 €	112,15 €	47,85 €
Laue-Kapital 930	60.040,78 €	60.000,50 €	-40,28 €
Kapital der Stiftung	**60.105,08 €**	**60.112,65 €**	**7,57 €**

Jahresbilanz 2016 Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie			
Einnahmen 2016			
Zinsen	Stiftungskapital 870	3,91 €	3,91 €
Summe Einnahmen			**3,91 €**
Ausgaben 2016			
Kein Preis vergeben			0,00 €
Summe Ausgaben			**0,00 €**
Überschuss Einnahmen und Ausgaben 2016			**3,91 €**
Kontoführung 2016			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Stiftungskapital 870	30.887,21 €	30.891,12 €	3,91 €
Kapital der Stiftung	**30.887,21 €**	**30.891,12 €**	**3,91 €**

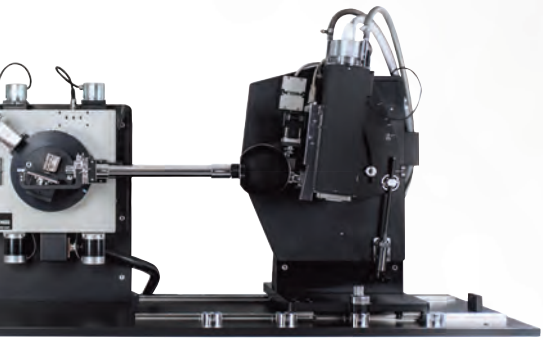
Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

STOE

SINCE 1887

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

SINGLE CRYSTAL DIFFRACTOMETRY



STADI MP
ONE POWDER DIFFRACTOMETER – THREE GEOMETRIES

POWDER DIFFRACTOMETRY

1887 – 2017 CELEBRATING 130 YEARS OF UNPARRALLED QUALITY

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

We guarantee this with our new and unprecedented:

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

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

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

WWW.STOE.COM

ANLAGE ZU PUNKT 6.5:

BERICHT DER KASSENPRÜFER

Die vorliegende Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2016 wurde am 21. März 2017 in der Abteilung Kristallographie, Institut für Geologie und Mineralogie der Universität zu Köln durchgeführt. Aufgrund eines längeren Auslandsaufenthalts des Kassenprüfers Jürgen Schreuer wurde die hier vorliegende Prüfung nur durch die Kassenprüferin Petra Becker-Bohatý vorgenommen.

Der Schatzmeister der DGK, Herr Christian Lehmann, hat die zur Prüfung erforderlichen Unterlagen, insbesondere sämtliche Kontoauszüge, Zahlungsbelege, sorgfältig ausgearbeitete Bilanzen aller Unterkonten sowie eine Gesamtbilanz vorgelegt.

Die Prüfung hat keine Unstimmigkeiten in der Buchführung ergeben. Die anhand der Bankauszüge geprüften Kontostände zu Jahresbeginn und Jahresende stimmen mit den von Herrn Lehmann für das Geschäftsjahr 2016 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der Kassenprüferin satzungsgemäß.

Drei kleine Punkte zur Anmerkung:

1) Die Laue-Preisträgerin 2016 ist Frau Francesca Fabbiani, nicht Julia Dshemuchadse.
2) Die Bilanz der DGK weist für das Geschäftsjahr 2016 einen Überschuss von 7.657,40 € aus, der das Guthaben der DGK auf über 37.000 € erhöht. In Hinblick auf die Vorgaben des Finanzamts, die Einnahmen gemeinnütziger Vereine betreffend, und den Hinweis der Kassenprüfer im Kassenprüfungsbericht für 2015, ein Anwachsen des Guthabens der DGK in 2016 zu vermeiden, sollte die gebildete Rücklage von 6.000,- € für Reisestipendien, auch wenn sie durch ihre Zweckbindung steuerlich nicht wirksam ist, möglichst verausgabt werden.
3) Angesichts der von der Sparda-Bank Hamburg mittlerweile erhobenen Gebühren wird die Prüfung eines Bankwechsels auch von Seiten der Kassenprüferin befürwortet.

Petra Becker-Bohatý, Köln

20 Jahre
1997 - 2017

RÖNTGENLABOR Dr. M. Ermrich

Röntgendiffraktometrie - Röntgenfluoreszenzanalyse

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

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

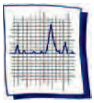
Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor
Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

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

Ansprechpartner und Vertrieb des Rietveld- Programms

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



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

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

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

ANLAGE ZU PUNKT 6.6:

BERICHT DES VERTRETERS DER DMG IM VORSTAND DER DGK

Die vorangegangene DMG-Vorstands- und Beiratssitzung erfolgte am 13./14.02.2017 im Physikzentrum, Bad Honnef. Den Vorsitz hatte Reiner Klemd, stellvertretender Vorsitzender war Francois Holtz.

Gerhard Wörner (Göttingen) wurde in 2016 für den Bereich Geowissenschaften in den DFG-Senat berufen. Francois Holtz ist nach sechs Jahren aus dem DFG-Senat ausgeschieden.

Auf der emc2016, die gemeinsam mit der DMG im September 2016 in Rimini, Italien tagte, erfolgten Ehrungen und Preisverleihungen der DMG:
1) Abraham-Gottlob-Werner Medaille in Silber: Gerhard Brey (Frankfurt)
2) Victor-Moritz-Goldschmidt-Preis: Christoph Burkhardt (Münster)
3) Georg-Agricola-Medaille: Ulrich Förstner (Hamburg)
4) Beate-Mocek-Preis: Sarah Incel (Paris)
5) Paul-Ramdohr-Preis für 2015: M. Sc. Maria Stuff (Potsdam), M. Sc. Aurelia Zirner (Bonn)

Die Professoren Herbert Kroll (Münster) und Herbert Palme (Frankfurt) wurden auf der Tagung zu Ehrenmitgliedern der DMG ernannt.

2017 werden 8 DMG-Doktorandenkurse angeboten (siehe *www.dmg-home.org*):
1) Bayreuth: „High-Pressure Experimental Techniques and Applications to the Earth's Interior", Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Stefan Keyssner, 20.–24. Februar 2017
2) Stuttgart: „Grundlagen und Anwendung der Rietveld-Verfeinerung", Max-Planck-Institut für Festkörperforschung Stuttgart, Robert E. Dinnebier (Arbeitskreis Pulverdiffraktometrie der DGK), 6.–9. März 2017
3) Bochum: „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung", Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum, Michael Fechtelkord (Arbeitskreis Spektroskopie der DGK), 6.–9. Juni 2017
4) Bayreuth: „Mineralogie, Mineralphysik und Seismologie des Erdmantels", Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Hauke Marquardt (BGI), Christine Thomas (Universität Münster), Sommer 2017
5) Hannover: „In-situ-Analyse von Isotopen und Spurenelementen mit (MC-) ICP-MS gekoppelt mit Femtosekunden-Laserablation", Institut für Mineralogie, Leibniz Universität Hannover, I. Horn, S. Schuth, M. Lazarov, M. Oeser, S. Weyer u. a., 9.–13. Oktober 2017
6) Potsdam: „Introduction to Secondary Ion Mass Spectrometry in the Earth Sciences", GeoForschungsZentrum Potsdam, M. Wiedenbeck, eine Woche Ende Oktober/Anfang November 2017
7) Dresden: „SEM based automated mineralogy", Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Bernhard Schulz, vorauss. Okt./Nov. 2017 (ist 2016 ausgefallen)
8) Dresden: „Application of ion beam analysis in mineralogy and geochemistry", Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf in Kooperation mit dem Helmholtz-Institut Freiberg, F. Munnik, R. Heller, A. Renno, 20.–24. November 2017

Anfang März findet an der TU München der 3. Workshop „Physics of Volcanoes“ (08.–09.03.2017, K.-U. Hess, U. Kueppers) statt.

Vom 22. bis 24.02.2017 erfolgt der gemeinsame Workshop der DMG-Sektionen „Chemie, Physik und Kristallographie der Minerale (CPKM)“ und „Angewandte Mineralogie in Technik und Umwelt (AMITU)“ in Bad Windsheim (Christoph Berthold, AMiTU und Helmut Klein, CPKM).

Nächste Tagungen:

- Die DMG 2017 findet vom 24. bis 28.09. in Bremen statt (Organisatoren: A. Lüttge und W. Bach) gemeinsam mit der DGGV unter Beteiligung von MARUM (G. Wefer) unter dem Titel „The Earth and its Materials – From Seafloor to Summit“.
- 2018 wird die erste DVGeo-Gemeinschaftstagung mit der DMG in Bonn stattfinden (Organisation: Ambre Luguet, DMG und Niko Froitzheim, DGGV). Termin: Bonn, 02.–05.(06.) September 2018.
- In Münster ist für 2019 eine DMG-DGGV-Gemeinschaftstagung geplant.
- 2020 soll die 3. emc-Tagung entweder in Krakau oder in Madrid stattfinden.

Ulrich Bismayer, Hamburg und Jürgen Schreuer, Bochum

ANLAGE ZU PUNKT 6.7 UND 6.8:

BERICHT DES VERTRETERS DER DPG UND DGK IM VORSTAND DER DGK UND DPG

Die Fachgruppe Kristallographie war auch bei der diesjährigen DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie, die vom 19. bis 24. März 2017 in Dresden veranstaltet wurde, vertreten. Leider hat sich der unerfreuliche Trend der letzten Jahre fortgesetzt. In der Fachgruppe Kristallographie wurden nur wenige Beiträge – zwei Vorträge und sechs Poster – eingereicht. Die möglichen Gründe für diese geringe Resonanz sind ein sehr kleiner zeitlicher Abstand zwischen der DPG-Tagung und der DGK-Tagung (27.–30. März 2017 in Karlsruhe) und die Tatsache, dass kristallographische Themen zunehmend durch verschiedene Fachverbände der Sektion Kondensierte Materie der DPG (z. B. Dielektrische Festkörper, Dünne Schichten, Metall- und Materialphysik) angeboten werden.

Auf der DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie wurde einer der bei der Fachgruppe Kristallographie eingereichten Vorträge in der Session „Various Topics“ des Fachverbandes Dielektrische Festkörper untergebracht. Der andere Vortrag aus der Fachgruppe Kristallographie wurde in der Session „X-ray Imaging, Holography, Ptychography and Tomography“ des Fachverbandes Mikrosonden platziert. In diesen beiden Sessions wurden einige weitere Vorträge mit kristallographischen Inhalten eingereicht, so dass hier die Fachgruppe Kristallographie als Mitveranstalter mitwirkte.

Die gemeinsamen Sessions der Fachverbände Dielektrische Festkörper und Mikrosonden und der Fachgruppe Kristallographie gibt es seit einigen Jahren. Sie helfen diesen drei kleinen Organisationen, ihre Sichtbarkeit in der Konkurrenz der großen Fachverbände der Sektion Kondensierte Materie der DPG zu verbessern. Als eine deutlich weiter gehende Maßnahme der Sichtbarkeitssteigerung wurde eine Zusammenlegung des Fachverbandes Dielektrische Festkörper, des Fachverbandes Mikrosonden und der Fachgruppe Kristallographie diskutiert. Die Fusion wurde bei einem Treffen der Vorsitzenden (Elisabeth Soergel, Enrico Langer und David Rafaja) und deren Stellvertreter (Martin Diestelhorst, Hartmut Leipner und Leonore Wiehl) am 21. und 22. Februar 2017 in Dresden vorbereitet, indem hauptsächlich die Inhalte der neuen Vereinigung besprochen wurden. Der neue Fachverband soll künftig unter dem Namen „Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur“ (KFM) firmieren. Die Hauptthemen des Fachverbandes sind nach Materialien, Methoden, Sonden und Effekten sortiert.

Die Mitglieder der Fachgruppe Kristallographie wurden über die geplante Fusion informiert. Ihre Reaktionen auf diese Ankündigung waren mehrheitlich positiv. Auf der Sitzung des Vorstandsrates der DPG am 26. März 2017 während der 81. DPG-Jahrestagung in Münster wurden die Zusammenlegung der ehemaligen Fachverbände/Fachgruppe und die Bildung des neuen Fachverbandes beschlossen. Die Mitglieder der ehemaligen Fachverbände Dielektrische Festkörper und Mikrosonden sowie der ehemaligen Fachgruppe Kristallographie wurden automatisch dem neuen Fachverband Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur zugeordnet. Der Fachverband KFM wird zwischenzeitlich durch die Vorsitzenden der ehemaligen Vereinigungen (Elisabeth Soergel, Enrico Langer und David Rafaja) geleitet. Künftig soll der Fachverband Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur, wie üblich, durch einen Vorsitzenden geleitet werden. Am 04. Mai 2017 wurden durch die DPG an die KFM-Mitglieder Wahlzettel mit den Kurzvorstellungen der Kandidaten (Herr Dr.

Charaf Cherkouk, TU Bergakademie Freiberg und Herr Prof. Dr. Theo Scherer, KIT Karlsruhe) verschickt.

Nähere Informationen über den Fachverband Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur sind zusammen mit den Themen des Fachverbandes und der vorläufigen Liste der Sessions für die 82. DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie, die vom 11. bis 16. März 2018 in Berlin stattfinden wird, auf der Homepage des Fachverbands *http://www.dpg-physik.de/dpg/gliederung/fv/kfm* zu finden. Auf dieser Webseite wurde Anfang Juni ebenfalls der gewählte Vorsitzende bekanntgegeben. Zum ersten Vorsitzenden des Fachverbandes Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur (KFM), der aktuell 724 Mitglieder hat, wurde Herr Prof. Dr. Theo Scherer (KIT Karlsruhe) gewählt.

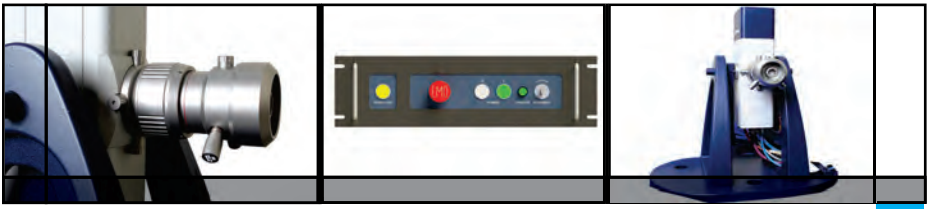
Die nächsten Tagungen der Sektion Kondensierte Materie der DPG finden zu folgenden Terminen statt: 11.03.–16.03.2018 (Berlin), 31.03.–05.04.2019 (Regensburg).

David Rafaja, Freiberg

X-ray Beam Modules

Rigaku Innovative Technologies

New Components and Retrofitting Existing Systems

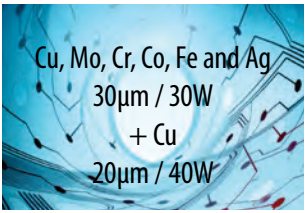


Retrofitting Existing Equipment

- Economical alternative to total system replacement
- Component level upgrades for optics and X-ray source
- Independent of system manufacturer

Replacement Beam Modules

- Optics
- High efficiency VariMax™ multilayer optics
- Spectural purity, exemplary beamsize and minimal divergence
- One or two dimensional optics, bent - and channel - cut crystals and pyrolitic graphite



Available beam modules

Sources

- Standalone integrated source module
- Adjustable stand for easy alignment and integration
- Optional safety switches and mechanical locks

Over 300 X-ray Beam Modules Sold

Rigaku Innovative Technologies ***www.rigaku.com***

"Leading with Innovation"

Rigaku

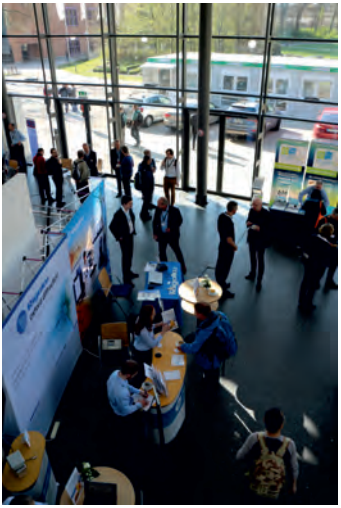
RÜCKBLICK ZUR 25. JAHRESTAGUNG DER DGK IN KARLSRUHE

Vom 27. bis 30. März 2017 fand im Audimax des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) die 25. Jahrestagung der DGK statt. Mit mehr als 400 angemeldeten Teilnehmern und etwas über 270 wissenschaftlichen Beiträgen brachte die Veranstaltungen wieder alle kristallographischen Disziplinen zusammen, auch weit über die nationalen Grenzen hinaus. In 17 Mikrosymposien, 6 eingeladenen Plenarvorträgen und in zwei Postersitzungen mit vorangestellten „Lightning Talks“, die von den „Young Crystallographers“ organisiert wurden, konnten alle Programmpunkte adressiert werden, die im Vorfeld von den Arbeitskreisen vorgeschlagen wurden.

Auf der Tagungsseite *www.dgk-conference.de* können auch weiterhin noch Details zum Tagungsprogramm eingesehen werden. Außerdem stehen einige Bilder zur Ansicht zur Verfügung. Alle registrierten Tagungsteilnehmer wurden per Mail zu einer Bewertung der Veranstaltung eingeladen. Diese Abfrage ist auch mit der Möglichkeit verbunden, Vorschläge für zukünftige DGK-Jahrestagungen mitzuteilen. Die nächste und damit 26. Jahrestagung der DGK wird von Prof. Matthias Epple von der Universität Duisburg-Essen am Campus Essen ausgerichtet.

Ich bedanke mich im Namen des Programm- und Organisationskomitees bei allen Teilnehmern und den zahlreichen Unterstützern.

Helmut Ehrenberg, Karlsruhe



Impressionen von der 25. DGK-Tagung in Karlsruhe

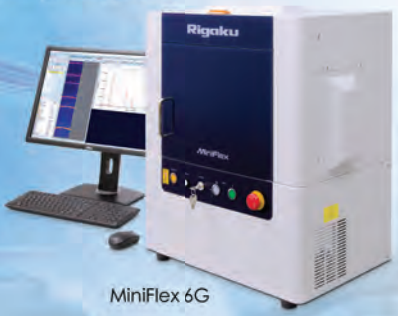
Rigaku

Leading With Innovation

XRD Solutions

Introducing the 6th generation MiniFlex™ benchtop diffractometer

- New, sixth generation instrument based on technology proven by more than 500 patents and 5000 scientific publications
- HyPix-400 2D HPAD detector to collect diffractogram, crystallite size and preferred orientation at once
- Exchangeable X-ray source depending on material types (Cu, Co, Fe and Cr)
- Available attachments include 8-position sample changer, transmission holder and variable temperature attachment



MiniFlex 6G

SmartLab

Highly versatile multipurpose XRD

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

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

BERICHT ZUR ECM30 IN BASEL

Das *European Crystallographic Meeting* wurde 2016 in Basel (Schweiz) vom 28. August bis 2. September abgehalten. Trotz des Namens, kam auch wissenschaftlicher Besuch von außerhalb Europas bis zum *Congress Center Basel*. Nachdem die Organisatoren Katharina Fromm und Jürg Schäfer das Meeting am Abend des 28. Augusts offiziell mit einem Wasser-zu-Bier- und Feuerball-Experiment eröffnet haben, wurde Vaclav Petricek für seine Arbeit am Computerprogramm JANA mit dem Max-Perutz-Preis ausgezeichnet. Außerdem traten einige Vertreter der Schweizer Regierung und Forschungsgemeinschaft auf, um alle versammelten Wissenschaftler herzlichst zu begrüßen. Der Abend wurde mit einem klassischen Schweizer Apero und vielen süßen Sachen beendet.

Am Tag darauf startete das wissenschaftliche Programm mit einem Vortrag der Nobelpreisträgerin Ada Yonath über ihre Arbeiten an Proteinen, wobei sie mitunter einen schönen geschichtlichen Abriss über die Forschung an der Proteinsynthese an den Ribosomen gab. Das Programm war vielfältig gestaltet und üblicherweise fanden drei Mikrosymposien gleichzeitig statt. Die Themenbereiche waren weit gestreut und reichten von Kristallographie, Biologie und vielem mehr bis hin zu Neu- und Weiterentwicklungen von Methoden basierend auf Elektronen, Neutronen und Röntgenstrahlung. In den Mittags-Sessions hatten Softwarehersteller und Programmierer die Möglichkeit ihre neuen Programme und Weiterentwicklungen zu präsentieren. Außerdem war die Lobby gefüllt mit Info-Ständen für kommende ECMs sowie mit Vertretern von Instrumenten-Herstellern. Dectris war besonders kreativ und lockte Jung und Alt mit einem Spielchen in eine begehbare „Ventilator-Box“, in der umherfliegende Stoffbällchen gefangen werden mussten.

Die Konferenz hat auch zwei interessante Ausflüge geboten. Der erste ging zum Werksgelände von Dectris, wo sich die Firma präsentiert hat und detaillierter zeigte, wie ihre Detektoren hergestellt werden. Der andere Ausflug ging zum nahe gelegenen Paul-Scherrer-Institut. Hier wurde stolz die Baustelle des Schweizer Freien-Elektronen-Lasers SwissFEL präsentiert.

Die letzte Neuheit, die bei dieser ECM geboten wurde, war der *Science Slam*. Die Veranstalter luden sechs herangehende Wissenschaftler dazu ein, ihr Forschungsthema binnen drei Minuten auf eine unterhaltsame Art und Weise zu präsentieren. Die zwei „Jungen Kristallographen“ der DGK Gregor Hofer und Falk Meutzner haben in diesem Wettbewerb sehr erfolgreich mitgewirkt. Danach wurde der Bertaut-Preis an Linda Rheinhard verliehen und sie hielt sofort auch einen spannenden Vortrag über die Symmetrie an Protein-Rezeptoren.

Das *Conference Dinner* fand vor der bezaubernden Kulisse des Baslers Zoo statt. Manche Teilnehmer haben etwas länger gebraucht, um das Restaurant zu erreichen, da die putzigen Tierchen viele aufmerksame Blicke auf sich zogen.

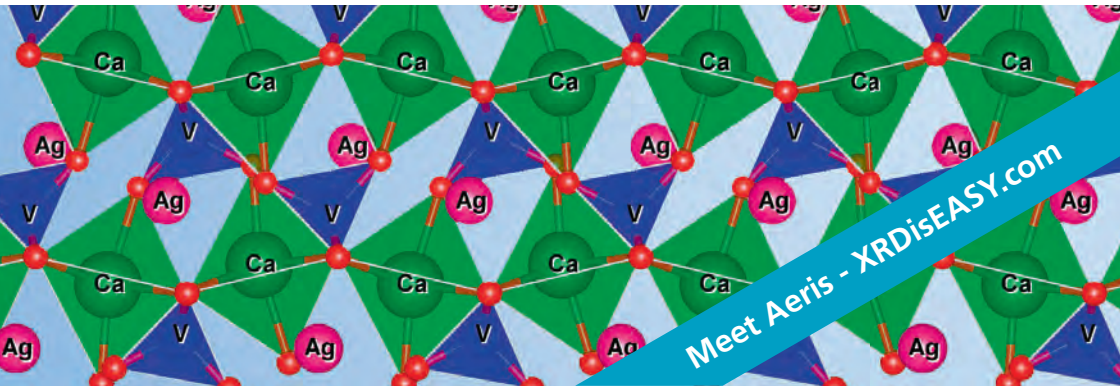
Beendet wurde die Konferenz, wie sie begonnen hat: mit dem Vortrag eines Nobelpreisträgers, Jean-Marie Lehn. Auch er hat über sein Steckenpferd berichtet, die supramolekulare Chemie.

Alles in allem, verlief die Konferenz ohne eine Panne oder einen Zwischenfall vor dem sonnigen Panorama der idyllischen Stadt Basel.

Mehr zum *European Crystallographic Meeting 2016* finden Sie im IUCr-Newsletter (*http://www.nxtbook.com/nxtbooks/iucr/newsletter_vol24no3/#/16*) und im Blog der „Jungen Kristallographen“ (*http://dgk-home.de/ecm-30-basel-2016* und *http://dgk-home.de/science-slam-ecm-30-basel*)

Gregor Hofer, Zürich

PANalytical
get insight



Unrivalled data quality from laboratory **XRD** systems

Empyrean
The multipurpose solution for your analytical needs

Aeris
See how XRD is made easy

PANalytical GmbH
Nürnberger Str. 113
D-34123 Kassel

Tel: +49 (0)561 5742-200
Fax: +49 (0)561 5742-500
E-Mail: info.de@panalytical.com
www.panalytical.com

BERICHTE DER STIPENDIATEN ZUR ECM30 IN BASEL

Ai Wang, RWTH Aachen

The ECM30 meeting in Basel is my first time to join in the European meeting. The title of my poster "Charge Density Study of Distorted Tetrahedral and Octahedral Cu (II) Complexes: What is the Influence of Data Band and Charge Assignment?", which was arranged as poster number MS23-P2, has been presented on ECM30. During the poster presentation I received very helpful and constructive suggestions and ideas of multi-pole model refinements.

The plenary lecture "Crystallography & Ribosomes, Antibiotics Resistance, Parasites, the Microbiome, Environmental issues, Origin of Life and More", which was given by Prof. Dr. Ada Yonath and "Self-Organization-driven Supramolecular Chemistry and Adaptive Chemistry", which was held by Prof. Dr. Jean-Marie Lehn inspired me on my way of research.

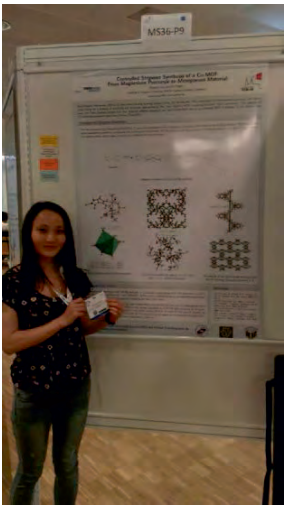
I have followed a lot of interesting microsymposia parts and several charming keynote lectures related to "Experimental Charge Density" and "Coordination Polymers Molecular Crystal". One of the keynote lectures from Prof. Birger Dittrich was "Emphasizing the difference between experimental and theoretical electron density in the solid state: new opportunities from anharmonic thermal motion to excited states", which was very interesting and gave me a new aspect of the prospect of development of experimental charge density.

The discussion with Rebecca Scatena about d-orbital population of transition metal complexes and how to refine and analyse this issue in multipole refinement, gave me more practical experience.

The historical evening walk through Basel "On the traces of the famous mathematicians Euler and Bernoulli" was impressing. It gave me more knowledge about the history and humanities of Basel.

Thanks to the DGK to support me to go to Basel and join in the ECM30.

Qianqian Guo, RWTH Aachen



Vom 28. August bis 1. September 2016 habe ich an der Tagung ECM30 teilgenommen. Die Teilnahme wurde erst durch den großzügigen Zuschuss der DGK ermöglicht. Dafür möchte ich mich recht herzlich bedanken.

Das wissenschaftliche Programm der Tagung fing mit dem Vortrag von Ada Yonath an. Und zum Schluss gab Jean-Marie Lehn einen Vortrag über supramolekulare Chemie. Die beiden sind Gewinner des Nobelpreises. Während der Tagung gab es viele interessante Mikrosymposien, wie zum Beispiel „Crystallography in Solid State“ und „PDF Analysis and Diffuse Scattering in X-Ray, Neutron and Electron Diffraction“. Normalerweise wurden sechs Mikrosymposien gleichzeitig gehalten. Deshalb konnte ich nicht jeden Vortrag besuchen, für den ich mich interessierte. Viele Wissenschaftler aus Deutschland haben ihre Vorträge gegeben, von denen ich insbesondere die von Francesca Fabbiani und Martin Schmidt besucht habe. Am 30. August habe ich ein Poster über ein MOF (*Metal-Organic Framework*) präsentiert. Die Postersitzung dauerte 90 Minuten. Während dieser Zeit konnte ich mit anderen Kristallographen über die Herstellung des MOFs und seine Anwendungsmöglichkeiten diskutieren.

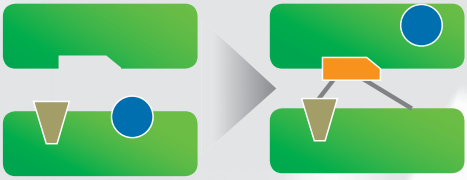
Neben dem ausgezeichneten wissenschaftlichen Programm boten sich dort auch gesellschaftliche Veranstaltungen. Ich nahm an zwei Veranstaltungen teil: „Young Crystallographers Mixer“ und „Historical evening walk through Basel“. Dadurch habe ich viele Kristallographen aus anderen Ländern und auch die Stadt Basel besser kennengelernt.

Insgesamt bot die ECM30 Wissenschaftlern aus dem Gebiet der Kristallographie eine Chance ihre Ideen auszutauschen und ihre Forschungsergebnisse zu zeigen. Ich bin sehr froh, dass ich eine schöne Zeit in Basel hatte. Deswegen möchte ich mich bei der DGK für die finanzielle Unterstützung bedanken.

Fragment Screening simplified – Frag Xtal Screen

Jena Bioscience
Building Blocks of Life

In drug discovery, often small molecules ("fragments") are screened for efficient binding* to a specific protein target. Due to their small size, fragments can be chemically evolved or linked to each other, finally yielding a desired high-affinity lead structure[1] (Fig. 1).



Fragments with millimolar affinity but high efficiency*

Nanomolar lead structure

Figure 1
Fragment-based lead discovery takes advantage of fragment evolution and linking. Small individual fragments with inherently low affinity but high efficiency are grown according to the structural model. The efficient binding of the fragments results in a nanomolar lead structure.*

The new Frag Xtal Screen is based on the approach "Crystallography first": X-ray crystallography shows not only whether a fragment binds to the protein but also where and how the binding occurs.

Cat. No.	Amount
X-FS-101	96 fragments (2 x 50 nmol each)

The Frag Xtal Screen...

- ...consists of 96 fragments covering a large chemical space, selected by the groups of Gerhard Klebe (University of Marburg) and Manfred Weiss (BESSY II) based on
  - » a priori validation through compound selection from PDBeChem entries[5]
  - » proven capability of fragments to bind to proteins[2,5]
  - » validation with aspartic protease endothiapepsin (EP), hit rate 10 %[2]
- ...allows crystal soaking with fragment concentrations > 90 mM resulting in functional mapping of the entire target and identification of multiple binding sites
- ...avoids losing potential hits that are not identified by prescreening methods[3,4]

Assuming practical skills in transferring crystals and cryocooling, **96 distinct fragments can be screened within one week**.

* binding efficiency = high binding energy/molecular mass

References:
[1] Rees *et al.* (2004) Fragment-based lead discovery *Nat. Rev. Drug Discov.* **3:**660.
[2] Huschmann *et al.* (2016) Structures of endothiapepsin-fragment complexes from crystallographic fragment screening using a novel, diverse and affordable 96-compound fragment library. *Acta Cryst F* **72:**346.
[3] Schiebel *et al.* (2016) Six Biophysical Screening Methods Miss a Large Proportion of Crystallographic Discovered Fragment Hits: A Case Study. *ACS Chem. Biol.* **11:**1693.
[4] Schiebel *et al.* (2015) One Question, Multiple Answers: Biochemical and Biophysical Screening Methods Retrieve Deviating Fragment Hit Lists. *ChemMedChem* **10:**1511.
[5] www.ebi.ac.uk/pdbe-srv/pdbechem

Jena Bioscience GmbH
Loebstedter Str. 71 | D-07749 Jena
Phone +49 (0)3641- 62 85 000
info@jenabioscience.com | www.jenabioscience.com

Crystallography & Cryo-EM

HERCULES EUROPEAN SCHOOL: 5 WOCHEN MIT RÖNTGENSTRAHLEN UND NEUTRONEN

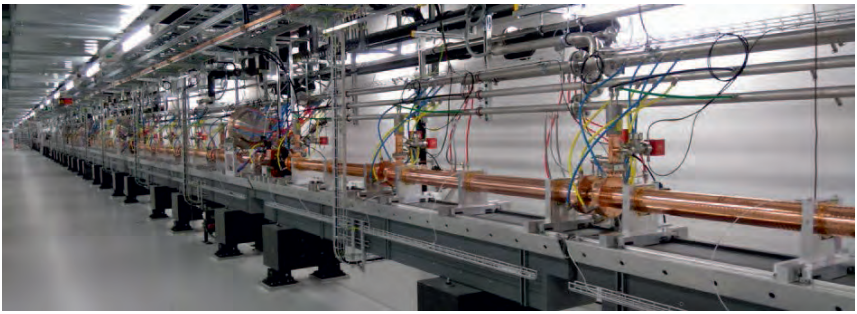
Seit 1991 findet jedes Jahr im März der HERCULES-Kurs in Grenoble, Frankreich statt. Dieser 5-wöchige internationale Kurs bietet 72 Teilnehmern verschiedener Forschungsgebiete (Biologie, Chemie, Physik, Materialwissenschaften, Geowissenschaften) die einzigartige Möglichkeit, vielzählige Röntgen- und Neutronentechniken kennenzulernen und diese sogar an verschiedenen Großforschungseinrichtungen anzuwenden. In diesem Jahr konnten gleich drei „Junge Kristallographen" an diesem Kurs teilnehmen und berichten nun von ihren Erfahrungen.

Der Kurs beginnt mit Grundvorlesungen und Auffrischungsstunden zu den Themen Kristallographie, Spektroskopie, Magnetismus und vielem mehr. Die erste Woche wurde aufgelockert durch Führungen in der Neutronenquelle *Institute Laue-Langevin* (ILL) und der Röntgenquelle *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) und auch durch soziale Aktivitäten wie den Cocktail-Abend, eine Poster-Session, ein Willkommens-Dinner und die Schneeschuh-Wanderung. In der zweiten Woche wurden die Vorlesungen spezialisierter, zusätzlich nahmen wir auch an kleineren Seminaren und Praktika am ILL teil. Die dritte Woche startete mit Praktika am ESRF, wo einige von uns Messungen an „verbotenen" Reflexen vornehmen konnten.

Während der vierten Woche wurde unsere große Gruppe in drei kleinere Gruppen aufgespalten, um Versuche an anderen Röntgen- und Neutronenquellen außerhalb von Grenoble durchzuführen. Wir fuhren nach Villigen (Schweiz), Trieste (Italien) oder Paris (Frankreich). Kleine Teams à 4 Personen untersuchten gemeinsam verschiedene Proben mit unterschiedlichen Techniken während ein- oder zweitägigen Experimenten. Die gesammelten Erfahrungen wurden abschließend durch Präsentationen mit den anderen Teilnehmern geteilt.

Das Paul-Scherrer-Institut (PSI) in Villigen umfasst ein Synchrotron, eine Neutronenspallationsquelle, eine Myonenquelle und einen Freie-Elektronen-Laser. Diese Forschungseinrichtung hat uns mit ihrer außerordentlich ländlichen Umgebung überrascht. Hier ist fokussierte Forschung garantiert. Wir waren im Gästehaus untergebracht, mit seinem luxuriösen Fernsehraum, großer Küche und (am wichtigsten) dem Freizeitzimmer mit Tischfußball und Darts. Wir wurden durch alle wichtigen Teile der Einrichtung geführt und sogar durch die Tunnel des Synchrotron und des *SwissFEL*. Theoretisch und praktisch wurde unser Aufenthalt durch Vorlesungen und Experimente abgerundet.

In Paris-Saclay hatten wir einen Tag mit Vorlesungen, ein halbtägiges Seminar zu Optik-Berechnungen, zwei Tage am Synchrotron *SOLEIL* und einen Tag am Neutronenlabor *Laboratoire Léon Brillouin* (LLB). An jedem Tag haben wir an einer anderen *Beamline* ein Experiment durchgeführt, jedoch immer an der gleichen Probe. Am Ende der Woche haben wir alle gewonnenen Daten zusammengetragen und analysiert, um sie in einer kurzen Präsentation den anderen vorzustellen. Unser Hotel lag in Massy-Palaiseau, nur 20 Minuten vom Pariser Stadtzentrum entfernt. Nach jedem anstrengenden Tag konnten wir im Hoteleigenen Swimmingpool, einem Jacuzzi und zwei Saunen entspannen. Neben der wissenschaftlichen Erfahrung konnten wir an zwei sonnigen Tagen die wunderschöne Hauptstadt Frankreichs besuchen.



Die letzte Gruppe fuhr nach Trieste und besuchte das Synchrotron *ELETTRA* und den Freie-Elektronen-Laser *FERMI*. Von uns beiden war keiner dort, aber wir haben gehört, dass das italienische Essen wirklich magisch ist. Obwohl es durch ein Wasserleck keinen Röntgenstrahl während dieser Woche an ELETTRA gab, konnten die HERCULES-Teilnehmer doch viele Experimente an anderen Instrumenten vornehmen. Vor ihrer 14-stündigen Fahrt zurück nach Grenoble machten sie einen Ausflug nach Venedig und blieben dort für einen Tag.

In der letzten Woche kamen alle Teilnehmer zurück nach Grenoble, um die letzten Vorlesungen und Seminare zu hören. Die Schule endete am Donnerstag mit einer Präsentation über das Leben des mythischen Hercules, gefolgt von einer Abschiedsfeier mit Wein und Käse von der sich Stück für Stück die Teilnehmer verabschiedeten, um nach Hause zu ihrer Familie, Freunden und Wissenschaft zurückzukehren.

Dieser Kurs ist eine einmalige Gelegenheit, um „alles“ über Synchrotron- und Neutronentechniken zu lernen und auch um ein weltweites Netzwerk mit anderen Wissenschaftlern aus ähnlichen Forschungsgebieten aufzubauen.

Die Anmeldung ist jedes Jahr im September und Oktober offen für alle Interessierten: *http://hercules-school.eu*

Melanie Nentwich, Freiberg und Khai-Nghi Truong, Aachen

Die Arbeitskreise der DGK berichten

BERICHT ZUM DGK-AK1-WORKSHOP „DIFFRACTION DATA COLLECTION USING SYNCHROTRON RADIATION“

30.06. – 02.07.2016, HZB BERLIN-ADLERSHOF

Bereits seit 2007 ist eine der Hauptaktivitäten des Arbeitskreises 1 „Biologische Strukturen“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) die Organisation und Ausrichtung des Workshops „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ am BESSY II-Synchrotron des Helmholtz-Zentrums Berlin in Berlin-Adlershof. In diesem Jahr fand der Workshop bereits zum fünften Mal nach 2007, 2009, 2011 und 2013 statt; in diesem Jahr vom 30. Juni bis zum 02. Juli.

In dem Workshop liegt das Augenmerk auf der Vermittlung von theoretischem Wissen und praktischen Fertigkeiten auf dem Gebiet der makromolekularen Kristallographie bei der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung von Röntgenbeugungsexperimenten unter der Verwendung von Synchrotronstrahlung. Der Teilnehmerkreis bestand aus 20 jungen Doktoranden im Bereich Strukturbiologie aus Deutschland, Dänemark, Belgien, England, Finnland, Italien, Israel, Polen und Portugal, die aus insgesamt 77 Bewerbern ausgewählt wurden. Alle Teilnehmer besaßen kaum oder allenfalls sehr begrenzte Kenntnisse auf dem Gebiet der Streudatensammlung an Kristallen von biologischen Makromolekülen, die durch den Workshop vertieft werden sollten.

Der dreitägige Workshop (*https://www.helmholtz-berlin.de/events/bessy-mx-workshop*) beinhaltete die Vermittlung der wissenschaftlichen Grundlagen in 10 Vorträgen der sieben eingeladenen Betreuer und Organisatoren zu den Themen Röntgenstrahlung, Kristallvorbereitung, Sammlung und Auswertung von Diffraktionsdaten am Synchrotron, Qualitätskriterien von Diffraktionsdaten, Strahlenschäden sowie Phasenbestimmung. Weiterhin wurden die Studenten während der Durchführung von fünf Röntgenbeugungsexperimenten (je ein Experiment pro Gruppe von vier Studenten) an den HZB-Strahlrohren für Makromolekulare Kristallographie BL14.1 und BL14.3 und bei der erfolgreichen Auswertung der Beugungsdaten durch die Betreuer unterstützt. Am Ende des Workshops hatten die Studenten Gelegenheit, ihre Experimente und die dabei erzielten Ergebnisse als Präsentation den anderen Teilnehmern vorzustellen. Das wissenschaftliche Programm wurde durch eine Postersession mit Beiträgen der Workshopteilnehmer abgerundet und es wurde ein durch die IUCr gestifteter Posterpreis für das beste Poster vergeben. Diesen erhielt Maria Martinez-Molledo vom EMBL in Hamburg für ihr Poster „Locking a proton-dependent oligopeptide transporter“. Eine Besonderheit dabei war, dass, wie bereits beim letzten Mal, die 20 teilnehmenden Studenten selbst das beste Poster gekürt haben.

Die Veranstaltung konnte durch die großzügige finanzielle Unterstützung der DGK und des HZB sowie durch Spenden der IUCr und von internationalen Firmen und einer sehr moderaten Tagungsgebühr von 80 € bzw. 100 € pro Teilnehmer vollständig finanziert werden. Die Organisatoren und auch die Teilnehmer schätzten diesen Workshop als sehr gelungen ein. Durch das große Engagement aller Mitwirkenden war es möglich, das sehr anspruchsvolle Programm umzusetzen und somit ein Maximum an Wissensvermittlung zu erreichen. Aufgrund des überaus positiven Feedbacks seitens der Teilnehmer, wird der Workshop im Jahr 2018 erneut stattfinden.

Teilnehmer, Tutoren und Gäste des DGK-AK1-Workshops 2016 am HZB in Berlin-Adlershof

Annette Faust, Kiel und Manfred S. Weiss, Berlin

XXXV. Arbeitstagung des Arbeitskreises nichtkristalline, partiellkristalline und nanokristalline Strukturen

16.–17. Februar 2017, Johannes Gutenberg-Universität Mainz

Der Arbeitskreis führte seine XXXV. Arbeitstagung gemeinsam mit dem Workshop „Bridging the scales in Glasses III“ vom 16. bis 17. Februar 2017 in Mainz an der Johannes Gutenberg-Universität durch. Die Tagung war gemeinsam von Prof. Jürgen Horbach (Düsseldorf) und Prof. Thomas Speck (Mainz) vorbereitet worden. Der Workshop verzeichnete etwa vierzig Teilnehmer und Teilnehmerinnen. Es wurden zwanzig Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit – auch zu anschließenden Diskussionen – zur Verfügung stand, was mit großem Gewinn rege angenommen und realisiert wurde, und elf Poster gezeigt. Der Workshop zeichnete sich durch eine angenehme und offene Atmosphäre aus. Von allen Teilnehmern wurde der Workshop als sehr gelungen, sowohl bezüglich des Inhaltes als auch der Organisation, empfunden.

Der thematische Schwerpunkt war auf die Struktur und die Dynamik amorpher Festkörper – entsprechend dem Titel über einen weiten Skalenbereich – gerichtet. Mikroskopische Mechanismen makroskopischer Prozesse, wie der nichtlineare Response von Gläsern auf äußere Felder, die Bedeutung von raumzeitlichen Langrangkorrelationen von Fluktuationen, der Einfluss der Bildung spezifischer lokaler Einzelpartikelstrukturen und ihrer Beweglichkeit bis hin zur Entwicklung von Scherbändern, von Bruch und Phasenseparation sowie nichtkristallinen Phasenübergängen, stellten den speziellen Fokus des Workshops dar.

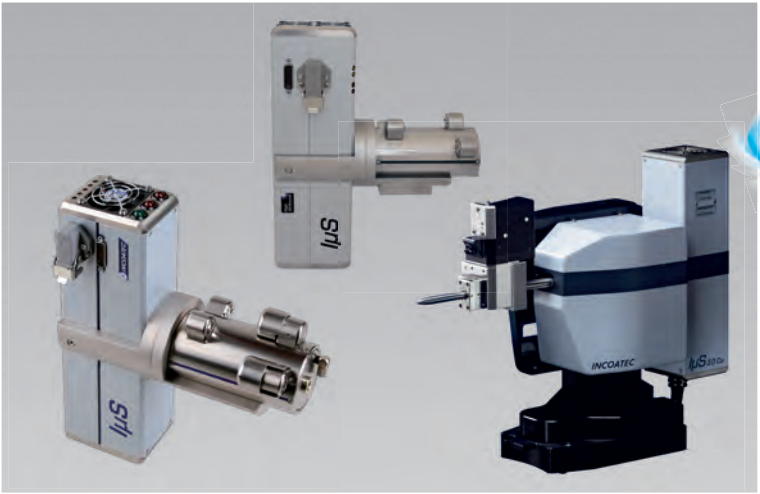
Herr Prof. Jürgen Horbach (*horbach@thphy.uni-duesseldorf.de*), Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, wurde am 16.02.2017 einstimmig als Sprecher des Arbeitskreises wiedergewählt. Herr Dr. Uwe Hoppe (*uwe.hoppe@uni-rostock.de*), Institut für Physik, Universität Rostock, wurde als Stellvertreter des Sprechers ebenfalls einstimmig gewählt.

Jürgen Horbach, Düsseldorf und Uwe Hoppe, Rostock

INCOATEC
innovative coating technologies

10 Years Incoatec Microfocus Source IμS

10 years IμS Celebrate the power



The three generations of Incoatec Microfocus Sources: IμS, IμS High Brilliance and IμS 3.0

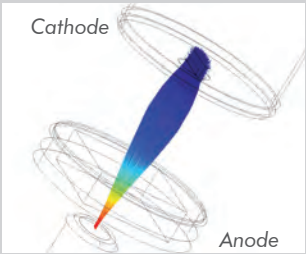
The Air-cooled, Most Powerful Microfocus Sealed Tube X-ray Source

- With Incoatec´s X-ray Tube IXT - the first and only microfocus sealed tube optimized for crystallography, designed by Incoatec
- Montel multilayer mirrors for 2D focusing or collimating
- Available for different energies - Cu, Mo, Ag, Cr and Co radiation
- Superb performance comparable to microfocus rotating anodes
- 3 years warranty, long lifetime without maintenance, and low cost of ownership
- Highest safety standards; compliant with Machinery Directive 2006/42/EC
- Easily adaptable to all common goniometers

Bright. Brighter. Unique.

IXT - The Tube Story

The Incoatec X-ray Tube *IXT* is the first and only microfocus sealed tube that is designed and optimized for crystallography. Other microfocus tubes on the market are designed primarily for radiography. Higher intensities were achieved by optimizing critical tube parameters such as the take-off angle and electron beam shape on the anode. This new tube technology gives Incoatec the exclusive opportunity to offer the IμS with specifications not achievable with other microfocus sealed tubes on the market.



Electron-optic ray-tracing optimization of the focal spot

Bericht des AK6 „Molekülverbindungen“ zur Sommerschule Hardehausen 2016

19.–23. September 2016, Kloster Hardehausen

Vom 19. bis 23. September 2016 veranstaltete der AK6 „Molekülverbindungen“ der DGK die Sommerschule „Grundlagen der Einkristalldiffraktion“ in ihrer neunten Auflage. Bewährtes traf auf Neues: „Wie immer“ fand die Veranstaltung im Kloster Hardehausen nahe Warburg/Westfalen statt und „wie immer“ wurden das reizvolle landschaftliche Umfeld, die Unterbringung und die Verpflegung von Teilnehmern wie Dozenten gelobt.

Erstmals fand die Sommerschule ohne ihren Mit-Initiator Christian Lehmann (MPI für Kohlenforschung, Mülheim) statt, dem wir an dieser Stelle herzlich für sein langjähriges Engagement als Dozent und Co-Organisator danken. Den reibungslosen Ablauf der Veranstaltung garantierte Ulli Flörke (Universität Paderborn) – vielen Dank im Namen der Teilnehmer und Dozenten!

Das wissenschaftliche Programm bestritten neben den bereits in der Vergangenheit aktiven Dozenten auch zwei Wissenschaftler, die wir erstmals für die Sommerschule gewinnen konnten: Zu Michael Bolte (Universität Frankfurt), Peter Jones (TU Braunschweig), Martin Nieger (Universität Helsinki), Dieter Schollmeyer (Universität Mainz) und Ulli Englert (RWTH Aachen) gesellten sich Beatrice Braun (Humboldt Universität Berlin) und Christoph Wölper (Universität Duisburg-Essen), auf deren zukünftige Mitarbeit wir zählen können – und müssen! Die Nachfrage nach einer Einführung in die „Grundlagen der Einkristall-diffraktion“ jenseits von Software und Computer ist ungebrochen und äußert sich darin, dass auch diesmal alle 36 Plätze ausgebucht waren und eine Warteliste existierte. Das Konzept der Sommerschule soll auch im nächsten Durchgang 2018 erhalten bleiben. Die obligatorische Wanderung fand 2016 (erstmals?) bei trockenem Wetter statt. Diese Neuerung wurde dankbar aufgenommen und soll etabliert werden!

Die Sommerschule einschließlich Unterbringung und Vollpension konnte zu einem sehr günstigen Gesamtpreis angeboten werden, weil uns auch diesmal wieder nicht nur Gerätehersteller, sondern auch die DGK großzügig unterstützt haben – Danke!

Ulli Englert, Aachen

DGK-AK7-Workshop „Breaking the Walls: Complementary of Synchrotron and Neutron Scattering“

30.–31. März 2017, KIT Karlsruhe

Am 30. und 31. März 2017 fand in Karlsruhe im Anschluss an die Jahrestagung der DGK ein Workshop zum Thema „Breaking the Walls: Complementary of Synchrotron and Neutron Scattering“ statt. Der vom Arbeitskreis 7 „Neutronenstreuung“ mit Unterstützung der Kollegen vom KIT (H. Ehrenberg, F. Weber) und JCNS (A. Schneidewind) organisierte Workshop richtete sich vor allem an den wissenschaftlichen Nachwuchs. Sein Ziel war es, die Eigenarten der unterschiedlichen Strahlungsarten zu präsentieren, und zu zeigen, wie man diese geschickt kombinieren kann, um möglichst umfassende und eindeutige Antworten auf aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen erhalten zu können. Daneben wurden auch praktische Aspekte aufgegriffen, zum Beispiel: Wie komme ich als User an Messzeit an einer „Large Scale Facility“.

© H. Ehrenberg (KIT)

Am Donnerstagnachmittag wurden durch K. Röwer (HZB) und M. Meven (RWTH Aachen/JCNS@MLZ) jeweils die Grundlagen der Synchrotron- bzw. Neutronenstreuung sowie ein Überblick der dazugehörigen Einrichtungen zu deren Produktion vorgestellt. Am Freitagvormittag wurdem in insgesamt vier verschiedenen Vorträgen von S. Rosenkranz (Argonne, USA), T. Schrader (JCNS@MLZ), F. Weber und F. Tissault (KIT) sowie M. Behrens (Universität Duisburg-Essen) verschiedene aktuelle Themen aus dem Bereichen Grundlagenforschung und Materialforschung präsentiert, in deren Anschluss lebhafte Diskussionen mit den Teilnehmern stattfanden.

Der Wunsch des wissenschaftlichen Nachwuchses, sich „über den Tellerrand hinaus“ über alternative Methoden zur Untersuchung aktueller wissenschaftlicher Themen zu informieren, spiegelt sich auch in den mehr als fünfzig Anmeldungen zu dem Workshop wieder. Etwa die Hälfte der Teilnehmer nahm außerdem mit großem Interesse am Freitagnachmittag an einer Führung durch ANKA, der Karlsruher Synchrotronquelle teil, um sich ein direktes Bild von der Struktur und Organisation einer „Large Scale Facility“ zu machen.

Martin Meven, Aachen

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry

HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

- ☑ A factor of more than100 faster compared to conventional step scan
- ☑ X-ray powder diffraction in 45° (asymmetric) transmission, 0° to 100° 2-theta
- ☑ Bulk samples in 17°(fixed grazing incidence) reflection, 50° to 150° 2-theta
- ☑ Plane foil or capillary samples. 8-fold sample changer for plane foil samples
- ☑ Vertical mount for liquids, 0° to 20°(adjustable grazing incidence) reflection
- ☑ Focussing monochromatic radiation, Kα, stripping not required
- ☑ Range of Bragg angles 100° 2-theta, 20001 steps @ 0.005°
- ☑ Laser scans signals @ 16 Bit A/D res. Linear dynamic range up to 200,000 counts
- ☑ Creates all common ASCII file types ready for data evaluation like Rietveld-Refinement
- ☑ Low-temperature attachment: Closed cycle He-refrigerator, 10 to 320 K
- ☑ Hi-temperature attachment: Diode laser heater, 300 to 1800 K
- ☑ Hi-pressure attachment: Diamond anvil cell, upto 70 GPa

HUBER

X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

HUBER Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG
Sommerstrasse 4
D-83253 Rimsting / Chiemsee
Germany

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

Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2016

Vom 17. bis 20. Mai 2016 fand am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum der alljährliche Shortcourse der DMG/DGK „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ statt. Zu diesem 16. Shortcourse kamen sieben Studierende und Doktoranden verschiedener naturwissenschaftlicher Disziplinen aus Freiberg, Weimar, Jena, Regensburg, Salzburg, Karlsruhe und Bochum zusammen.

Der nächste Shortcourse wird vom 06. bis 09. Juni 2017 stattfinden.

Der Arbeitskreis 12 wird auf der DGK-Tagung in Karlsruhe wieder ein Mikrosymposium „Spectroscopy as supporting tool in crystallography“ mit angegliederter Postersession am Donnerstag, den 30.03.2017 durchführen. Von den insgesamt neun angemeldeten Beiträgen werden sechs als Vorträge und drei als Poster präsentiert.

Michael Fechtelkord, Bochum

Omega/Theta X-ray diffractometer

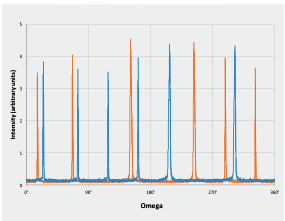
Ultra-fast crystal orientation

Rocking-curve measurements

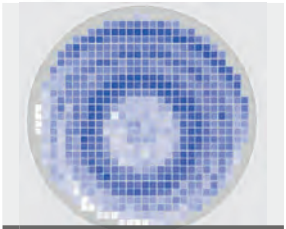
SiC stacking and quality evaluation

Production and Quality Control

+ **Measurement speed:** < 5 seconds per sample
+ **Transfer technology:** up to 12 orientated crystals on one slicing beam
+ **Versatility:** orientation and poly-type determination of SiC (2H, 4H, 6H & 15R) and more than 40 other materials
+ **Highest precision:** angular accuracy of 0.003°



Omega-scan diagram (SiC)



Wafer orientation map (Si, Ge)

Freiberg Instruments GmbH
Delfter Str. 6
D-09599 Freiberg, Germany
t +49 3731 419 54 0
f +49 3731 419 54 14
sales@freiberginstruments.com
www.freiberginstruments.com

Bericht zum 17. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“

6.–9. Juni 2017, Ruhr-Universität Bochum

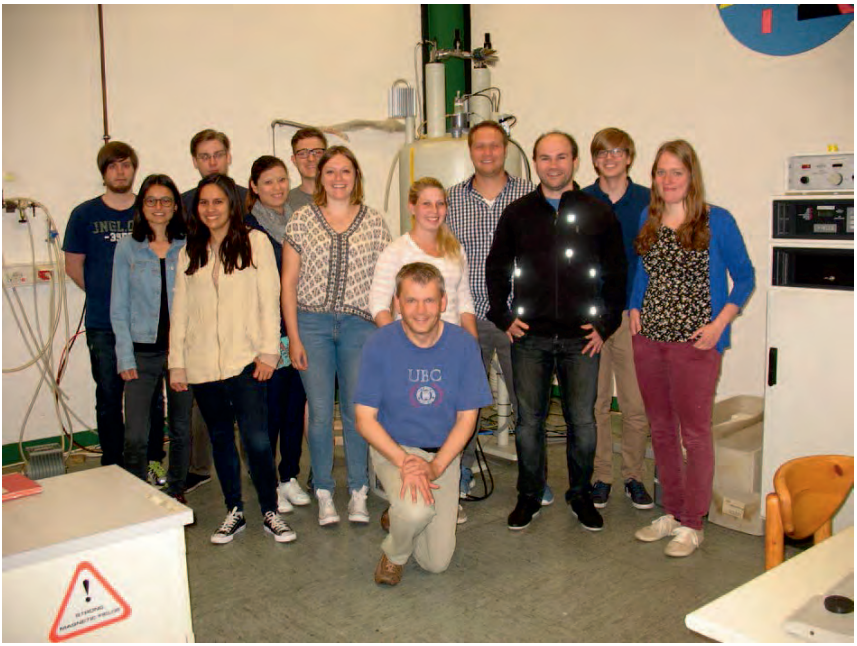
Zwischen dem 6. und 9. Juni 2017 fand der 17. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum unter der Leitung von Herrn PD Dr. Michael Fechtelkord statt. Auch in diesem Jahr gelang es Dr. Fechtelkord 12 Teilnehmern bestehend aus Studenten und Doktoranden aus den Städten Bonn, Bochum, Münster, Hannover, Heidelberg, Karlsruhe und Stuttgart, der unterschiedlichsten Bereiche der Geowissenschaften, Chemie und Chemieingenieurwesen, für die Methode der Festkörper-NMR-Spektroskopie zu begeistern.

Die Festkörper-NMR-Spektroskopie ist eine Methode zur lokalen Strukturaufklärung, mit der sich Informationen über lokale Symmetrien, Atomnachbarschaften, Bindungswinkel, dynamische Prozesse und Nahordnungen in amorphen Systemen gewinnen lassen. Jeder Kurstag gliederte sich in einen theoretischen Teil (vormittags), dem am Nachmittag ein anwendungsorientierter Teil folgte.

Der Kurs begann mit einem allgemeinen Überblick über die Anwendungsmöglichkeiten der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der Forschung und den dafür benötigten Grundlagen, von der geschichtlichen Entwicklung bis hin zum Geräteaufbau. Anschließend fand eine praktische Einführung am Bruker-ASX400-Spektrometer statt, bei der die Probenpräparation, das Wechseln des Probenkopfes, die grundlegende Bedienung des Spektrometers und dessen Programms geübt wurden. In praktischen Übungen konnte die Theorie am Nachmittag angewandt werden. Die Auswertung der Ergebnisse erfolgte graphisch auf Millimeterpapier.
Bei der *Icebreaker*-Party am Abend im Campus-nahen „Summa Cum Laude“ konnten sich die Teilnehmer bei einem gemütlichen Beisammensein besser kennenlernen.

Der zweite Kurstag war den homo- und heteronuklearen magnetischen dipolaren Wechselwirkungen, der chemischen Anisotropie sowie der Anwendung des „Magic Angle Spinning“ (MAS) gewidmet. Nach der Mittagspause wurden diese Erkenntnisse an ^{1}H-, ^{19}F- und ^{29}Si-MAS-NMR-Spektren des synthetischen Phlogopit angewandt und mit der Software DM2015 ausgewertet. Ein spaßiger Kegelabend rundete den Tag ab.

Als nächstes wurden im Kurs die Multipulstechniken mit dem Hahn’schen Echo, das INADEQUATE-Verfahren, bei dem kristallographisch unterschiedliche Tetraederplätze abgebildet werden, und die Grundlagen zur Kreuzpolarisation besprochen. Der praktische Teil galt an diesem Tag ^{1}H- und ^{29}Si-CPMAS-Messungen, die den Teilnehmern ermöglichten, die Atomabstände zwischen Wasserstoff und Silizium mit Hilfe des Computers zu ermitteln.



Der letzte Tag des Workshops stand im Fokus der neuesten methodischen Möglichkeiten der NMR-Spektroskopie: „Double Rotation“ (DOR), „Multi-Quanten-Magic-Angle-Spinning“ (MQMAS) und „Satellite Transition Spectroscopy“ (SATRAS). Dazu wurde neben der Theorie auch die praktische Anwendung näher erläutert. Im Anschluss wurden ^{23}Na-MAS- und ^{27}Al-SATRAS-NMR-Messungen durchgeführt, die zum Abschluss ausgewertet wurden. Insgesamt war dieser Workshop eine ausgewogene Mischung zwischen Theorie und Praxis und konnte zahlreiche Anreize setzen, sich mit der MAS-NMR-Spektroskopie intensiver zu befassen.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Michael Fechtelkord, der in nur vier Tagen in diesem sehr gut organisierten und anschaulichen Shortcourse nicht nur die quantenmechanischen Grundlagen dieser vielfältigen Methode veranschaulichen, sondern durch die angewandten und praktischen Experimente den Teilnehmern einen Einblick in die Festkörper-NMR-Spektroskopie vermitteln konnte.

Angela Patricia Moissl, Heidelberg

DECTRIS®

detecting the future

Available in Rigaku Oxford Diffraction and STOE instruments

PILATUS3 R CdTe

Direct detection large-area CdTe-detectors

- *Sharpest spatial resolution thanks to direct detection*
- *Quantum efficiency > 90% for Mo, Ag, and In*
- *Highest dynamic range*
- *No readout and dark noise*

laboratory and industry

sales@dectris.com | www.dectris.com

Rückblick zum DGK/DMG Ph.D. Student Course „Basics and Applications of the Rietveld Method“

6.–9. März 2017, MPI-FKF Stuttgart

Vom 6. bis 9. März 2017 fanden sich über 140 Teilnehmer diverser Nationalitäten in Stuttgart ein, um an dem interaktiven Rietveldkurs „Basics and Applications of the Rietveld Method“ der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) sowie der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) teilzunehmen. Gastgeber und Organisatoren waren Prof. Dr. Robert E. Dinnebier und sein Team vom Max-Planck-Institut für Festkörperforschung (MPI-FKF) in Kooperation mit den Universitäten Tübingen und Stuttgart sowie dem Arbeitskreis AK13 Pulverdiffraktometrie der DGK.

Der Kurs vermittelte grundlegende Arbeitstechniken zur Strukturlösung und Strukturverfeinerung aus Röntgenbeugungsdaten an Pulvern mittels der Software Topas 5 (Bruker Corporation). Dabei konnten die Teilnehmerinnen und Teilnehmer an ihren eigenen Notebooks mittels einer Topas-Leihversion interaktiv am Kurs teilnehmen. Kursleiter und Hauptredner Prof. Dr. Robert Dinnebier behandelte hierbei folgende Themen:

- Basics of powder diffraction and Rietveld refinement
- Whole Powder Pattern Fitting (WPPF), fundamental parameters (FP), complex reflection profiles
- Determination of the Instrument Resolution Function (IRF) for powder diffractometers
- Angular and intensity corrections (LP factor, absorption, microabsorption, extinction, preferred orientation, sample height, zero error, …)
- Methods to develop a starting model for crystal structure determination
- Penalty functions, constraints, restraints
- Rigid Bodies (RB) (flexible polyhedra, molecules, z-matrices)
- Strategies for structure determination, global optimization in direct space, charge flipping (CF)
- Difference Fourier Analysis in combination with Rietveld refinement
- Isotropic and anisotropic microstructural parameters
- Quantitative Phase Analysis (QPA) with the Rietveld method
- Different methods for quantifying the amorphous content
- Symmetry and rotation modes as alternatives ways of describing crystal structures
- Local and global optimization of the Pair Distribution Function (PDF)

Darüber hinaus referierten erfahrene Kristallographen über die Verwendung von Topas zur Lösung folgender kristallographischer Fragestellungen:

- Refinement of crystal structures with stacking faults using Rietveld analysis: Dr. Sebastian Bette (MPI-FKF)
- Mikrostrukturanalyse: Prof. Dr. Andreas Leineweber (Universität Freiberg)
- Sequential and parametric Rietveld refinement in dependence on external variables, Macro programming: Dr. Martin Etter (DESY Hamburg)
- Success in structure solution as a result of specific data collection strategy: Dr. Dubravka Sisak Jung (Dectris GmbH, Baden-Dättwil, Schweiz)

Darüber hinaus war Dr. Alan Coelho, Autor von Topas, eigens für den Kurs aus Brisbane (Australien) angereist. Er begleitete den gesamten Kurs und stand für zahlreiche Fragen Rede und Antwort. Außerdem stellte Dr. Coelho einige Neuerungen des in Kürze erscheinenden Topas 6 vor.

Zwischen den Vorträgen diente die Industrieausstellung mit Unternehmen aus dem kristallographischen Bereich als zentraler Treffpunkt. Diese sowie die sehr gute kulinarische Versorgung luden in den Pausen zu Gesprächen und Fachsimpelei mit wissenschaftlichen Kolleginnen und Kollegen ein. Ein besonderes Highlight in dieser Hinsicht stellte der gesellschaftliche Abend in der Kantine des Max-Planck-Institutes dar. Die Organisatoren hatten hierfür keine Kosten und Mühen gescheut. Das Abendessen bot den optimalen Rahmen zur Knüpfung neuer Kontakte mit vielen fruchtbaren wissenschaftlichen Diskussionen.

Für die großzügige Unterstützung sei an dieser Stelle den zahlreichen Sponsoren gedankt, die diesen Kurs erst ermöglichten: Dem Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft, der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, dem *International Centre for Diffraction Data* sowie den Firmen Stoe & Cie GmbH, Bruker Corporation und Crystal Impact GbR.

Für die gewinnbringende Zeit und den reibungslosen Ablauf des Kurses möchte ich an dieser Stelle abschließend dem Organisationsteam sowie allen Sprecherinnen und Sprechern, Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern sowie allen Teilnehmerinnen und Teilnehmern danken.

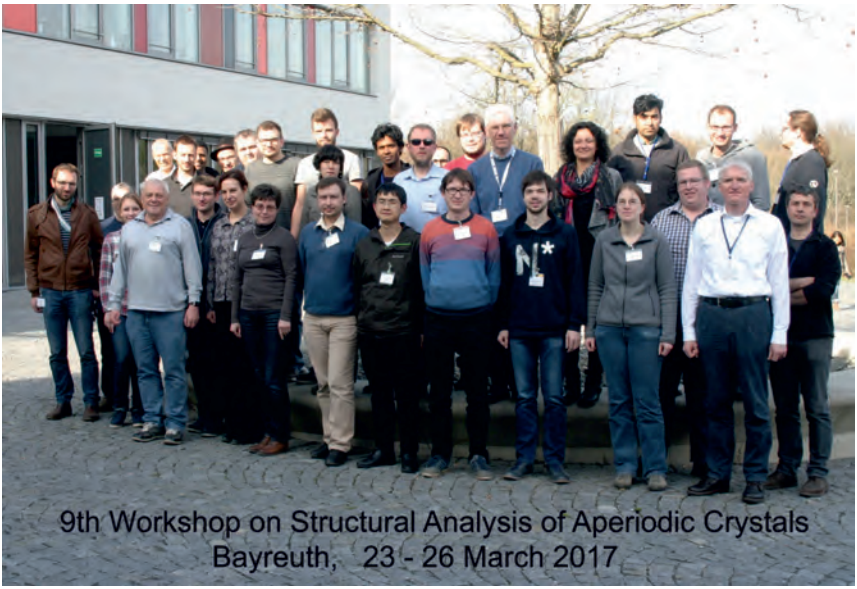
Roland Zenn, Stuttgart

Report on the 9th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals

23–26 March 2017, University of Bayreuth

The 9th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals took place at the University of Bayreuth from 23 through 26 March 2017. The workshop has been organized by the Special Interest Group on Aperiodic Crystals (AK 16) of the German Crystallographic Association (DGK). Local organisation was by Andreas Schönleber and Sander van Smaalen. The University of Bayreuth provided several seminar rooms for lectures, tutorials and the poster session. The objectives of the workshop were to provide an overview of aperiodic order in crystals, to teach the basics of the superspace description of modulated structures and crystal chemical understanding of aperiodic crystals, as well as to introduce a working knowledge of structural analysis of aperiodic crystals.

Lecturers were Michal Dusek, Lukas Palatinus and Vaclav Petricek from Prague, Czech Republic, Olivier Pérez from Caen, France and Andreas Schönleber and Sander van Smaalen from Bayreuth, Germany. The topics of the presentations were “Introduction to order in aperiodic crystals”, the “Superspace approach”, “Superspace symmetry” and an “Introduction to the use of the software Jana2006”. Advanced topics were “Diffraction by aperiodic crystals”, “Twinning and overlapping reflections”, “Structure solution”, “Crystal-chemical analysis applying the superspace approach”, “Symmetry of modulated structures”, “Special modulation functions”, “Modulated MOFs”, and “Graphical presentation in superspace”.



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

The Workshop started on Thursday afternoon with registration, a first lecture and a "Get together" party in the evening. On Saturday afternoon a poster session was organized, in which the participants presented and discussed their own research projects on aperiodic structures, on Saturday evening the "Conference dinner" took place. Every morning and every afternoon a 30 minute break with refreshments, fruits and snacks gave possibility for recovery and for discussion and exchange with participants and lecturers.

The 9th Workshop on Structural Analysis of Aperiodic Crystals was attended by 33 participants, including the lecturers, i. e. 14 young scientists (mainly PhD students) and 19 post-docs and senior scientists. The participants came from China (1), Czech Republic (3), France (1), India (1), Ireland (1), Germany (20), Russia (5), and Switzerland (1), from industry, research institutes and universities, including departments of solid state research, inorganic and analytical chemistry, theoretical chemistry, geosciences, materials science and crystallography. This list shows that interest in aperiodic crystals persists in all areas of research on the solid state.

Andreas Schönleber and Sander van Smaalen, Bayreuth

INTRODUCING THE ALL-NEW 64-BIT CRYSTALMAKER X

CrystalMaker®

Engineered from scratch for the latest hardware and operating systems

Breathtaking 3D Graphics
Volumetric Visualization
Molecular Modelling
Vibrational Spectra
Animation
Video

CrystalMaker, CrystalDiffract and SingleCrystal are registered trademarks of CrystalMaker Software Ltd.

Mac

Windows10 Compatible

The Mac logo is a registered trademark of Apple, Inc. The Windows trademark is a registered trademark of Microsoft, Inc.

3D Gesture Control
LEAP MOTION

Electron density contours for a small molecule, generated by CrystalMaker X

1994 – 2017
23 Years of Innovation

we innovate • others imitate

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

Seit vier Jahren ist der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ ein fester Bestandteil der DGK. Inzwischen hat der Arbeitskreis mehr als 160 Mitglieder aus 13 verschiedenen europäischen und nicht-europäischen Ländern. Die Mitglieder des Arbeitskreises gehören zu allen Fachbereichen, die die Kristallographie als Mittel zur Strukturaufklärung nutzen. Die meisten Mitglieder stammen aus den Materialwissenschaften (30 %) und der Chemie (27 %), die anderen Mitglieder verteilen sich auf die Fachbereiche Mineralogie (16 %), Biologie (14 %) und Physik (12 %). Vertreter von rein kristallographischen Instituten sind (fast) gar nicht vertreten. Das breite Interesse verdankt der Arbeitskreis der Präsenz und Nähe in virtueller und realer Form sowie der Unterstützung der Gruppenleiter und Industriepartner.

Der Arbeitskreis präsentiert sich online auf einer umfassenden Website im Rahmen der DGK-Homepage (*http://dgk-home.de/aks/jkyc*) sowie mit einem detaillierten und regelmäßig aktualisierten Blog. Die Jungen Kristallographen treffen sich regelmäßig während der DGK-Frühjahrstagungen. Bisher konnten wir auch jedes Jahr ein weiteres Treffen im Herbst organisieren, entweder an einer deutschen Hochschule oder zu einem *Lab Meeting*. Wir hoffen, dass wir diese schöne „Tradition“ auch in den kommenden Jahren weiter beibehalten können.

Im September 2016 fand das *2nd Meeting of the Young Crystallographers* in Berlin statt (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/berlin-2016*). Finanziell unterstützt durch unsere Industriepartner STOE, PANalytical, DECTRIS, Excillum, Bruker und Netzsch sowie dem Fonds der chemischen Industrie und der DGK selbst, konnten knapp 30 Teilnehmer ihre aktuellen Forschungsfragen miteinander diskutieren. Einen ausführlichen Bericht zu diesem Treffen gibt es im nachfolgenden Artikel von der Teilnehmerin Linda Hollenbeck (ehemals Bochum, momentan Köln). An dieser Stelle ein herzliches Dankeschön an die engagierten Organisatoren Lilith Domnik, Julia Ilina (beide HU Berlin) und Oliver Pecher (Cambridge, UK).

Im März 2017 haben die Jungen Kristallographen gleich mit mehreren Teilveranstaltungen aktiv zur DGK-Frühjahrstagung beigetragen (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/karlsruhe-2017*). In diesem Jahr konnten die Teilnehmer erstmals in zwei Mikrosymposien mit je 16 Kurzvorträgen einen ersten Eindruck ihrer aktuellen Arbeiten vermitteln. Dank der

hervorragenden Organisation der Sessions gab es nur eine parallele Veranstaltung, sodass eine große Zuhörerschaft anwesend war. Wir hoffen, auch im nächsten Jahr wieder zwei Symposien gestalten zu können, um dem Nachwuchs der DGK eine „Bühne“ geben zu können. Die *Lightning Talk Sessions* wurden gefolgt von den zugehörigen Poster-Sessions, in denen die Ergebnisse intensiv mit den anderen Tagungsteilnehmern diskutiert wurden. Auch dieses Jahr wurden wieder die drei besten Poster prämiert, gesponsert durch die Firma STOE. Herzlichen Glückwunsch an die Gewinner Antje Hirsch (Aachen), Matthias Künzle (Aachen) und Zoltán Balogh-Michels (Dübendorf, Schweiz). Des Weiteren fand während der Frühjahrstagung das etablierte *Get Together* statt, bei dem die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises kurz zusammengefasst und kommende Events beworben wurden. Dabei wurde ein neuer Sprecher gewählt: Khai-Nghi Truong (Aachen) hat die vormalige Sprecherin Carola Müller abgelöst und ist jetzt neben Melanie Nentwich (Freiberg) die Stimme der Jungen Kristallographen. An dieser Stelle möchten wir unseren Industriepartnern STOE und DECTRIS für die finanzielle Unterstützung des *Get Together* danken! Ebenfalls ein herzliches Dankeschön an die *Chairs* der einzelnen Sessions, die in Abwesenheit der AK-Chairs einen reibungslosen Ablauf gewährleistet haben.

Am 5. und 6. September 2017 wird das *2nd Lab Meeting @ STOE* in Darmstadt stattfinden. Die Organisation ist bereits in vollem Gange und die ersten Registrierungen sind bei uns eingegangen (*http://dgk-home.de/aks/jkyc/darmstadt-2017*). An diesen beiden Tagen wird es neben den bewährten *Lightning Talks* + Postern auch Touren durch die Labore von STOE geben sowie Nähkästchen-Talks aus Industrie und Akademie und ein *Barbecue* auf dem STOE-Gelände. Für die großzügige Unterstützung danken wir bereits jetzt STOE, DECTRIS und der DGK.

Ein großes Dankeschön gilt den ehemaligen Sprechern des Arbeitskreises Julia Dshemuchadse und Oliver Pecher, die auch im vergangenen Jahr aktiv an Planung und Organisation beteiligt waren und immer beratend zur Seite standen.

Melanie Nentwich, Freiberg und Khai-Nghi Truong, Aachen

Teilnehmer der Lightning-Session 1

Teilnehmer der Lightning-Session 2

Verleihung der Posterpreise

BERICHT VOM „2ND MEETING OF THE DGK'S YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS"

21.–23. SEPTEMBER 2016, HUMBOLDT UNIVERSITÄT ZU BERLIN

Kurz nach Beginn meines Masterstudiums der Kristallographie an der Ruhr-Universität Bochum wurde ich auf die DGK aufmerksam. Als das zweite Treffen der Jungen Kristallographen für September 2016 angekündigt wurde, meldete ich mich sofort an. Obwohl ich mich noch mitten im Studium befand, wollte ich am Treffen teilnehmen, um neue Leute kennenzulernen und in die unterschiedlichen Bereiche der Kristallographie einzutauchen.

Beim zweiten Treffen der Jungen Kristallographen der DGK vom 21. bis 23. September 2016 an der Humboldt Universität zu Berlin fanden sich sowohl 28 Teilnehmer von deutschen Universitäten und den Universitäten in Cambridge (UK), Casablanca (Marokko) und Otuoke (Nigeria) als auch drei Vertreter der Industrie und vier Ehrengäste aus dem akademischen Feld ein.

Das Herz des Treffens bildeten die *Lightning Talks*, in denen jeder Teilnehmer in fünf Minuten sein aktuelles Forschungsthema vorstellen konnte, um das Interesse der anderen Teilnehmer für die folgende Postersession zu wecken. Durch die große Anzahl an Teilnehmern fanden während des Treffens zwei *Lightning Talk*- bzw. Postersessions mit regen, fachübergreifenden Diskussionen statt. Drei Teilnehmer wurden für ihre Poster mit Preisen von STOE ausgezeichnet:

- Wei Meng: „Toward a High Temperature V_6O_{13} Based Lithium-Ion Battery"
- Dennis Wiedemann: „Making the Most of Neutron-Diffraction Data: Lithium Diffusion in Ramsdellite-Like $Li_2Ti_3O_7$"
- Greta Assmann: „Improvement of model quality by rejection of non-isomorphous frames using $CC_{1/2}$"

Neben den *Lightning Talks* gaben die Ehrengäste Holger Dobbek (Humboldt Universität Berlin, „Small molecule activation by metalloenzymes – insights from X-ray crystallography"), Francesca Fabbiani (Universität Göttingen, „High-pressure crystallography on molecular compounds: theory, practice and a personal journey") und Udo Heinemann (Max Dellbrück Center for Molecular Medicine Berlin, „Structural Basis of Transcriptional and Translational Gene Expression") in Plenarvorträgen einen umfangreichen und interessanten Einblick in ihre Forschungsbereiche. Es folgten angeregte Diskussionsrunden, in denen der fachliche Austausch der Teilnehmer mit den Ehrengästen möglich war. Durch die Vorträge der drei eingeladenen Industrievertreter (Christina Drahten/Bruker AXS, Thomas Hartmann/STOE und Sascha Grimm/Dectris) konnten wir erste Eindrücke über das jeweilige Arbeitsumfeld gewinnen.

Das Rahmenprogramm des Treffens umfasste nicht nur kulturelle Highlights wie den Besuch der „Berliner Unterwelten" und dem Naturkundemuseum, sondern auch einige entspannte und gesellige Abende wie das „Get Together" und der Besuch von „Clärchens Ballhaus", wo einige von uns das Tanzbein schwangen. Das Abschiedsessen im „White Trash" war ein krönender Abschluss für ein gelungenes und gut organisiertes zweites Treffen der Jungen Kristallographen.

Ich persönlich werde das Treffen in Berlin besonders lange in guter Erinnerung behalten. Ich habe viel Neues gelernt, einen Einblick in die Industrie erhalten und neue Leute getroffen. Vor allem aber bin ich durch einen Aushang auf eine Promotionsstelle in der Kristallographie an der Universität zu Köln aufmerksam geworden, auf die ich mich erfolgreich bewerben konnte und die ich im Mai 2017 angetreten habe.

Im Namen aller Teilnehmer danke ich Lilith Domnik (Berlin), Yulia Ilina (Berlin), Dr. Oliver Pecher (Cambridge) und Prof. Ulli Englert (Aachen) für die Organisation dieses erfolgreichen Treffens.

Ein großer Dank geht an die Industriesponsoren (STOE, PANalytical, DECTRIS, Excillum, Bruker AXS, NETZSCH) und an die DGK und FCI für die finanzielle Unterstützung der Reise- und Aufenthaltskosten. Ebenfalls danken wir Prof. Christian Lehmann (Mülheim), der eine große Hilfe bei der Organisation der finanziellen Mittel war.

In großer Vorfreude blicken wir auf das „DGK's Young Crystallographers Lab Meeting @ STOE Part II" am 5.–6. September 2017 in Darmstadt, organisiert von Melanie Nentwich (Freiberg), Martin Fark und Thomas Hartmann (STOE). Darüber hinaus haben sich die Jungen Kristallographen Khai-Nghi Truong und Stefanie Langenstück zusammen mit Prof. Ulli Englert (alle Aachen) dazu bereit erklärt das dritte Treffen der Jungen Kristallographen im August 2018 an der RWTH Aachen zu organisieren.

Linda Hollenbeck, Köln

Gruppenfoto (Michael Gaultois, Cambridge, UK)

PERSONALIA

JUBILARE 2017

Name	Ort	Alter
Karl-Friedrich Seifert	Bonn	90
Hans Burzlaff	Erlangen	85
Horst Pentinghaus	Karlsruhe	85
Günter Strübel	Ettingshausen	85
Helmut Weidner	Berlin	85
Herbert Boller	Linz	80
Walter Gonschorek	Aachen	80
Helmut Klapper	Aachen	80
Peter W. Mirwald	Innsbruck	80
Robert R. Reeber	Chapel Hill, NC	80
Hans Jörg Scheel	Pfaeffikon	80
Herbert Thurn	Stuttgart	80
Georg Amthauer	Salzburg	75
Alfonso Castineiras	Santiago de Compostella	75
Panayiotis C. Christidis	Thessaloniki	75
Heinz-Dieter Fenske	Karlsruhe	75
Dieter Freude	Leipzig	75
Friedrich Frey	München	75
Hans-Reiner Höche	Halle	75
Rolf Köhler	Berlin	75
Jürgen Kopf	Hamburg	75
Albrecht Mewis	Düsseldorf	75
Werner Press	Kiel	75
Julius Schneider	München	75
Carl Hellmuth Walter Schwalbe	Birmingham	75
George M. Sheldrick	Göttingen	75
Ingrid Svoboda	Darmstadt	75
Christoph Teske	Kiel	75
Herbert Wawra	Berlin	75
Rolf Arnold	Erlangen	70
Jürgen Härtwig	Grenoble	70
Wolfgang Johannes Hönle	Ettlingen	70
Wolfgang Jauch	Berlin	70
Bogdan Palosz	Warschau	70

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DES

MAX-VON-LAUE-PREISES 2017 AN THOMAS A. WHITE

FÜR SEINE HERAUSRAGENDE ARBEIT BEI DER ENTWICKLUNG DER CRYSTFEL-PROGRAMMSUITE ZUR VERARBEITUNG SERIELLER FEMTOSEKUNDEN-BEUGUNGSDATEN AUS EXPERIMENTEN AN FREIE-ELEKTRONEN-LASERN

Dear Thomas,

congratulation to the 2017 Max von Laue prize of the "Deutsche Gesellschaft für Kristallographie" for your "outstanding work on the development of the CrystFEL program suite for the processing of serial femtosecond diffraction data from experiments at free electron lasers".

Career:

- 1983: born in Greenock, UK
- 2005: Master of Science in physical and natural science (materials science and metallurgy), Downing College, University of Cambridge
- 2009: Ph.D., Dept. Mat. Sci. and Metallurgy, University of Cambridge, EM-group: Electron diffraction techniques for ab-initio crystallography structure determination and automated 3D data acquisition
- 2009: start as a PostDoc at CFEL/DESY
- 2011: staff scientist at CFEL/DESY

Serial Femtosecond Crystallography (SFX):

- Thousands to millions of diffraction images
- Tiny crystals
  - of different sizes
  - of different shapes
  - with reflection profiles governed by the shape function
  - destroyed after being hit by the beam
- Only snapshot still images → mostly partially recorded reflection intensities
- Fluctuating spectrum due to the FEL-SASE process (in profile and wavelength)
- Needed for structural analysis:
  - Crystal lattice
  - Space group
  - Integrated intensities

The program system CrystFEL established by Thomas White has been set up to meet the challenges for SFX by:

- Simulations guiding experiments
- Indexing reflections
- Statistical integration
- Averaging
- Post refinement
- Data quality assessment
- Visualization

Continuing development of the methods and codes improved:

- Data quality
- Reduces ambiguities like merohedral twinning
- Reduces number of diffraction images needed

CrystFEL program suite:

- Free and open-source software (GNU GPLv3)
- Documentation including a full tutorial online
- *http://www.desy.de/~twhite/crystfel*
- T. White et al.: Journal of Applied Crystallography 45 (2012) 335–341

Comment from the support letter of Henry Chapman:

I believe that Thomas' contributions to crystallography have been outstanding, original, and have been a key part in the development of serial crystallography and the amazingly rapid growth and improvement of the method since 2009. There are many important structures and studies that have resulted, with Thomas' direct involvement. One of these was the rhodopsin-arrestin complex, which Thomas determined had a very tricky symmetry (the paper in Nature was the most downloaded in that journal in 2015). I see that Thomas will continue to play a key and central role in the further development of crystallography, and will meet new challenges with much higher data rates at the European XFEL and other future sources, and will continue to push the boundaries of crystallography.

Edgar Weckert, Hamburg

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2017 AN PETER GILLE

FÜR SEINE HERAUSRAGENDEN WISSENSCHAFTLICHEN LEISTUNGEN AUF DEM GEBIET DER EINKRISTALLZÜCHTUNG DEKAGONALER UND IKOSAEDRISCHER QUASIKRISTALLE SOWIE KOMPLEXER INTERMETALLISCHER PHASEN ALS APPROXIMANTEN

Lieber Peter, liebe Kolleginnen und Kollegen,

es hat mich sehr gefreut, dass das Preiskomitee vorgeschlagen hat, in diesem Jahr Peter Gille mit der Will-Kleber-Gedenkmünze auszuzeichnen, und als Petra Becker-Bohatý mit fragte, ob ich die Laudatio halten könnte, war es für mich absolut selbstverständlich, dies zu tun.

Peter Gille begann sein Diplom-Kristallographie-Studium 1975 im Bereich Kristallographie der Sektion Physik der Humboldt-Universität zu Berlin (HUB). Dieser Bereich ist nach diversen Umstrukturierungen Ende der 60er Jahre aus dem ehemaligen Mineralogisch-Petrographischen Institut hervorgegangen, dem Will Kleber seit seiner Berufung 1953 bis zu seinem Tode 1970 vorstand. Es ist ein schöner Zufall, dass die Ehrung für Peter Gille heute hier in Karlsruhe stattfindet – in der Stadt, in der Will Kleber 1906 geboren wurde.

Bereits unter Kleber hatte man sich auf eine stark Material-orientierte Ausrichtung der Kristallographie mit Schwerpunkten der Auflösung, Kristallisation und Verformung von einkristallinen Materialien konzentriert. Und so kam Peter Gille frühzeitig zum Gebiet der Einkristallzüchtung von IV-VI- und II-VI-Verbindungshalbleitern. Da insbesondere homogene Mischkristallzusammensetzungen aus den Systemen $Pb_{1-x}Sn_xTe$ und $Hg_{1-x}Cd_xTe$ von Interesse waren, galt es Verfahren anzuwenden und zu entwickeln, die dies ermöglichten.

Dafür kam die sogenannte *Travelling Heater Method* (THM) zum Einsatz, der das Prinzip einer wandernden Lösungsmittelzone zugrunde liegt.

THM-Kristallzüchtungsanlagen gibt es nicht zu kaufen! Umfassende technische Kenntnisse sind notwendig bei der Konstruktion und Dimensionierung einer neuen Kristallzüchtungsapparatur mit ihren Teilbaugruppen Temperaturerzeugung und -stabilität sowie Translation und Rotation der Züchtungsanordnung. Unter geschickter Ausnutzung der Phasenrelationen in den Mehrkomponentensystemen ist es Peter Gille gelungen, Einkristalle mit extrem homogenen Materialzusammensetzungen zu erhalten, obwohl diese Materialsysteme stark von 1 abweichende Verteilungskoeffizienten aufweisen, die zu deutlichen Segregationseffekten führen. Sowohl in seiner Diplomarbeit als auch in seiner Dissertation beschäftigte er sich mit der mühseligen Kette von der Materialsynthese und Einkristallzüchtung bis zur Charakterisierung der Kristalle hinsichtlich chemischer Homogenität (Segregation) und struktureller Perfektion (Versetzungs- bzw. Kleinwinkelkorngrenzenstrukturen und insbesondere Te-Einschlüsse).

Bis 1993 war Peter Gille als wissenschaftlicher Mitarbeiter mit diesen Thematiken am Institut für Kristallographie und Materialforschung innerhalb der Sektion Physik der Humboldt-Universität zu Berlin tätig. Neben seinen Forschungsaufgaben erfüllte er diverse Lehrverpflichtungen in der geometrischen sowie physikalisch-chemischen Kristallographie. Seine umfassenden theoretischen und praktischen Kenntnisse und Fertigkeiten waren der entscheidende Grund, dass eine Vielzahl von Diplomanden und Doktoranden bei ihm gern ihre Qualifizierungsarbeiten anfertigen wollten.

Mit derselben Begründung bot Prof. Georg Müller vom Institut für Werkstoffwissenschaften der Universität Erlangen-Nürnberg Peter Gille einen Studienaufenthalt von 1993 bis 1995 an, den er im dortigen Kristalllabor absolvierte.

Im Jahr 1995 nahm Peter Gille den Ruf an das Institut für Kristallographie und Angewandte Mineralogie der Ludwig-Maximilians-Universität München an. Auch dort gab es bereits eine traditionelle Ausrichtung auf Fragen der Einkristallzüchtung, u.a. auch geprägt durch Peter Gilles Vorgänger, Prof. Ladislav Bohatý. Damit waren gute Voraussetzungen gegeben, weiterhin Kristallisation und Kristallzüchtung definierter Materialien inhaltlich weiter zu führen. Peter Gille erkannte frühzeitig, dass die neuen Materialsysteme der erst 1982 durch Dan Shechtman an schnell erstarrten Al-Mn-Legierungen entdeckten *Quasikristalle* eine sehr reizvolle Herausforderung darstellten. Nicht zuletzt durch die teilweise hartnäckige Weigerung auch führender Chemiker, Kristallographen und anderer Materialwissenschaftler (erinnert sei u. a. an Nobelpreisträger Linus Pauling), Quasikristalle als eine neue Klassifikation von aperiodischen Strukturen anzuerkennen, war es Peter Gille klar, dass nur defektarme Einkristalle, insbesondere auch hinreichender Größe, dieser neuen Materialgruppe die Untersuchungen der kristallographisch-strukturellen, physikalischen und chemischen Eigenschaften möglich und sinnvoll machen würden. Zu oft findet man in der Literatur, dass aufwendige analytische Untersuchungen an Materialien durchgeführt werden und zu fragwürdigen Resultaten führen, die durch wenig definierte synthetische Methoden hergestellt wurden. Es sei da an die häufig verwendete Formulierung „…were synthesized by the solid state reaction technique“ gedacht, d. h. simple Festkörperreaktionen durch Sinterprozesse bei erhöhten Temperaturen.

Basierend auf den bereits langjährigen Erfahrungen auf dem Gebiet der Einkristallzüchtung aus Schmelzen und Schmelzlösungen, konnte Peter Gille auch konstruktive Lösungen erarbeiten zum Bau von Apparaturen auf der Basis des Czochralski-Prinzips, die die experimentellen Anforderungen an das Wachstum von ausgewählten Quasikristallen erfüllten. Das war aber auch nur möglich, weil am Münchner Institut eine mechanische und elektronische Werkstatt vorhanden war, deren Mitarbeiter sich durch die neue Anforderungen auch herausgefordert fühlten und mit hoher Qualität die konzeptionellen Entwürfe von Peter Gille umsetzten.

Zunächst konzentrierte sich Peter Gille auf die dekagonalen Quasikristalle aus dem Dreistoffsystem Al-Co-Ni. Dieses System, wie auch alle anderen Systeme, sind durch sehr komplexe Phasendiagramme mit einer Vielzahl von Phasen gekennzeichnet, die inkongruentes bzw. kongruentes Schmelzverhalten zeigen. In den ersten Arbeiten in diesem System wurde als Wachstumsrichtung die 10-zählige Symmetrieachse gewählt. In dieser Richtung verhalten sich die dekagonalen Quasikristalle wie periodische Strukturen, so dass die klassischen Wachstumsphänomene (u. a. Einbaukinetik, Wachstumsgeschwindigkeit, Einfluss der Temperaturgradienten, konstitutionelle Unterkühlung usw.) mit „konventionellen“ einkristallinen Materialien verglichen werden konnten.

Bis zu diesem Zeitpunkt konzentrierten sich die vielfältigen Forschungsaktivitäten zu den Quasikristallen überwiegend auf analytische Charakterisierungen mit Röntgen- und/oder Elektronenbeugungsmethoden. Insofern müssen die Beschäftigung mit den Wachstumsphänomenen und das Ziel, hinreichend große Einkristalle von Quasikristallen in cm^3-Dimensionen zu erhalten, hoch eingeschätzt werden. In diesem Zusammenhang sind auch die Kugelwachstumsversuche im System Al-Co-Ni von großer Bedeutung, bei denen es möglich war, die nahezu volle Morphologie eines wachsenden Quasikristalls zu erkennen. Dabei konnten neben den pinakoidalen und Prismenflächen auch sogenannte „inclined net planes“ beobachtet werden, die bezüglich der periodischen Achse geneigt sind und ein Bindeglied zwischen periodischer und aperiodischer Ordnung im Kristall demonstrieren.

Ein weiterer Schwerpunkt der Forschungsarbeiten von Peter Gille waren vergleichende Untersuchungen zu Abweichungen der physikalischen Eigenschaften der Quasikristalle. Sind die Ursachen dafür das Fehlen der Periodizität oder Chemismus und Struktur, d. h. die Atomkonstellationen? Für diese Fragestellungen eignen sich besonders ausgewählte *Giant Unit Cell Intermetallics* (z. B. Phasen aus den Systemen Al-Cr-Fe oder Y-Al-Ni-Co). Sie werden als Quasikristall-Approximanten bezeichnet, die durch periodische Gitter mit großen Translationsperioden gekennzeichent sind, sich also dem vollkommen aperiodischen Gitter *annähern.* Eine solche Phase ist z. B. der Quasikristall-Approximant $Al_4(Cr,Fe)$, der im Labor von Peter Gille nach der Czochralski-Methode aus einer stark Al-reichen Schmelze im Zusammensetzungsbereich $Al_{87}Cr_7Fe_6$ bis $Al_{88}Cr_7Fe_5$ gezüchtet wurde. Die extremen Konzentrationsunterschiede zwischen der Schmelzzusammensetzung und dem wachsenden Approximanten erfordern geringe Wachstumsgeschwindigkeiten im Bereich von 0,05 bis 0,25 mm/h (!) und setzen einen störungsfreien Wachstumsprozess von mehreren Tagen voraus.

Neben der Beschäftigung mit den Quasikristallen und Approximanten hat sich Peter Gille in den letzten Jahren auch Materialsystemen zugewandt, die als potentielle Katalysatoren (z. B. für die Hydrierung von Acetylen) infrage kommen. Auch hier steht im Vordergrund, Wege zu finden, die zu größeren Einkristallen führen und die damit für vielfältige analytische Untersuchungen besonders geeignet sind. Aber auch hier bleibt Peter Gille, wie z. B. bei der Züchtung von großen PdGa-Einkristallen, komplexen metallischen Systemen treu.

Neben dem Aufbau und Betrieb der experimentellen Basis zur Züchtung von intermetallischen Systemen ist Peter Gille stets offen für weitere Materialien, bei denen ein besonderer Reiz darin besteht, sie aufgrund komplizierter Phasenbeziehungen einkristallin zu „bezwingen“. Dazu zählen Arbeiten gemeinsam mit Doktoranden zur Hydrothermalzüchtung von $GaPO_4$, das als interessanter Konkurrent zum Quarz als piezoelektrischer Sensor bei höheren Temperaturen angesehen wird, ebenso wie zur Sublimationszüchtung von großen AlN-Einkristallen, einem *Main Player* bei der Entwicklung von epitaktischen Strukturen für blaue LEDs.

Peter Gille ist in all diesen Jahren nicht nur ein begeisterter Kristallzüchter, sondern auch ein sehr engagierter Hochschullehrer, der immer eine Vielzahl von Diplomanden, Bachelor- und Masterstudenten sowie Doktoranden um sich schart. Seine großen experimentellen Erfahrungen spiegeln sich immer in äußerst anwendungsbezogenen Vorlesungen, Seminaren und Übungen in Mineralogie und Kristallographie wider. Er lässt es sich nicht nehmen, in jedem Jahr mehrtägige Exkursionen anzubieten, die in Unternehmen und Institutionen führen, in denen die Herstellung und Verarbeitung verschiedenster Materialien von Halbleitern bis zu Glasprodukten oder Zement im Vordergrund stehen.

Auch den häufig zeitaufwendigen und mühseligen Aufgaben der sogenannten *akademischen Selbstverwaltung* hat sich Peter Gille immer gestellt. Besonders in den letzten 15 Jahren fanden an den deutschen Universitäten und Hochschulen mit der Umwandlung der Diplom-Studiengänge in Bachelor- und Masterstudiengänge auch umfangreiche Instituts- und Departments-Neustrukturierungen statt. Mit hohem Einsatz hat Peter Gille in München für den angemessenen Erhalt der Kristallographie gestritten und gekämpft, zeitweilig als stellvertretender Institutsleiter (nach der Pensionierung von Prof. Schulz), als Direktor der mineralogischen Staatssammlung und in den letzten Jahren als Studiendekan für die geowissenschaftlichen Studiengänge. Weiterhin ist er seit vielen Jahren auch Prüfungsausschussvorsitzender für den Masterstudiengang Geomaterialien und Geochemie und für den auslaufenden Diplomstudiengang Mineralogie.

Peter Gille kann man als einen leidenschaftlichen materialorientierten Kristallographen und Hochschullehrer bezeichnen, der seit vielen Jahren im Labor, im Hörsaal, im Seminarraum, als Ideengeber in der Werkstatt, auf Exkursionen aber auch auf dem „Kampfplatz“ Department wirkt. Er ist gleichermaßen aktiv in der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) und in der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK). Über hundert Publikationen weisen ihn als einen hoch angesehenen Wissenschaftler aus. Viele andere Arbeitsgruppen in Deutschland und anderen Ländern profitieren von seinen hochwertigen einkristallinen Proben als wichtige Basis für definierte analytische Untersuchungen.

Peter Gille und ich kennen uns nun schon über 40 Jahre und ich freue mich, dass er in diesem Jahr mit der Will-Kleber-Gedenkmünze ausgezeichnet wird. Peter, ich gratuliere Dir dazu sehr herzlich.

Manfred Mühlberg, Köln und Berlin

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2017 AN WOLFGANG NEUMANN

FÜR SEINE GRUNDLEGENDEN BEITRÄGE ZUR ELEKTRONENMIKROSKOPIE UND ELEKTRONENBEUGUNG KRISTALLINER FESTKÖRPER UND DEREN ANWENDUNG AUF KRISTALLOGRAPHISCHE FRAGESTELLUNGEN

Lieber Herr Neumann, sehr geehrte Damen und Herren,

Mit der Carl-Hermann-Medaille soll das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten auf dem Gebiet der Kristallographie im weitesten Sinne ausgezeichnet werden, so sagt es die Satzung für die Carl-Hermann-Medaille. Im Jahr 2017 hat sich das Preiskomitee für Prof. Dr. Wolfgang Neumann entschieden und ich beglückwünsche sowohl den Preisträger als auch das Komitee zu dieser Entscheidung. Das Komitee verleiht die Carl-Hermann-Medaille 2017 an Herrn Prof. Dr. Wolfgang Neumann und würdigt damit – so steht es auf der Urkunde – seine grundlegenden Beiträge zur Elektronenmikroskopie und Elektronenbeugung kristalliner Festkörper und deren Anwendung auf kristallographische Fragestellungen.

In diesem Jahr wird also ein Wissenschaftler gewürdigt, der seinen Forschungsschwerpunkt ganz auf die Aufdeckung des Zusammenhangs zwischen der atomaren Struktur von kristallinen Materialien und ihren physikalischen Eigenschaften lenkt. Hierzu bedient er sich der vielfältigen Methoden der Transmissionselektronenmikroskopie, die die außerordentliche Möglichkeit bieten, die kristallinen Materialien mit bis zu atomarer Ortsauflösung zu untersuchen. Dass diese Untersuchungsmethoden viele Herausforderungen mit sich bringen, dürfte leicht verständlich sein, wenn man bedenkt, dass schon kleinste Vibrationen des

Kristalls, die Untersuchung seiner atomaren Struktur mittels eines Elektronenstrahls verfälschen oder auch gänzlich unmöglich machen können.

Albert Einstein hat einmal geäußert: „Inmitten der Schwierigkeiten liegt die Möglichkeit." Man kann hier ohne weiteres fortsetzen: …, Erkenntnisse zu gewinnen, die so bisher noch keiner gewinnen konnte, weil ihre Gewinnung auf bisher noch unüberwindbare Schwierigkeiten stieß. Die Triebkraft der wissenschaftlichen Arbeit von Wolfgang Neumann war und ist es, diese Herausforderungen anzunehmen und zu meistern.

Das Studium der Mineralogie bei Will Kleber an der Humboldt-Universität zu Berlin schloss Wolfgang Neumann 1968 mit einer Arbeit auf dem Gebiet des Kristallwachstums ab. Hier gab es den ersten Kontakt zur Elektronenmikroskopie, mit Hilfe derer das spiralförmige Wachstum von CdSe auf kubischen Trägerkristallen sichtbar gemacht werden konnte. Abbildungen entsprechender Abdrücke von Gold-dekorierten Oberflächen sind noch heute als Beispiel für das spiralförmige Kristallwachstum im Kleber, der Bibel der Kristallographen, gezeigt. Nach seinem Studium arbeitete Wolfgang Neumann zwei Jahre in Berlin-Adlershof, an einem Ort, der in seiner späteren Arbeitsphase noch einen wichtigen Platz einnehmen sollte. Der Aufenthalt am dortigen Zentralinstitut für Physikalische Chemie der Akademie der Wissenschaften der DDR währte jedoch nur kurz. Inspiriert durch erfrischende Vorträge speziell durch Heinz Bethge und Johannes Heydenreich bewarb er sich 1970 in Halle an der Saale am Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie der Akademie der Wissenschaften der DDR. Eigentlich waren da schon genug Physiker, die sich mit Kristallstrukturen gut auskannten, aber der für Wolfgang Neumann rettende Gedanke des damaligen Institutsdirektors Prof. Heinz Bethge war, dass das Orientierungsvermögen von Physikern in schiefwinkligen Koordinatensystemen eher begrenzt sei. Ein Mineraloge mit fundierten kristallographischen Kenntnissen kam ihm da gerade recht.

Das Profil des Halleschen Institutes gab nun der Forschungsrichtung von Wolfgang Neumann den entscheidenden Impuls in Richtung Transmissionselektronenmikroskopie, dem durchstrahlenden Verfahren zur Abbildung von Kristallgittern. Insbesondere war das tiefe Verständnis der Bildentstehung im Transmissionselektronenmikroskop der Schlüssel zum Verständnis der Eigenschaften der kristallinen Materialien. Das entstehende Bild ist immer das Resultat zweier grundlegender Wechselwirkungen des Elektronenstrahls einerseits mit der sehr dünnen Probe und andererseits danach mit dem abbildenden Linsensystem. Für diese komplexen Prozesse wurden in den 70er Jahren des 20. Jahrhunderts Näherungs- und Berechnungsverfahren entwickelt, die auch am Halleschen Institut Einzug hielten. Belege dieser Arbeiten lassen sich unter anderen in der damaligen Bibel für Elektronenmikroskopiker „Elektronenmikroskopie in der Festkörperphysik", herausgegeben im Jahr 1982 von Heinz Bethge und Johannes Heydenreich, finden. Wolfgang Neumann trug maßgeblich zu vier Kapiteln in diesem Buch bei. Stellvertretend seien hier die Abschnitte zur Hochauflösungs-Elektronenmikroskopie und zur Bildverarbeitung genannt.

Schaut man sich die Arbeiten aus dieser Zeit an, dann sieht man immer wieder simulierte Abbildungen, die durch die mal dichter und an anderer Stelle wieder weniger dicht gesetzten Punkte eines Nadeldruckers ihren Bildkontrast bekommen haben. Man musste sich seinerzeit also nicht nur darum Gedanken machen, welche Prozesse im Mikroskop ablaufen, sondern auch noch darum, wie man das sich ergebende Bild auf den damalig verfügbaren Medien sichtbar macht. Die Älteren unter den verehrten Anwesenden werden sich an Programmiersprachen wie Fortran77 erinnern. Ich hörte auch von Lochkarten, die als Datenträger zur Übergabe der Programmbefehle an Großrechner im damaligen

Rechenzentrum in Zeuthen bei Berlin verwendet wurden und deren geglückte Perforation erst durch den reibungslosen Programmdurchlauf verifiziert werden konnte.

Die vielfältigen Arbeiten von Wolfgang Neumann in dieser Phase führten zu seiner Promotion im Jahre 1982 zum Thema „Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen des Systems Silicium/Spinell“. Aus heutiger Sicht erscheint die Zeit zwischen Studium und Promotion endlos, jedoch war es das Prinzip am Halleschen Institut, sich zuerst wissenschaftliche Meriten zu verdienen, ehe die Promotion erfolgen konnte.

In konsequenter Fortsetzung und Erweiterung seiner Forschungen widmete er sich in den darauffolgenden Jahren speziell der „Korrelation von Kristallsymmetrie und Feinstruktur von Elektronenbeugungsdiagrammen“. Diese Arbeiten mündeten in der Habilitation im Jahr 1993 an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Auf besonders elegante Weise wird hier der Ortsraum mit dem reziproken Raum verknüpft und aufgezeigt, welche Schlüsse aus den Erkenntnissen im reziproken Raum auf die Eigenschaften im Ortsraum gezogen werden können. Für nanoskalige Kristalle ist dies einer der wichtigsten Wege, deren Symmetrie und Form zu bestimmen. Der Begriff Lauescher Gitterstachel erfuhr dadurch eine kleine Wiederauferstehung und – so viel darf ich hier sicher berichten – Wolfgang Neumann beharrt immer wieder darauf, diesen schönen Begriff anstelle des englischen „truncation rod“ zu verwenden. Die über Jahrzehnte hinweg äußerst fruchtbare und freundschaftliche Zusammenarbeit mit Jiří Komrska (Brünn) soll hier nicht unerwähnt bleiben.

Im Jahr 1996 erhielt Wolfgang Neumann den Ruf auf die C4-Professur für Kristallographie am Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin. Weiterhin gab es eine enge Zusammenarbeit mit dem nunmehrigen Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik in Halle, aber auch die Vernetzung innerhalb der Forschungslandschaft Berlins wurde gesucht und gefunden. Insbesondere sind die erfolgreiche Mitarbeit im SFB 296 „Wachstumskorrelierte Eigenschaften niederdimensionaler Halbleiterstrukturen“ und später in dem Europäisch vernetzten Projekt PARSEM zu nennen. Allen Themen gemein ist das Ziel Struktur-Eigenschaftsbeziehungen aufzuklären und Möglichkeiten aufzuzeigen, die Eigenschaften durch gezielte Änderung der kristallinen Struktur bzw. Kombination verschiedener kristalliner Strukturen maßzuschneidern. Weitere hervorzuhebende Schwerpunkte seiner Forschung sind die Spannungsfelder und Defektbildung in verformten Nickelbasissuperlegierungen, die durch Gitterfehlpassung induzierten Spannungsfelder in selbstorganisiert gewachsenen niederdimensionalen Verbindungshalbleitersystemen, die Evolution magnetischer Domänen in weichmagnetischen Materialien auf der Basis von Eisen und Kobalt sowie die Struktur-Eigenschaftsbeziehungen spintronischer Materialien, um nur einige zu nennen.

Ein wichtiger Grundstein dieser Arbeiten war die Beschaffung eines dem neuesten Stand der Entwicklung entsprechenden Mikroskops speziell für die analytische – also chemisch sensitive – Elektronenmikroskopie im Rahmen des Umzugs des Instituts für Physik von Berlin-Mitte nach Berlin-Adlershof. Mit dem Umzug kehrte Wolfgang Neumann dahin zurück, wo seine wissenschaftliche Karriere einst begonnen hatte. Im Scherz sagt er gern: „Weit bin ich in all den Jahren ja nicht gekommen: nur von der einen Seite der Rudower Chaussee auf die andere.“ Dem darf mit Fug und Recht widersprochen werden.

Auch deshalb, weil er auch nach seiner Emeritierung nicht aufgehört hat, wissenschaftlich zu arbeiten. Insbesondere sind hier die internationalen Kooperationen mit Prof. Jan Neethling in Port Elizabeth (Nelson Mandela Metropolitan University, Südafrika) und mit David C. Johnson (University of Oregon, Eugene, USA) zu erwähnen. Im Rahmen von längeren Aufenthalten hat Wolfgang Neumann den Studenten und Doktoranden in Blockkursen

Einblicke in die Kristallographie und Elektronenmikroskopie gewährt. Außerdem hat er sich in Eugene noch mal einer ganz neuen Materialklasse, den *Ferecrystals* zugewendet. *Ferecrystals* sind in dieser Kombination in der Natur nicht vorkommende Materialien, die zuerst ungeordnet, aber schichtweise abgeschieden werden und nachfolgend initialisiert durch eine Wärmebehandlung kristallisieren. Dabei entstehen zwischen den Schichten scharfe, nur van-der-Waals-gebundene Grenzen, während innerhalb der Schichten starke Bindungen vorherrschen. Diese unterschiedlichen Bindungen führen zu extrem anisotropen physikalischen Eigenschaften und lassen Raum für vielfältigste Anwendungen z. B. als Thermoelektrika.

Die Laudatio ist nur dann annähernd vollständig, wenn auch das erfolgreiche Wirken von Wolfgang Neumann als langjähriger Organisator der Herbstschulen für Elektronenmikroskopie in Halle und später in Berlin, als Mitglied und späterer Direktor des wissenschaftlichen Beirats des Internationalen Zentrums für Elektronenmikroskopie sowie als Vorsitzender des Nationalkomitees der DGK von 2003 bis 2006 und als Vorsitzender der DGK von 2006 bis 2009 erwähnt wird. Weiterhin ist Wolfgang Neumann *Editor in Chief* der Zeitschrift *Crystal Research and Technology*.

Die Zeit nach der Emeritierung hat er auch genutzt, um das angehäufte Wissen zur Weitergabe an den wissenschaftlichen Nachwuchs aufzubereiten. Gemeinsam mit Klaus-Werner Benz (Freiburg) hat er das Buch „Introduction to Crystal Growth and Characterization“ verfasst. Schließlich erwuchs noch die Idee, in einem weiteren Buch einen eher populärwissenschaftlichen Ansatz zu verfolgen. Es steht kurz vor der Vollendung, bei Amazon ist das Buch „Kristalle verändern unsere Welt: Struktur–Eigenschaften–Anwendungen“ schon in der Ankündigung.

Zum Abschluss darf ich noch sagen, dass es aus meiner Sicht zu den besonderen Gaben von Wolfgang Neumann gehört, ein nahezu fotographisches Gedächtnis zu besitzen. Zu fast jedem Thema, sei es Kristallographie oder Elektronenmikroskopie, konnte er ein oder mehrere Bücher – nicht selten verfasst in russischer Sprache – aus seinem mit Schnitzwerk verzierten Bücherschrank im Büro hervorziehen und mit bewundernswerter Zielsicherheit die Seite mit dem entsprechenden Artikel aufschlagen. Ich benutze dazu heute Datenbanken und Suchmaschinen, aber das braucht seine Zeit…

Das fotografische Gedächtnis verhilft ihm übrigens auch dazu, ein begnadeter Schach- und Skatspieler zu sein, aber das nur ganz am Rande. Zu guter Letzt möchte ich mich nun ganz herzlich für die vielen Jahre der wunderbaren Zusammenarbeit und die genossene Freiheit der Forschung, die ich bei Ihnen, Professor Neumann, hatte, herzlich bedanken und Ihnen auf das herzlichste zur Carl-Hermann-Medaille 2017 gratulieren. Ich wünsche Ihnen und Ihrer Frau Ingrid alles erdenklich Gute.

Holm Kirmse, Berlin

ERIKA POHL-STRÖHER

18.01.1919 – 18.12.2016

Die Technische Universität Bergakademie Freiberg trauert um ihre Ehrensenatorin, Sammlerin und Sifterin, Frau Dr. rer. nat. Dr. h. c. Erika Pohl-Ströher. Durch die Gründung der *Pohl-Ströher-Mineralienstiftung* in Ferpicloz (Schweiz) im Jahr 2004 und der damit verbundenen Dauerleihgabe an die TU Bergakademie Freiberg schuf sie die Grundlage für die einzigartigen Ausstellungen *terra mineralia* im Schloss Freudenstein und *Mineralogische Sammlung Deutschland* im Krüger-Haus.

Erika Ströher wurde am 18. Januar 1919 im sächsischen Wurzen geboren und wuchs in Rothenkirchen im Vogtland auf. Ihr Lebensweg war wesentlich durch die Firma *Wella* geprägt. Sie studierte in Jena Chemie und Biologie und wurde 1944 an der Jenaer Universität zur Dr. rer. nat. promoviert.

Seit ihrer Kindheit interessierte sie sich für Minerale und baute im Laufe ihres Lebens eine der größten und hochwertigsten privaten Mineralsammlungen auf. Nach den Mineralen aus dem alpinen Raum, dem Erzgebirge und weiteren regionalen Fundstellen wandte sie sich den Mineralfunden Osteuropas, Afrikas und Amerikas zu. Seit Mitte der 90er Jahre galt ihr Interesse vor allem China, Pakistan und Afghanistan. Aus all diesen Ländern trug sie mehr als 90.000 Stufen nach regionalen Gesichtspunkten geordnet zusammen, die vor allem durch erstklassige Qualität und Ästhetik bestechen. Die Farben und die perfekten Kristallformen mit den Phänomenen der Zwillingsbildung und der Epitaxie sprechen für sich. Frau Pohl-Ströher hatte den Wunsch, dass ihre Sammlung nicht nur erhalten bleibt und der Öffentlichkeit zugänglich gemacht wird, sondern dass vor allem junge Menschen angeregt werden, sich für die Natur und die Naturwissenschaften zu interessieren.

Mit dem Dauerleihvertrag war es der Universität möglich, die vorhandenen systematischen Ausstellungen der Lehr- und Forschungssammlungen um öffentlichkeitswirksame Ausstellungen mit regionaler Systematik zu erweitern und so den Geostandort Freiberg gezielt auszubauen. Seit der Eröffnung der Ausstellung *terra mineralia* im Oktober 2008 haben mehr als 850.000 Besucher die *Mineralogische Reise um die Welt* angetreten. Die Fakultät für Geowissenschaften, Geotechnik und Bergbau verlieh Frau Pohl-Ströher für ihre Verdienste für die Wissenschaft 2008 die Ehrendoktorwürde. Die Stiftungsobjekte stehen explizit der wissenschaftlichen Nutzung zur Verfügung und ergänzen den Bestand der systematischen Sammlung. Im Jahr 2013 wurde ihr zu Ehren ein neues und sehr seltenes Mineral – ein wasserhaltiges Kupfer-Zink-Calcium-Arsenat aus Tsumeb, Namibia – als „Erikapohlit“ benannt.

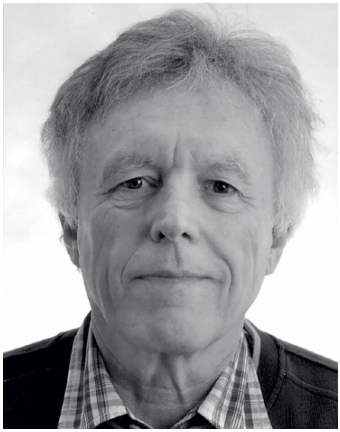
Frau Pohl-Ströher stiftete zwei weitere Sammlungen: Volkskunst aus dem Erzgebirge, ausgestellt in der *Manufaktur der Träume* in Annaberg-Buchholz, und historisches Spielzeug im *Depot Pohl-Ströher* in Gelenau. Sie ist Trägerin des Sächsischen Verdienstordens.

Einen Monat vor ihrem 98. Geburtstag verstarb Frau Erika Pohl-Ströher am 18. Dezember 2016 in ihrem Haus in Ferpicloz. Die TU Bergakademie Freiberg wird ihr Andenken stets in Ehren bewahren.

Rektorat der Technischen Universität Bergakademie Freiberg und
Gerhard Heide, Andreas Massanek, Werner Pälchen, Freiberg

ERNST EGERT

29.10.1949 – 10.06.2016



Ernst Egert war Professor an der Goethe-Universität in Frankfurt am Main (1989–2016). Er beschäftigte sich mit der Kristallstrukturbestimmung organischer Verbindungen (Programm PATSEE), mit *Molecular Modelling* (Programm MOMO) und mit supramolekularen Komplexen.

Am 29.10.1949 wurde Ernst Egert in Wixhausen bei Darmstadt geboren. Sein Vater war Kaufmann und hatte ein Geschäft; er starb jedoch bereits 1957 an den Spätfolgen einer Kriegsverletzung.

Ernst Egert war sein ganzes Leben lang sehr sportlich und spielte begeistert Tischtennis. Mit seiner Mannschaft, der TSG Wixhausen, war er von 1968 bis 1971 sogar in der zweiten Liga Südwest, der damals dritthöchsten Spielklasse in Westdeutschland. Außerdem liebte er Joggen, Tennis, Badminton und Radfahren. Zudem spielte er Klavier. Als Jugendlicher verpflichtete er sich für 10 Jahre beim THW (dem er dann 20 Jahre lang treu blieb). So vermied er den Wehrdienst und konnte direkt nach seinem Abitur sein Studium aufnehmen.

Er studierte von 1968 bis 1975 Chemie an der TH Darmstadt und beendete sein Studium mit einer Diplomarbeit bei Prof. Dr. Hans Jörg Lindner über die Kristallstrukturanalyse zweier organischer Verbindungen – damals eine zeitraubende Aufgabe. Nebenbei erstellte er Rot-Grün-Stereobilder von Molekülen und Kristallen. Die Zeichnungen wurden später als Broschüre herausgegeben [1]. Anschließend promovierte er bei Prof. Lindner über die Struktur und Funktion 5-substituierter Uridine [2]. Die Promotion wurde mit Auszeichnung bewertet.

Abb. 1: Olga Kennard und Ernst Egert, Cambridge, 1980

Nachdem er seine Freundin Doris Pfaff geheiratet hatte, ging er mit einem DFG-Stipendium für zwei Jahre (1979–1981) zu Olga Kennard nach Cambridge (Abb. 1). Dort führte er Röntgenstrukturanalysen an Nucleotiden, Peptiden, Antibiotika, Morphinen und Steroiden durch. Dabei reifte die Erkenntnis, dass die Strukturlösungsmethoden für größere Moleküle verbesserungswürdig waren, denn die üblicherweise verwendeten Direkten Methoden berücksichtigen die Molekülstruktur, die dem Chemiker wenigstens teilweise bekannt ist, nur unzureichend, d. h. nur bei der Interpretation der erhaltenen Elektronendichtekarten, aber nicht bei der Strukturlösung selbst. Daher ging er nach Göttingen zu Prof. Dr. George Sheldrick, wo er zunächst Liebig-Stipendiat, später Hochschulassistent war. Dort entwickelte Ernst Egert eine, wie er es nannte, „chemische“ Methode zur Aufklärung schwieriger Kristallstrukturen [3]. Hierbei erfolgt die Strukturlösung durch Suche mit einem Molekülfragment im Pattersonraum. Zunächst wird die Pattersonfunktion eines Moleküles bzw. Fragmentes berechnet. Anschließend wird die Pattersonfunktion aus den Einkristalldaten berechnet und die Kristallstruktur durch Fit der beiden Pattersonfunktionen gelöst. Die Pattersonfunktion hat gegenüber den Direkten Methoden den Vorteil, dass sie wesentlich weniger empfindlich auf Messfehler, ungenügende Kristallgröße oder schlechte Daten ist. Außerdem erlaubt die Pattersonfunktion, die Molekülorientierung und die Molekülposition in zwei Schritten nacheinander zu bestimmen, und so die Zahl der in jedem Schritt zu bestimmenden Parameter zu verringern: Die ursprungsnahen Peaks der Pattersonfunktion stammen von Atom-Atom-Vektoren innerhalb eines Moleküles und werden zur Bestimmung der räumlichen Orientierung der Moleküle verwendet. Anschließend werden die restlichen Peaks zur Bestimmung der Translationen, also der Molekülpositionen in der Elementarzelle verwendet. Die fehlenden Atome werden im dritten Schritt mit der Tangensformel und mit Differenzfouriersynthesen ermittelt. Dieses Verfahren hat Herr Egert bereits im März 1983, also nach nur anderthalbjähriger Arbeit in Göttingen, zur Publikation in *Acta Cryst. A*

eingereicht [4]. Im Zuge der weiteren Arbeiten stellte sich heraus, dass die Translationssuche über Triplett-Phasenbeziehungen besser und schneller funktioniert als mit Pattersonmethoden; die Rotationssuche im Pattersonraum wurde hingegen als essentiell beibehalten [4]. Die Arbeiten wurden 1985 in einer zweiten Publikation in *Acta Cryst. A* veröffentlicht [5]. Auf diese beiden Publikationen war Herr Egert auch später noch stolz: „Zweimal *Acta A*, davon einmal sogar als alleiniger Autor!“ sagte er, der sonst so bescheiden war, viele Jahre später zu mir.

Die Arbeiten mündeten 1987 in einer Habilitation [3], über die George Sheldrick als Gutachter schrieb: „Herr Egert hat seine Methode in Form eines Computer-Programmes PATSEE verwirklicht. Dieses Programm ist schon an mehr als 500 Instituten weltweit in Betrieb. In jedem Heft von *Acta Crystallographica* wird das Programm zitiert, in den meisten Fällen für die erfolgreiche Lösung von Kristallstrukturen, die sich mit den üblichen Methoden nicht lösen ließen. Kristallographen sind bekanntlich etwas konservativ und es ist eine Seltenheit, dass eine neue Methode überall so schnell eingesetzt wird. Nicht zu unterschätzen ist es, dass PATSEE sowohl benutzerfreundlich als auch ungewöhnlich fehlerfrei ist.“

Schon früh beschäftigte sich Ernst Egert mit *Molecular Modelling*. So waren bereits in der ersten PATSEE-Veröffentlichung 1983 zwei der sechs Suchfragmente nicht aus Einkristalldaten konstruiert, sondern mit *Modelling* berechnet; hierfür verwendete Herr Egert das Kraftfeldprogramm PIMM seines Doktorvaters Hans Jörg Lindner. PIMM zeichnet sich gegenüber anderen Kraftfeldprogrammen dadurch aus, dass die π-Systeme mit einer π-SCF-Rechnung behandelt werden; es eignet sich daher insbesondere für konjugierte und aromatische Systeme.

1988 erhielt Ernst Egert einen Ruf an die Goethe-Universität in Frankfurt, den er 1989 annahm. In Frankfurt setzte er seine Forschung zu PATSEE fort. Beispielsweise wurden Strukturen von Oligonukleotiden mit bis zu 500 Atomen gelöst [6]. Um 2000 übertrug Herr Egert die Methode auf Röntgenpulverdaten. Damit konnten etliche Kristallstrukturen organischer Verbindungen gelöst werden, die mit den damaligen Methoden aus Röntgenpulverdaten sonst nicht lösbar waren [7, 8]. (Die heute verwendeten Realraummethoden mit *Simulated Annealing* steckten damals noch in den Kinderschuhen). Leider wurden diese schönen Arbeiten bislang nicht publiziert. Herr Egert wollte die Veröffentlichung nach seiner Pensionierung 2015 fertigstellen; aber dazu kam es nicht mehr.

Das Programm PIMM wurde von Herrn Egert neu programmiert, in MOMO („MOlecular MOdelling“) umbenannt, und weiterentwickelt. Unter anderem wurden eine Potentialfunktion für Wasserstoffbrücken eingebaut und verschiedene Modelle zur Berechnung von Atomladungen und für die Behandlung elektrostatischer Wechselwirkungen durch Multipolmomente entwickelt. Die aktuelle Version ist in Python und C geschrieben und trägt den Namen „PyMOMO“ [9]. In den letzten Jahren wurde das Programm aber zunehmend durch die aufkommenden *Ab-initio*- und DFT-Verfahren abgelöst. Den naheliegenden Gedanken, MOMO auch zur Optimierung von Kristallstrukturen einzusetzen, hat Herr Egert niemals umgesetzt – aus Rücksicht auf seinen Doktorvater Hans Jörg Lindner, der dies mit PIMM offenbar auch plante und letztendlich Mitter der 90er Jahre umsetzte [10].

In den letzten 10–15 Jahren beschäftigte sich Herr Egert und sein kleiner, aber feiner Arbeitskreis mit Kristallisation, Röntgenstrukturanalyse und *Modelling* von supramolekularen Komplexen, die aus zwei zueinander komplementären Molekülen bestehen, die durch Wasserstoffbrücken miteinander verbunden sind. Nach etlichen Fehlversuchen mit verschiedenen Motiven aus Donoren (D) und Akzeptoren (A), bei denen sich keine

Cokristalle gebildet hatten, erwies sich die Kombination aus einem Molekül mit ADA-Motiv und einem Molekül mit DAD-Motiv als gutes und stabiles Synthon (Abb. 2)

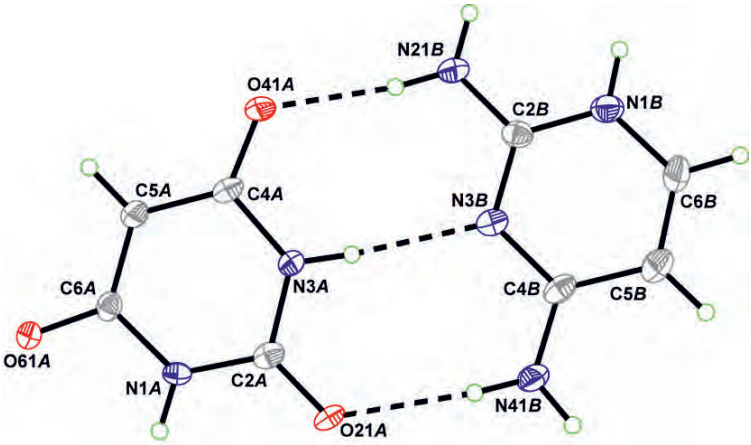


Abb. 2. Supramolekularer Komplex aus zwei komplementären Molekülen mit ADA und DAD-Motiv (A = Akzeptor, D = Donor)

Bei diesen Arbeiten ergaben sich immer wieder spektakuläre Kristallstrukturen. Beispielsweise enthält die Elementarzelle von 6-Methyl-isocytosin zwei verschiedene Tautomere derselben Substanz – ein sehr seltenes Phänomen (Abb. 3)! Ein Titelbild in *Acta Cryst. C* war die Folge [11]. Dasselbe Phänomen trat anschließend nochmals bei 5-Brom-6-methyl-isocytosin auf, und wurde ebenfalls in *Acta Cryst. C* publiziert [12]. Herr Egert publizierte auch sonst am liebsten in *Acta Cryst. C*, obwohl die Qualität vieler Arbeiten durchaus einer Veröffentlichung in *Acta Cryst. B* würdig gewesen wäre. Aber er war eben bescheiden. Bei den beiden spektakulären Veröffentlichungen zu den Tautomeren [11, 12] wollte er noch nicht einmal als Autor genannt werden.

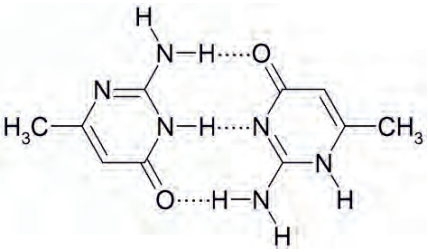


Abb. 3. Zwei verschiedene Tautomere von 6-Methyl-isocytosin in derselben Kristallstruktur [11].

Am Ende seiner wissenschaftlichen Laufbahn beschäftigte sich Prof. Egert mit Cokristallen aus Uracilderivaten [13] – und kehrte damit zu den Anfängen seiner wissenschaftlichen Laufbahn zurück: In seiner Doktorarbeit hatte er ebenfalls mit Uracil-Derivaten (Uridinen) gearbeitet.

Zusammen mit seinen Kollegen Gerhard Quinkert und Christian Griesinger veröffentlichte er 1995 das Lehrbuch „Aspekte der organischen Chemie: Struktur“, für das die drei Autoren mit dem Literaturpreis des Fonds der chemischen Industrie ausgezeichnet wurden. Viele Jahre war Herr Egert bei *ChemKrist* aktiv, dem Arbeitskreis der GDCh, der sich mit Kristallstrukturanalysen beschäftigt. Von 2001 bis 2008 war er dessen Vorsitzender. An der Goethe-Universität in Frankfurt hielt er Vorlesungen u. a. über die Grundlagen der organischen Chemie, über Röntgenstrukturanalyse und Gruppentheorie. Lange Jahre betreute er die Chemie-Ausbildung der Medizinstudenten. Von 1990 bis 2000 war Prof. Egert Sprecher des äußerst erfolgreichen Graduiertenkollegs „Chemische und biologische Synthese von Wirkstoffen“.

Neben seiner wissenschaftlichen Arbeit kümmerte sich Prof. Egert sehr um die Organisation des Chemie-Studiums in Frankfurt. So war er lange Jahre Leiter des Prüfungsausschusses, des Promotionsbüros und des Lehr- und Studienausschusses. Außerdem war er lange Jahre im Verwaltungsrat des Studentenwerkes. Was Herrn Egert (Abb. 4) auszeichnete, war seine Zuverlässigkeit und Ehrlichkeit, seine unaufgeregte Freundlichkeit und sein ausgleichendes Wesen. Er genoss von allen Seiten Vertrauen und wurde als von allen Seiten akzeptierte, absolut integre Persönlichkeit, auch bei Streitfällen hinzugezogen. Er hatte für Studenten immer ein offenes Ohr und setzte sich sehr für die Belange der Studenten ein.

Abb. 4: Prof. Egert in seinem Büro, 1999.

Bei der Einführung des Bachelor/Master-Systems an der Uni Frankfurt war es seiner frühzeitigen und guten Organisation, seiner Geduld und seinem diplomatischen Geschick zu verdanken, dass der neuentstehende Chemie-Bachelorstudiengang von allen Beteiligten unterstützt wurde – auch von den Studierenden. Die Prüfungsordnung enthielt etliche studentenfreundliche Regelungen, beispielsweise die Möglichkeit zur freiwilligen Wiederholung bestandener Prüfungen zur Notenverbesserung (wobei der bessere Versuch zählt). Der Chemie-Bachelorstudiengang war 2005 der erste Bachelorstudiengang der Uni Frankfurt. Herrn Egert und dem Chemie-Prüfungsamt ist es maßgeblich zu verdanken, dass es bei der Umstellung vom Diplomstudiengang auf den Bachelor/Masterstudiengang praktisch keine Probleme gab (!).

Im Jahre 2013 wurde Herr Egert durch einen Schlaganfall aus seiner Arbeit herausgerissen. Er erholte sich innerhalb eines Jahres davon. Im Frühjahr 2015 wurde er pensioniert, erhielt aber noch eine Seniorprofessur. Zur gleichen Zeit erlitt er den zweiten Schicksalsschlag: Es wurde Bauchspeicheldrüsenkrebs festgestellt. Trotz fortwährender Chemotherapie betreute er seine Mitarbeiter bis zum Schluss weiter. Von der Krankheit schwer gekennzeichnet, schleppte er sich Mitte Mai 2016 nochmals an die Uni, um mit seinem letzten Doktoranden die Korrekturen der Doktorarbeit durchzusprechen. Die Arbeit wurde am 30.05.2016 abgegeben. 12 Tage später, am 10.06.2016, verstarb Herr Egert in seinem Haus in Wixhausen bei Darmstadt. Er hinterlässt seine Frau und zwei Kinder, die ebenfalls der Mathematik und der Chemie treu geblieben sind.

Martin U. Schmidt, Frankfurt am Main

[1] E. Egert, H. J. Lindner: „Strukturen der Materie und ihre Symmetrie in Stereobildern“, 3D Bildstudio R. Schmidt, Nieder-Ramstadt, 1976.
[2] E. Egert: „Der Einfluß von Substituenten in 5-Stellung auf die Struktur modifizierter Uridine und deren Funktion im Anticodon von Transfer-Ribonukleinsäuren“, Dissertation, Darmstadt, 1978.
[3] E. Egert: „PATSEE – eine ‚chemische‘ Methode zur Aufklärung schwieriger Kristallstrukturen“, Habilitationsschrift, Göttingen, 1987.
[4] E. Egert: Acta Cryst. A 39 (1983) 936–940.
[5] E. Egert, G. M. Sheldrick: Acta Cryst. A 41 (1985) 262–268.
[6] K. Wagner, J. Hirschler, E. Egert: Z. Krist. 216 (2001) 565–572.
[7] S. Rühl, E. Egert: unveröffentlichtes Manuskript.
[8] a) S. Rühl, E. Egert: „Pulverbeugung und PATSEE – Ein modernes Märchen?“ Vortrag von S. Rühl auf der 11. Jahrestagung der DGK, Berlin, 2003. b) G. Schubert, G. Reck, H. Jancke, W. Kraus, C. Patzelt: Urological Research 33 (2005) 231–238.
[9] *www.pymomo.de*
[10] H. J. Lindner: Präsentation auf der 5. Jahrestagung der DGK, Hamburg, 1997.
[11] V. Gerhardt, M. Tutughamiarso, M. Bolte: Acta Cryst. C 67 (2011) o179–o187.
[12] V. Gerhardt, M. Bolte: Acta Cryst. C 72 (2016) 84–93.
[13] W. M. Hützler, E. Egert, M. Bolte: Acta Cryst. C 72 (2016) 634–646.

ANKÜNDIGUNGEN

SAVE THE DATE

26th ANNUAL MEETING
of the GERMAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY (DGK)

5–8 MARCH 2018
ESSEN

www.dgk-conference.de

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN
Offen im Denken

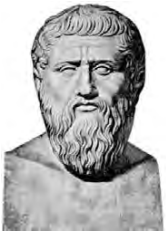
CENIDE
CENTER FOR NANOINTEGRATION DUISBURG-ESSEN

ZMB
ZENTRUM FÜR MEDIZINISCHE BIOTECHNOLOGIE
UNIVERSITÄT DUISBURG-ESSEN

PLATON
WORKSHOP IN CRYSTALLOGRAPHY
28–29 SEPTEMBER 2017, HUMBOLDT UNIVERSITÄT ZU BERLIN

Invited speaker: Prof. Dr. Ton Spek, Utrecht, The Netherlands

The following topics will be discussed:
- General introduction to PLATON
- Geometry calculations
- TwinRotMat
- ADDSYM
- AutoMolFit for structures with Z' > 2
- Thermal Motion Analysis
- Bijovet Analysis in PLATON
- SQUEEZE
- Validation tools



Audience:
The workshop is designed for Master students, PhD students, postdoctoral and research scientists that deal with molecular crystallography.

The workshop will take place at:
Humboldt Universität zu Berlin, Institute of Chemistry
Brook-Taylor-Straße 2, 12489 Berlin

Organizer:
Dr. Beatrice Braun Cula
Humboldt Universität zu Berlin
beatrice.braun@hu-berlin.de

Deadline:
Requests to participate can be sent before **August 1st, 2017** to the above mentioned e-mail address. As there is a limited number of places, first-come, first-served rule will be applied.

Symbolic registration fee:
- 40 € for Master students, PhD students, postdoctoral and research scientists, who are non-DKG members
- 30 € Master students, PhD students, postdoctoral and research scientists, who are DGK members

D8 ADVANCE

A PLUS for your research!

- NEW Compact Cradle^{plus} and Compact UMC stage offering extended sample handling
- NEW TRIO: triple beam path optic for measuring any type of sample, polycrystalline and epitaxial, at the push of a button
- NEW LYNXEYE XE-T: the one and only detector enabling energy dispersive zero, one- and two-dimensional diffraction
- NEW PILATUS3 R 100K-A: two-dimensional diffraction with the benchmark among all Hybrid Photon Counting detectors on the market

www.bruker.com

XRD

ALL-NEW 64-BIT CRYSTALMAKER X

CrystalMaker Software has announced the immediate availability of an all-new version of their flagship “CrystalMaker” program for crystal and molecular structures modelling.

Designed for research scientists, engineers, teachers and students, CrystalMaker X features spectacular, fast, industry-leading 3D graphics. The software was completely rebuilt, from scratch, designed for the latest operating systems, with multi-touch control and real-time editing.

CrystalMaker X transcends traditional crystallography software, letting users create dynamical visualizations with rotable animations. Multiple structures can also be viewed simultaneously in the same window: useful for understanding domain boundaries in metal alloys, topotactic relationships in inorganic materials, or molecular docking.

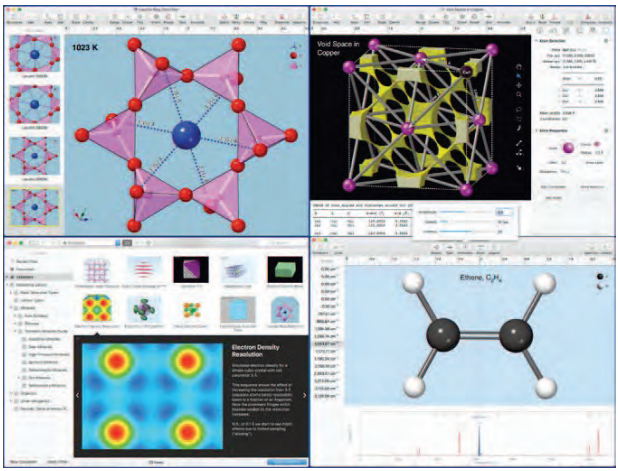
Volumetric datasets can be visualized together with crystal structure models. Built-in porosity-map and electron density simulations are available, and arbitrary 3D datasets can be imported from a wide range of file formats.

A new energy-modelling engine makes it easy to build fully-optimized 3D molecular structures simply by pointing-and-clicking with the mouse. Vibrational properties, including infra-red spectra are calculated, with rotatable animations of the individual modes.

The new Library Browser integrates multiple structures libraries – including the user’s own structures. Over 1000 structures are included with the software, indexed, annotated and with rotatable previews – and ready for instant display. Powerful search commands make this ideal for research as well as teaching.

CrystalMaker X is available as true native 64-bit Mac and Windows applications. The Mac version supports “Retina” displays and sports a dedicated “Touch Bar” interface for the latest MacBook Pro computers. The Windows version is designed to run on the new Microsoft Surface Pro, with high-resolution displays and multi-touch control.

The software is sold directly by CrystalMaker Software Ltd (*http://crystalmaker.com*). Multi-user, education and student licensing options are available.

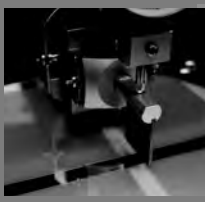


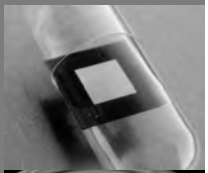
APPLIED X-RAY OPTICS

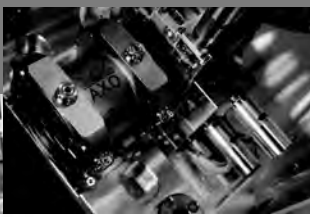
AXO

Multilayer X-ray Optics
High Precision Deposition

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







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

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

MAX VON LAUE-PREIS 2018

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

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

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

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

oder an:

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

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen der 26. DGK-Jahrestagung 2018 in Essen statt.

Einsendeschluss: 9. Januar 2018

Vielen Dank!

Thomas Doert, Dresden

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR CARL-HERMANN-MEDAILLE UND WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2018

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

Wir bitten um Nominierungen an die Vorsitzenden der Komitees zur Verleihung der Ehrungen bis zum 15.12.2017.

Carl-Hermann-Medaille

PD Dr. Claudia Weidenthaler
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung
Department of Heterogeneous Catalysis
Kaiser-Wilhelm-Platz 1
45470 Mülheim an der Ruhr

Tel.: 0208-306-2181
Fax: 0208-306-2989
E-Mail: *Claudia.Weidenthaler@mpi-mail.mpg.de*

Will-Kleber-Gedenkmünze

Dr. Julia Dshemuchadse
University of Michigan
Department of Chemical Engineering
Biointerfaces Institue
North Campus Research Complex (NCRC), Bldg. 10
2800 Plymouth Road
Ann Arbor, MI 48109, USA

E-Mail: *djulia@umich.edu*

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN WALTRUDE-UND-FRIEDRICH-LIEBAU-PREIS ZUR FÖRDERUNG DER INTERDISZIPLINARITÄT DER KRISTALLOGRAPHIE

Die „Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie“ verleiht entsprechend ihrem Zwecke einen Preis, der dazu beitragen soll, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen.

Mit dem Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie werden Arbeiten ausgezeichnet, in denen entweder Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie auf Probleme einer anderen Wissenschaft (Partnerwissenschaft) oder Methoden und Betrachtungsweisen einer Partnerwissenschaft auf Probleme der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden.

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

Wir bitten um Nominierungen an den Vorsitzenden des Preiskomitees bis zum 15.12.2017:

Prof. Dr. Wulf Depmeier
Seesternweg 5
24159 Kiel
Tel.: 0431-371983
E-Mail: *wd@min.uni-kiel.de*

TAGUNGEN UND TERMINE

September 2017

27.08. – 01.09.2017 **11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists**
in München

Kontakt: *http://www.watoc2017.com/home.html*

27.08. – 31.00.2017 **The 20th International Conference on Cytochrome P450: Biochemistry, Biophysics and Biotechnology**
in Düsseldorf

Kontakt: *http://20iccp450.hhu.de/*

28.08. – 01.09.2017 **10th International Conference on Inelastic X-ray Scattering**
in Hamburg

Kontakt:
https://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=13621

28.08. – 01.09.2017 **XIXth EuroAnalysis**
in Stockholm (Schweden)

Kontakt: *http://euroanalysis2017.se/*

30.08. – 01.09.2017 **EMBO Conference: The Nucleosome: from Atoms to Genoms**
in Heidelberg

Kontakt:
http://www.embl.de/training/events/2017/NUC17-01/index.html?_ga=2.176492517.1542309937.1493823878-1740041149.1491823482

30.08. – 04.09.2017 **International School on Fundamental Crystallography and Workshop on Structural Phase Transitions**
in Odisha (Indien)

Kontakt:
http://www.iucr2017.org/wp-content/uploads/2016/09/School.pdf

03.09. – 15.09.2017 **15th Oxford School on Neutron Scattering**
in Oxford (Vereinigtes Köngireich)

Kontakt: *http://www.oxfordneutronschool.org/*

03.09. – 08.09.2017 **55th EHPRG Meeting: High Pressure Science and Technology**
in Poznan (Polen)

Kontakt: *http://www.ehprg2017.org/*

03.09. – 06.09.2017 **7th Cambridge Symposium on Nucleic Acids Chemistry and Biology**
in Cambridge (Vereinigtes Königreich)

Kontakt:
http://www.rsc.org/events/detail/23735/7th-cambridge-symposium-on-nucleic-acids-chemistry-and-biology

03.09. – 06.09.2017 **AIC International Crystallography School (AICS2017)**
in Pavia (Italien)

Kontakt: *http://www.ehprg2017.org/*

03.09. – 08.09.2017 **COLA 2017: International Conference on Laser Ablation**
in Marseille (Frankreich)

Kontakt: *https://cola2017.sciencesconf.org/*

03.09. – 30.09.2017 **ILL/ESRF International Student summer Programme on X-Ray and Neutron Science**
in Grenoble (Frankreich)

Kontakt: *https://indico.ill.fr/indico/event/75/overview*

03.09. – 06.09.2017 **ISIC20. 20th International Symposium on Industrial Crystallogrpahy**
in Dublin (Ireland)

Kontakt: *http://isic20.com/*

03.09. – 09.09.2017 **Niels Bohr Institute International PhD School on ‚Geometry and topology in contemporary material science'**
in Kopenhagen (Dänemark)

Kontakt:
https://indico.nbi.ku.dk/conferenceDisplay.py?ovw=True&confId=938

03.09. – 08.09.2017 **ISHC 2017. International Society of Heterocyclic Chemistry**
in Regensburg

Kontakt: *http://www.ishc-web.org/*

04.09. – 06.09.2017 **Croissance de cristaux pour l'optique et techniques de caraxctérisations associées**
in Delft (Niederlande)

Kontakt: *http://www.tudelft.nl/cryoemsymposium*

04.09. – 05.09.2017 **International Cryo-EM Symposium**
in Paris (Frankreich)

Kontakt:
http://www.afc.asso.fr/agenda-afc/1276-croissance-de-cristaux-pour-l-optique-et-techniques-de-caracterisations-associees

04.09. – 05.09.2017 **Advances in Quantum Transport in Low-Dimensional Systems**
in London (Vereinigtes Königreich)

Kontakt: *http://aqt2017.iopconfs.org/*

04.09. – 15.09.2017 **JCNS Laboratory Course Neutron Scattering**
in München

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

04.09. – 15.09.2017 **PSI Master School. Introducing photons, neutrons and muons for materials characterization**
in Villigen (Schweiz)

Kontakt: *http://indico.psi.ch/conferenceDisplay.py?confId=5270*

04.09. – 08.09.2017 **YUCOMAT 2017. 19th Annual Conference**
in Villigen (Schweiz)

Kontakt: *http://indico.psi.ch/conferenceDisplay.py?confId=5270*

05.09. – 15.09.2017 **EMBO practical course on image processing for cryo-electron microscopy**
in London (Vereinigtes Königreich)

Kontakt: *http://meetings.embo.org/event/17-cryo-em*

05.09. – 06.09.2017 **2nd LabMeeting of the DGK's Young Crystallographers @ STOE**
in Darmstadt

Kontakt: *http://dgk-home.de/aks/jkyc/darmstadt-2017/*

05.09. – 08.09.2017 **Inorganic Chemistry Conference Erlangen (ICCE)**
in Erlangen

Kontakt: *http://icce.weebly.com/*

06.09. – 08.09.2017 **CCP4 Protein Structure Workshop 2017**
in Carlisle (Vereinigtes Königreich)

Kontakt:
http://www2.le.ac.uk/projects/ccp4/ccp4-protein-structure-workshop

10.09. – 13.09.2017 **15th Conference on Methods and Applications in Fluorescence**
in Bruges (Belgien)

Kontakt: *http://www.maf15.org/*

10.09. – 14.09.2017 **GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2017**
in Berlin

Kontakt: *http://www.wifo2017.de/*

10.09. – 15.09.2017 **International Frontiers of Electron Microscopy in Materials Science (FEMMS 2017)**
in Johannisburg (Südafrika)

Kontakt: *http://femms2017.org/*

10.09. – 14.09.2017 **QMOL. Operating Quantum States in Atoms and Molecules at Surfaces**
in Ascona (Schweiz)

Kontakt: *http://www.qmol.ch/*

10.09. – 22.09.2017 **7th German-Russian Travelling Seminar "Nanonmaterials and Scattering Methods"**
in Ekaterinburg – Kazan – Dubna – Moskau (Russland)

Kontakt: *http://pcnano.uran.ru/*

10.09. – 12.09.2017 **12th International Symposium on Electrokinetics**
in Dresden

Kontakt:
https://www.gdch.de/veranstaltungen/www.elkin2017.org

11.09. – 15.09.2017 **EMBO Practical Course SAXS/SANS**
in Grenoble (Frankreich)

Kontakt:
http://meetings.embo.org/event/17-small-angle-scattering

11.09. – 14.09.2017 **NEUBIAS Training school on Bioimage Analysis**
in Gothenburg (Schweden)

Kontakt:
http://eubias.org/NEUBIAS/training-schools/eci/ts4-gothenburg2017/

11.09. – 12.09.2017 **Second SPHIRE workshop**
in Bonn

Kontakt:
https://www.caesar.de/en/events/2017/6th-international-caesar-conference-overcoming-barriers.html

11.09. – 13.09.2017 **6th International Conference on Biobased and Biodegradable Polymers (BIOPOL-2017)**
in Mons (Belgien)

Kontakt: *http://www.biopol-conf.org/*

12.09. – 12.09.2017 **Swiss Society of Crystallography Annual Meeting**
in Geneva (Schweiz)

Kontakt: *http://www.sgk-sscr.ch/en/geneva2017/*

12.09. – 15.09.2017 **6th International Caesar Conference. Overcoming Bariers: Atomic-resolution and beyond: advances in molecular electron microscopy**
in Bonn

Kontakt:
https://www.caesar.de/en/events/2017/6th-international-caesar-conference-overcoming-barriers.html

13.09. – 15.09.2017 **IWGO 2017. 2nd International Workshop on Gallium Oxide and Related Materials**
in Parma (Italien)

Kontakt: *http://www.iwgo2017.unipr.it/*

14.09. – 15.09.2017 **6th German-French Workshop on Oxide, Dielectric, and Laser Crystals 2017**
in Bordeaux (Frankreich)

Kontakt:
https://wodil2017.sciencesconf.org/?forward-action=index&forward-controller=index&lang=en

17.09. – 22.09.2017 **EUROMAT2017 Symposium: Materials Science with Synchrotron Radiation X-rays**
in Thessaloniki (Griechenland)

Kontakt: *http://euromat2017.fems.eu/*

18.09. – 22.09.2017 **3D Electron Crystallography for Macromolecular Compounds**
in Villigen (Schweiz)

Kontakt: *https://indico.psi.ch/conferenceDisplay.py?confId=5525*

18.09. – 22.09.2017 **Bridging Solution Methods: From NMR to X-ray Scattering and Biophysics (iNEXT course)**
in Patras (Griechenland)

Kontakt: *http://www.inext-eu.org/*

18.09. – 21.09.2017 **E-MRS 2017 Fall Meeting**
in Warschau (Polen)

Kontakt:
http://www.european-mrs.com/meetings/2017-fall-meeting

18.09. – 29.09.2017 **XIV School on Synchrotron Radiation: Fundamentals, Methods and Applications**
in Muggia (Italien)

Kontakt: *http://www.elettra.eu/Conferences/2017/SILS/*

18.09. – 21.09.2017 **13. Fachtagung über Iminiumsalze (IMSAT-13)**
in Goslar

Kontakt: *http://imsat.ioc.tu-clausthal.de/*

19.09. – 22.09.2017 **34th Danubia Adria Symposium on Advances in Experimental Mechanics**
in Trieste (Italien)

Kontakt: *https://www.das2017.units.it/*

19.09. – 21.09.2017 **MECA SENS 2017: 9th International Conference on Mechanical Stress Evaluation by Neutron and Synchrotron Radiation**
in Skukuza (Südafrika)

Kontakt:
https://www.eiseverywhere.com/ehome/mecasens/487391/

19.09. – 21.09.2017 **Methods and applications in the frontier between MX and CryoEM**
in Barcelona (Spanien)

Kontakt: *http://www.sbu.csic.es/conference-mx-cryoem-bcn/*

20.09. – 22.09.2017 **European Workshop on Photocathodes for Particle Accelerator Applications (EWPAA 2017)**
in Berlin

Kontakt:
https://www.helmholtz-berlin.de/events/ewpaa/index_en.html

24.09. – 26.09.2017 **The 4th Conference on New Advances in Condensed Matter Physics (NACMP 2017)**
in Suzhou (China)

Kontakt: *http://www.engii.org/conference/NACMP/*

24.09. – 26.09.2017 **The 8th International Conference on Advances in Physics (CAP 2017)**
in Suzhou (China)

Kontakt: *http://www.engii.org/conference/CAP/*

25.09. – 27.09.2017 **14th Confocal Raman Imanging Symposium**
in Ulm

Kontakt: *http://www.raman-symposium.com/*

25.09. – 27.09.2017 **9th Workshop on Substrate-Mediated Polymorphism in Organic Thin Films**
in Graz (Österreich)

Kontakt: *http://www.if.tugraz.at/smp/*

25.09. – 29.09.2017 **Autumn School on Correlated Electrons: The Physics of Correlated Insulators, Metals, and Superconductors**
in Jülich

Kontakt: *http://www.cond-mat.de/events/correl17/*

25.09. – 27.09.2017 **Basic Rietveld Refinement & Indexing Workshop**
in Newton Square (Pennsylvania, USA)

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

25.09. – 28.09.2017 **NSS-9. The 9th International Workshop on Nanoscale Spectroscopy and Nanotechnology**
in Gyeongju (Republik Korea)

Kontakt: *http://nss-9.com/*

25.09. – 29.09.2017 **Rietveld Refinement & Indexing Workshop**
in Newton Square (Pennsylvania, USA)

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

25.09. – 28.09.2017 **WIRMS 2017. Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources Workshop**
in Oxford (Vereinigtes Königreich)

Kontakt: *http://www.wirms2017.com/*

25.09. – 29.09.2017 **XIV Inter-American Microscopy Congress (CIASEM 2017)**
in Varadero (Kuba)

Kontakt: *http://www.ciasem2017.sld.cu/index.php/CIASEM/2017*

26.09. – 27.09.2017 **SAXS Escites: The International SAXS Symposium 2017**
in Graz (Österreich)

Kontakt: *http://www.anton-paar.com/tu-graz/saxs-excites/*

27.09. – 29.09.2017 **Advanced Rietveld Refinement & Indexing Workshop**
in Newton Square (Pennsylvania, USA)

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

27.09. – 29.09.2017 **Rhine-Knee Regional Meeting on Structural Biology**
in Münster

Kontakt: *http://regiomeeting.eu/*

28.09. – 30.09.2017 **20th Heart of Europe Bio-Crystallography (HEC meeting)**
in Jelenia Gora (Polen)

Kontakt: *http://hec-20.iimcb.gov.pl/*

28.09. – 28.09.2017 **5th Nordic Advanced Microscopy Workshop**
in Stockholm (Schweden)

Kontakt:
https://www.scilifelab.se/events/5th-nordic-advanced-microscopy-workshop/

Oktober 2017

02.10. – 06.10.2017 **Intermetallics Conference 2017 and School on mechanical behaviour of intermetallic phases**
in Bad Staffelstein

Kontakt: *http://www.intermetallics-conference.de/*

02.10. – 06.10.2017 **ic-rmm3: 3rd International Conference on Rheology and Modeling of Materials**
in Miskolc-Lillafüred

Kontakt: *http://www.ic-rmm3.eu/icrmm.php*

04.10. – 06.10.2017 **6th Joint Workshop on High Pressure, Planetary and Plasma Physics (HP4)**
in Göttingen

Kontakt:
https://indico.desy.de/conferenceDisplay.py?confId=16402

08.10. – 13.10.2017 **International Autumn School on Fundamental Crystallography and Electron Crystallography (IASFEC)**
in Sofia (Bulgarien)

Kontakt: *http://www.bgcryst.com/em2017/*

09.10. – 12.10.2017 **Condensed Matter Research at the IBR-2. An International Conference**
in Dubna (Russland)

Kontakt: *http://indico.jinr.ru/conferenceDisplay.py?confId=192*

09.10. – 13.10.2017 **Ultrafst Magnetism**
in Kaiserslautern

Kontakt: *http://www.physik.uni-kl.de/umc2017/*

09.10. – 11.10.2017 **VIII AUSE Congress and III ALBA User's Meeting**
in Madrid (Spanien)

Kontakt:
https://w3.ual.es/Congresos/AUSE/CONGRESO2017/index_congreso.html

09.10. – 11.10.2017 **Kolloid-Tagung 2017: "48. Hauptversammlung der Kolloid-Gesellschaft"**
in München

Kontakt:
https://www.gdch.de/veranstaltungen/www.kolloid17.ph.tum.de

10.10. – 13.10.2017 **JCNS Workshop 2017**
in Turzing

Kontakt:
http://www.fz-juelich.de/jcns/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/JCNSWorkshops/2017Workshop/AbstractsandRegistration/_node.html

11.10. – 13.10.2017 **NINMACH2017. 2nd International Conference on Neutron Imaging and Neutron Methods in Archaeology and Cultural Heritage**
in Budapest (Ungarn)

Kontakt: *https://indico.kfki.hu/event/518/*

15.10. – 20.10.2017 **6th Accelerator Reliability Workshop. ARW 2017**
in Versailles (Frankreich)

Kontakt:
http://www.synchrotron-soleil.fr/Workshops/2017/ARW-2017

16.10. – 19.10.2017 **25th International Conference on Materials and Technology**
in Portoroz (Slovenia)

Kontakt: *http://icmt25.com/en/*

16.10. – 31.10.2017 **CSHL X-ray Methods in Structural Biology Course**
in Cold Spring (New York, USA)

Kontakt:
https://meetings.cshl.edu/courses.aspx?course=C-CRYS&year=17

19.10. – 21.10.2017 **The 75th Annual Pittsburgh Diffraction Conference**
in Indiana (Pennsylvania, USA)

Kontakt: *http://www.pittdifsoc.org/conference.htm*

21.10. – 28.10.2017 **2017 Nuclear Science Symposium and Medical Imanging Conference, together with the 24th Symposium of Room-Temperature X- and Gamma-Ray Detectors**
in Atlanta (Georgia, USA)

Kontakt: *http://www.nss-mic.org/2017/*

23.10. – 23.10.2017 **GeCatS Infoday "Synchrotron Radiation and Neutrons for Catalysis, Materials Research and Development"**
in Frankfurt am Main

Kontakt: *http://dechema.de/en/GeCatS_Infoday_2017.html*

23.10. – 27.10.2017 **Structural Bioinformatics**
in Hinxton (Vereinigtes Königreich)

Kontakt:
http://www.ebi.ac.uk/training/events/2017/structural-bioinformatics-1

28.10. – 01.11.2017 **10th General Meeting of the International Proteolysis Society**
in Banff (Canada)

Kontakt: *http://www.ips2017.org/*

29.10. – 03.11.2017 **Advanced Topics in EM Structure Determination: Challenges and Opportunities**
in New York (New York, USA)

Kontakt: *http://nramm.nysbc.org/participants-guide/*

November 2017

02.11. – 03.11.2017 **Interfacing Chemistry with Patents**
in Barcelona (Spanien)

Kontakt:
https://www.scientificupdate.com/training/interfacing-chemistry-with-patents/20171102/

05.11. – 07.11.2017 **GCC 2017. 13th German Conference on Chemoinformatics**
in Mainz

Kontakt: *http://www.gdch.de/gcc2017*

06.11. – 10.11.2017 **62nd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials. MMM2017**
in Pittsburgh (Pennsylvania, USA)

Kontakt: *http://magnetism.org/*

06.11. – 10.11.2017 **IX School of the Argentinian Association of Crystallography**
in Bahia Blanca (Argentinien)

Kontakt: *mdailoff@bahiablanca-conicet.gob.ar*

12.11. – 14.11.2017 **25th Protein Structure Determination in Industry Meeting**
in Cambridge (Verinigtes Königreich)

Kontakt: *http://www.psdi2017.org/25117*

12.11. – 14.11.2017 **From Single- to Multiomics: Applications and Challenges in Data Integration**
in Heidelberg

Kontakt: *https://www.embo-embl-symposia.org/*

13.11. – 23.11.2017 **Macromolecular Crystallography School 2017**
in Montevideo (Uruguay)

Kontakt: *http://pasteur.uy/mx2017*

13.11. – 15.11.2017 **Structural biology and biophysics of RNA-protein complexes**
in Orléans (Frankreich)

Kontakt:
http://www.lestudium-ias.com/event/structural-biology-and-biophysics-rna-protein-complexes

14.11. – 17.11.2017 **Rayons X & Matière 2017**
in Villeneuve d'Ascq (Frankreich)

Kontakt: *http://www.rayonsxetmatiere.org/*

16.11. – 17.11.2017 **EMBL Conference: Revolutions in Structural Biology: Celebrating the 100th Anniversary of Sir John Kendrew**
in Heidelberg

Kontakt:
http://www.embl.de/training/events/2017/JKS17-01/index.html?_ga=2.251628032.702830212.1493824920-1740041149.1491823482

16.11. – 17.11.2017 **ICEAS2017. International Conference on Applied Sciences and Engineering 2017**
in Tirana (Albanien)

Kontakt: *http://iceas.fimif.edu.al/home.html*

20.11. – 21.11.2017 **ICG – Italian Crystal Growth**
in Milan (Italien)

Kontakt: *http://sites.unimi.it/ICG2017/index.html*

26.11. – 01.12.2017 **2017 MRS Fall meeting and Exhibit**
in Boston (Massachusetts, USA)

Kontakt: *https://www.mrs.org/fall2017*

Dezember 2017

03.12. – 07.12.2017 **Crystal 31. The 31st Biennial Conference of the Society of Crystallographers in Australia and New Zealand**
in Pullman Bunker Bay (Australien)

Kontakt: *http://crystal31.com/*

06.12. – 14.12.2017 **Structural and biophysical methods for biological macromolecules in solution**
in Singapur (Singapur)

Kontakt: *http://meetings.embo.org/event/17-macromolecule*

06.12. – 07.12.2017 **Röntgendiffraktometrie für die Praxis**
in Altdorf bei Nürnberg

Kontakt: *https://www.taw.de/ver/roentgendiffraktometrie-praxis*

10.12. – 15.12.2017 **High-Accuracy CLEM: Applications at Room Temperature and in cryo**
in Heidelberg

Kontakt:
https://www.embl.de/training/events/2017/LEM17-01/index.html?_ga=2.263148357.87988381.1493825942-1740041149.1491823482

16.12. – 17.12.2017 **3rd International Workshop on Material Science and Chemical Engineering**
in Istanbul (Türkei)

Kontakt: *http://eng-scoop.org/iwmsce/*

Januar 2018

27.01. – 02.02.2018 **2nd NEUBIAS. The Bioimage Analysis Community Conference**
in Szeged (Ungarn)

Kontakt:
http://eubias.org/NEUBIAS/neubias2020-conference/szeged-hungary-2018/

Februar 2018

04.02. – 08.02.2018 **Cryo-EM from Cells to Molecules: Multi-Scale Visualization of Biological Systems (F1). A Keystone Symposium on Cryo-EM**
in Tahoe City (Kalifornien, USA)

Kontakt:
http://www.keystonesymposia.org/index.cfm?e=web.Meeting.Program&meetingid=1576

18.02. – 23.02.2018 **Photionization & Photodetachment (GRC)**
in Galvestone (Texas, USA)

Kontakt: *http://www.grc.org/programs.aspx?id=12840*

27.02. – 02.03.2018 **ICON Europe 2018. 2nd International Conference on Nanoscopy: Beyond the Diffraction Limit**
in Bielefeld

Kontakt: *http://www.icon-europe.org/*

27.02. – 02.03.2018 **PHOTONICS2018. 13th International Exhibition**
in Moskau (Russland)

Kontakt: *http://www.photonics-expo.ru/en/*

März 2018

05.03. – 08.03.2018 **26th Annual Meeting of the German Crystallographic Society (DGK) 2018**
in Duisburg/Essen

Kontakt: *http://www.dgk-conference.de/*

11.03. – 16.03.2018 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie gemeinsam mit der EPS**
in Berlin

Kontakt:
http://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/tagungen/index.html

April 2018

24.04. – 27.04.2018 **XOPT'18. Interntaional Conference on X-ray Optics and Applications 2018**
in Yokohama (Japan)

Kontakt: *http://opicon.jp/info/20170601-876/*

29.04. – 04.05.2018 **IPAC18. International Particle Accelerator Conference 2018**
in Vancouver (Canada)

Kontakt:
https://www.aps.org/meetings/meeting.cfm?name=IPAC18

Mai 2018

27.05. – 01.06.2018 **Fatigue 2018**
in Poitiers (Frankreich)

Kontakt: *http://www.fatigue2018.com/*

Juni 2018

07.06. – 08.06.2018 **Röntgendiffraktometrie für die Praxis**
in Wuppertal

Kontakt: *https://www.taw.de/ver/roentgendiffraktometrie-praxis*

11.06. – 16.06.2018 **13th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (SRI 2018)**
in Taipei (Taiwan)

Kontakt: *http://www.nsrrc.org.tw/SRI%5F2018/*

18.06. – 22.06.2018 **2018 E-MRS Spring Meeting and Exhibit**
in Strasbourg (Frankreich)

Kontakt:
http://www.european-mrs.com/meetings/2018-spring-meeting

25.06. – 28.06.2018 **DSL2018. 14th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids**
in Amsterdam (Niederlande)

Kontakt: *http://www.dsl-conference.com/*

Juli 2018

22.07. – 27.07.2018 **XAFS2018. 17th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure**
in Krakau (Polen)

Kontakt: *http://www.xafs2018.com/*

29.07. – 03.08.2018 **Diffraction Methods in Structural Biology (GRC)**
in Lewiston (Maine, USA)

Kontakt: *http://www.grc.org/programs.aspx?id=11656*

August 2018

19.08. – 24.08.2018 **XRM2018: 14th International Conference on X-ray Microscopy**
in Saskatoon (Canada)

Kontakt: *http://xrm2018.com/*

22.08. – 27.08.2018 **31st European Crystallographic Meeting (ECM31)**
in Oviedo (Spanien)

Kontakt: *http://ecm31.ecanews.org/en/index.php*

26.08. – 30.08.2018 **7th EuCheMS Chemistry Congress**
in Liverpool (Vereinigtes Königreich)

Kontakt: *http://www.rsc.org/events/euchems2018*

Überblick 2018

August/September 2018	**3rd Meeting of the DGK's Young Crystallographers** in Aachen Kontakt: *http://dgk-home.de/aks/jkyc/*
09.09. – 09.09.2018	**9th European Silicon Days** in Saarbrücken Kontakt: *http://www.9esd.com/*
07.10. – 12.10.2018	**SAS2018. XVII International Conference on Small-Angle Scattering** in Traverse City (Michigan, USA) Kontakt: *http://sas2018.aps.anl.gov/*

DGK-Homepage

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

http://dgk-home.de

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

WWW-Redakteur:

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

DMG-Homepage

Auch die Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG) hat eine Homepage im Internet:

http://www.dmg-home.de

Der WWW-Server der DMG dient als Fixpunkt für die elektronische Kommunikation innerhalb der Gesellschaft sowie zur Verbreitung von Informationen über die DMG und die Mineralogie als Wissenschaft im Internet. Der WWW-Server wird vom Institut für Mineralogie und Geochemie der Universität zu Köln technisch bereitgestellt und betreut.

WWW-Redakteur:

Dr. Ralf Milke (milke@zedat.fu-berlin.de)

DGKK-Homepage

Die Homepage der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK) ist im Internet unter der Adresse

http://www.dgkk.de

zu finden. Neben einem Link zum Mitteilungsblatt sind auf den Web-Seiten Ansprechpartner in Institutionen und Firmen angegeben, in denen Mitglieder der DGKK tätig sind. Der WWW-Server wird vom IKZ Berlin technisch bereitgestellt und betreut.

WWW-Administratoren:

Sabine Bergmann und Uwe Rehse (rehse@ikz-berlin.de)

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

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

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

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

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

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

Geburtsdatum: .....

Dienstanschrift*:

Universität/Firma: .....

Institut/Abteilung: .....

Straße: .....

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

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

Privatanschrift*:

Straße: .....

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

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

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

Jahresbeitrag:

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

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

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

Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK: DE48ZZZ00001148361

Mandatsreferenz: wird separat mitgeteilt

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

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

Bankinstitut: .....

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

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

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

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

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

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

Der Jahresbeitrag ist für das laufende Jahr bis jeweils zum 31. Januar zu entrichten. Er wird in der Regel mittels Bankeinzugsverfahren eingezogen. Das Formular für eine schriftliche Einzugsermächtigung findet sich unter folgender URL:

http://dgk-home.de/intern/mitglieder/mitgliedschaft

Die Mitgliedsbeiträge für 2016 werden innerhalb von vier Wochen nach Erscheinen dieses Mitteilungsheftes über SEPA-Lastschrift eingezogen. Die Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK lautet DE48ZZZ00001148361. Die Mandatsreferenz lautet DGK-######, wobei ###### für die persönliche Mitgliedsnummer ergänzt durch führende Nullen steht.

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

A	Ordentliche Mitglieder	35 € (+ 5 € Spende*)	
B	Studentische Mitglieder	10 €	
D	Doktoranden (bis maximal zum 31. Lebensjahr)	10 €	auf Antrag
E	Stellungslose Mitglieder	10 €	auf Antrag
F	Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand	10 € (+ 5 € Spende*)	auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand	

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

* Die Spende wird für das Preisgeld für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen und nicht spenden möchten, müssen dies bitte dem Schatzmeister mitteilen.

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

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 28. März 2017 in Karlsruhe beschlossen.