



Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 49

September 2019





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

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen: AXO Dresden GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Impact, CrystalMaker Software Ltd., Dectris Ltd., Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Malvern Panalytical GmbH, Rigaku Europe SE, Rigaku Innovative Technologies Inc., Röntgenlabor Dr. M. Emrich, STOE & Cie GmbH.

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:

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

Redaktionsbereiche:

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

Druck und Bindung:

UNIdruckerei – Dipl.-Kfm. (FH) Bert Buschmann
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351 3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

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

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

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

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

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

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

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

Liebe Mitglieder der DGK,

seit der letzten Ausgabe des DGK-Mitteilungen gab es eine Reihe von sehr erfreulichen Ereignissen. Während des *European Crystallographic Meeting* 2018 in Oviedo wurde Prof. Udo Heinemann zum neuen Präsidenten der *European Crystallographic Association* gewählt, wozu ich ihm herzlich gratuliere!

Die 27. Jahrestagung der DGK fand dieses Jahr in Leipzig statt, genau 20 Jahre nachdem bereits die 7. Jahrestagung in Leipzig zu Gast gewesen war. Für die hervorragende Organisation und die Durchführung der Jahrestagung möchte ich Prof. Holger Kohlmann, Prof. Oliver Oeckler und Prof. Norbert Sträter an dieser Stelle noch einmal ganz herzlich danken. Insgesamt wurden in sechs Plenarvorträgen, 20 Mikrosymposien und den Posterpräsentationen aktuelle Entwicklungen in den verschiedenen Bereichen der Kristallographie präsentiert und es gab viel Raum für Diskussionen. Der Ehrenabend mit dem Vortrag der Laue-Preisträgerin und der Überreichung der Preise hatte im Paulinum der Universität Leipzig einen ganz besonderen Rahmen.

Die Mitgliederversammlung, die während der Jahrestagung in Leipzig stattfand, beschloss wesentliche Änderungen der Ordnung zur Durchführung von Jahrestagungen, weshalb diese neue Ordnung in dieser Ausgabe der Mitteilungen enthalten ist. Ebenso enthält diese Ausgabe u. a. auch die Berichte über die Aktivitäten der DGK-Arbeitskreise sowie die Berichte der Reisestipendiaten von ihrer Teilnahme am ECM in Oviedo.

Im August wird das diesjährige *European Crystallographic Meeting* in Wien stattfinden. Wie in früheren Jahren unterstützt die DGK wieder die Teilnahme mehrerer junger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler am ECM durch Reisestipendien.

Die Bewerbung der DGK für die Ausrichtung des IUCr-Kongresses im Jahr 2029 nimmt konkrete Formen an. So wird während dem nächsten ECM in Wien auf verschiedene Weise auf unsere Bewerbung aufmerksam gemacht und die DGK-Homepage ist nun auch in englischer Sprache verfügbar.

Die 28. Jahrestagung der DGK wird vom 23. bis 27. Februar 2020 als gemeinsame Jahrestagung mit der *Polish Crystallographic Association* in Wroclaw stattfinden und ich freue mich heute schon darauf, Sie in Wroclaw begrüßen zu dürfen.

Herzliche Grüße,

Ihr



Ralf Ficner (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 26.03.2019 in Leipzig	9
Anlage zu Punkt 6.2: Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees	16
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	24
Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	26
Rückblick zur 27. Jahrestagung der DGK in Leipzig	29
Berichte der Stipendiaten zur ECM31 in Oviedo	34
Wahlen zu den Fachkollegien der DFG	38
Verantwortliche für die Öffentlichkeitsarbeit gesucht	43
Kristallographie und Umweltschutz – Bestimmung der Kristallstruktur des plastikabbauenden <i>Ideonella sakaiensis</i> Enzyms MHETase im Komplex mit einem nicht-hydrolysierbaren Liganden	45
Neuer Röntgentopograph für die Inspektion von Halbleiter-Wafern	48
Buchrezension: „Rietveld Refinement: Practical Powder Diffraction Pattern Analysis using TOPAS“	51

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht zu den Aktivitäten des AK 1 „Biologische Strukturen“	57
Bericht zum DGK-AK1-Workshop „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“	58
Jahresbericht 2018 des AK 6 „Molekülverbindungen“	61
DGK-Workshop „Breaking the Walls: Complementary of Synchrotron and Neutron Scattering“ des AK 7 „Neutronenstreuung“	62
Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“ im Jahr 2018	63
Bericht zum 19. DMG/DGK-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR- Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“	65
DMG/DGK Ph.D. student course: “Pair Distribution Function Analysis Workshop” of the AK 13 “Pulverdiffraktometrie”	67

Tätigkeitsbericht des AK 19 „Kristallchemie“	69
Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“	71
Personalia:	
Jubilare 2019	77
Verstorbene Mitglieder	79
Ehrungen	80
Max-von-Laue-Preis 2019 an Mirijam Zobel	81
Laudatio anlässlich der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2019 an Michael Ruck	82
Laudatio anlässlich der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2019 an Georg E. Schulz	85
Laudatio anlässlich der Verleihung des Waltrude und Friedrich Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2019 an Sebastian Bette	89
Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis an Matthias Zschornak	92
Ankündigungen:	
Polish-German Crystallographic Meeting 2020	97
ECM32 in Wien	98
Tipps & Tricks für SHELX	99
4 th International School on Aperiodic Crystals	100
Neutron Scattering and Imaging for Newcomers	101
Max von Laue-Preis 2020	102
Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2020	103
Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2020	104
Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie	105
Tagungen und Termine	106
Homepages von DGK, DMG und DGKK	115
Aufnahmeformular	117
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	119
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten	120

PROTOKOLL ZUR
MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER
DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR
KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 26.03.2019 IN LEIPZIG

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der Jahrestagung 2019 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am Dienstag, den 26. März, 12:00 – 13:30 Uhr, im Hörsaal 9 der Universität Leipzig, Campus Augustusplatz statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Ralf Ficner, eröffnet die Sitzung und begrüßt die anwesenden Mitglieder der DGK.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Laut Teilnehmerliste sind 82 Mitglieder anwesend. Nach § 9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 1083 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 55 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird unverändert angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 06.03.2018 in Essen

Das Protokoll wird – wie in Heft 48 der „Mitteilungen der DGK“ ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

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

6 Berichte

6.1 Bericht des Vorsitzenden

Ralf Ficner berichtet über Entwicklungen seit der letzten Mitgliederversammlung. Insbesondere wurden von der DGK in Abstimmung mit anderen Gesellschaften Kandidaten für die Fachkollegien der DFG vorgeschlagen. Mitglieder der DGK sollten

ihr Wahlrecht nutzen. Ein ausführlicher Bericht zur Fachkollegienwahl ist auf Seite 38 in dieser Ausgabe der Mitteilungen abgedruckt.

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 beigelegt.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Töbrens berichtet über die Entwicklung der Mitgliederzahlen. Die DGK hatte am 23.03.2019 insgesamt 1094 Mitglieder, davon 880 Vollmitglieder, 56 Studenten und Doktoranden, 13 Arbeitslose, 100 Pensionäre, 28 Dauermitglieder, 6 Ehrenmitglieder, 8 Institute und 3 weitere unpersönliche Mitglieder.

Die Änderungen gegenüber dem vorherigen Jahr sind stark beeinflusst durch eine Aufräumaktion in der Datenbank. Insbesondere waren viele Mitglieder noch als Studenten eingetragen, die bereits die Altersgrenze für diese Ermäßigung überschritten hatten und in der Regel auch bereits berufstätig waren. Diese wurden als Vollmitglieder oder, auf Antrag, als arbeitslose Mitglieder reklassifiziert. Daneben wurden einige Mitglieder, bei denen über längere Zeit weder Kontaktaufnahme noch eine Abbuchung des Mitgliedsbeitrags möglich war, aus der Mitgliederliste gestrichen.

Trotzdem ist verstärkte Mitgliederwerbung bei Doktoranden dringend nötig.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann legt die Einnahmen-Überschuss-Rechnung für 2018 sowie den Haushaltsplan für 2019 vor. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigelegt.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch legen ihre Berichte zur Prüfung der Kassenunterlagen der DGK für das Geschäftsjahr 2018 vor. Die Prüfung ergab keine Unstimmigkeiten und die Verwendung der Mittel erfolgte satzungsgemäß. Der ausführliche Kassenprüfungsbericht folgt als Anlage.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

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

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand &

6.8 Bericht des Vertreters der DGK im Vorstandsrat der DPG

Dieses Amt ist derzeit in Personalunion mit dem Vertreter der DPG, David Rafaja, besetzt. Ein Bericht des Vertreters der DPG liegt leider nicht vor.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Hartmut Stöcker berichtet schriftlich: Die Redaktion der Mitteilungen dankt allen Autoren für ihre Beiträge und den Werbekunden für die Mitfinanzierung des Heftes. Für das nächste Heft 49 laden wir alle DGK-Mitglieder ein, das Heft aktiv zu gestalten. Wir freuen uns über jegliche Nachrichten, Berichte und Aufsätze mit Kristallographie-Bezug. Redaktionsschluss wird wie in den vorherigen Jahren der 31. Mai sein.

Außerdem möchten wir alle Mitglieder bitten, ihre aktuellen Kontaktdaten – insbesondere die Anschrift – per Formular auf der Homepage oder E-Mail an den Schriftführer mitzuteilen. Nur auf diesem Wege können wir sicherstellen, dass jeden ein Heft erreicht und dass unnötige Portokosten vermieden werden.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Die englische Version der Webseite ist inzwischen online. Die Umstellung von http auf das sicherere https-Protokoll erfolgt demnächst. Dann kann auch das Formular zur Aktualisierung der Mitgliederdaten wieder freigeschaltet werden. Insbesondere die Arbeitskreise sind aufgerufen, ihre Aktivitäten auf der Webseite einzupflegen. Aber auch alle einzelnen DGK-Mitglieder können Zugang zu den DGK-Webseiten erhalten und bekommen damit eine potentielle Möglichkeit Webseiteneinhalte zu aktualisieren.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird per Akklamation entlastet.

8 Annahme der Beitragsordnung

Die Mitgliederversammlung beschließt einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, die am Ende dieses Heftes abgedruckte Beitragsordnung. Da der Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie derzeit über ausreichende Mittel verfügt, wird die mit dem Beitrag erbetene Spende statt dessen für das Preisgeld für den Laue-Preis verwendet werden.

9 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Der Vorstand schlägt Ullrich Pietsch und Alexandra Friedrich als Kassenprüfer vor. Beide werden einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, gewählt.

10 Neufassung der Ordnung für die Jahrestagung

Der Antrag, über die anstehenden Änderungen der „Ordnung zur Organisation und Durchführung der Jahrestagungen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.“ insgesamt abzustimmen, wird von der Mitgliederversammlung abgelehnt. Die Änderungen wurden einzeln diskutiert und abgestimmt. Die im Folgenden verwendete Nummerierung bezieht sich auf die neue, in dieser Ausgabe der „Mitteilungen“ abgedruckte, Fassung:

- Die Ergänzung um einen neuen Absatz 4 wird angenommen (1 Enthaltung):
„4. Die Tagungsleitung stellt zu ihrer Unterstützung ein Programm- und Organisationskomitee zusammen. Der/die stellvertretende Vorsitzende der DGK ist Mitglied dieses Komitees.“
- Die Ergänzung des Absatz 10 um zwei Punkte wird angenommen:
„Kosten, die der unmittelbaren Verwirklichung des Vereinszwecks der DGK im Rahmen der Jahrestagung dienen, können von der DGK getragen werden.“
(einstimmig)

„Über die Höhe der Tagungsbeiträge ist mit dem Vorstand Einvernehmen zu erzielen.“ (1 Enthaltung)

- Die Änderung des Absatzes 13, ein barrierefreier und ungehinderter Zugang zu allen für die Tagung genutzten Räumlichkeiten sei nicht nur „vom Veranstalter zu beachten“ sondern „sicherzustellen“ wird angenommen (einstimmig).
- Die Ergänzung des Absatzes 7 zu den inhaltlichen Schwerpunkten der Tagung um zwei Sätze wird angenommen:

„Dabei ist darauf zu achten, dass alle in der DGK vertretenen Richtungen der Kristallographie angemessen vertreten sind.“ (einstimmig)

„Die Arbeitskreise sind wie in der Arbeitskreisordnung vorgesehen zu beteiligen.“ (einstimmig)

- Die Ergänzung um einen neuen Absatz 6 wird angenommen (1 Enthaltung):

„6. Grundsätzlich besteht die Jahrestagung aus folgenden Teilen:

- Wissenschaftliches Programm: Plenarvorträge, freie Vorträge, Postersitzungen sowie eventuell ergänzende Formate
- Max-von-Laue-Preisvortrag
- DGK-Ehrenabend
- *Welcome Reception*
- Gesellschaftsabend
- Mitgliederversammlung und sonstige Sitzungen
- Industrieausstellung
- Workshops und Industriesymposien (Entscheidung obliegt Tagungsleitung)“

Im Rahmen dieser Diskussion erfolgte der Vorschlag, „Lehre & Öffentlichkeitsarbeit“ als Schwerpunkt aufzunehmen. Hierüber wurde noch nicht abgestimmt.

- Die Ergänzung um einen neuen Absatz 16 wird angenommen (einstimmig):

„16. Die Gestaltung des Ehrenabends obliegt dem Vorstand, der dabei in organisatorischen Fragen von der Tagungsleitung unterstützt wird.“

- Die Ergänzung um einen neuen Absatz 17 wird angenommen (einstimmig):

„17. Industriesymposien sind von einem Unternehmen unterstützte Veranstaltungen, die nicht von der Programmkommission, sondern von dem Unternehmen koordiniert und inhaltlich ausgestaltet wird. Die Tagungsleitung hat das Recht, die Programme von den Unternehmen abzufordern und diese inhaltlich zu prüfen.“

- Der Vorschlag, aus Absatz 9 zu den wissenschaftlichen Beiträgen den Satz: „Die Autoren sind aufgefordert, präsentierte Strukturen zeitnah in geeigneten Datenbanken zu hinterlegen.“ zu streichen, führte zu einer längeren Diskussion.

Die Ergänzung der Tagesordnung um einen alternativen Vorschlag, nur „zeitnah“ zu streichen, wird zugelassen (1 Gegenstimme, 7 Enthaltungen). Der weitergehende Antrag auf komplette Streichung wurde dann abgelehnt. (25 Ja, 39 Gegenstimmen, 6 Enthaltungen). Der anschließende Antrag, nur das „zeitnah“ zu streichen, wurde angenommen (4 Gegenstimmen, 8 Enthaltungen).

- Der Vorschlag, aus Absatz 11 zur Beauftragung von Dritten den Aspekt der Kostenminimierung zu streichen, wird angenommen (3 Gegenstimmen, 4 Enthaltungen).

- Vier Änderungen, welche sich auf die gesamte Ordnung erstrecken, wurden angenommen:
 - „Der Veranstalter“ und „der Organisator“ werden durch „die Tagungsleitung“ ersetzt. (einstimmig)
 - Die Bezeichnung „Gemeinschaftsabend“ soll durch „Gesellschaftsabend“ ersetzt werden. (1 Gegenstimme, 1 Enthaltung)
 - Die Bezeichnung „Unkostenbeitrag“ soll durch „Beitrag“ ersetzt werden. (6 Enthaltungen)
 - Die Bezeichnung „Teilnehmer“ soll durch „Teilnehmende“ ersetzt werden. (4 Gegenstimmen, 11 Enthaltungen)

In der lebhaften Diskussion zum letzten Punkt wurde die alternative Version „Teilnehmerinnen/Teilnehmer“ ins Spiel gebracht, aber letztlich nicht zur Abstimmung gestellt.

11 Gemeinsame Jahrestagung mit Polen 2020

Susan Schorr stellt den Stand der Planungen vor: *Chairs* des deutschen Teils des Organisationsteams sind Susan Schorr und Udo Heinemann. Die Tagung wird vom 23. bis 27.02.2020 stattfinden, beginnt also an einem Sonntag. Dieser Termin ist früher als unsere normale Jahrestagung und sehr viel früher als die normale polnische Tagung im Juni. Es ist aber die einzige Woche, in welcher sich die Semesterferien in Deutschland und Polen überschneiden. Tagungsort wird Breslau sein, wo es ein geeignetes Konferenzzentrum im Zentrum der Stadt gibt. Die Organisation soll über Conventus laufen.

12 Jahrestagung 2021

Die Jahrestagung 2021 wird in Hamburg stattfinden. Edgar Weckert (DESY) übernimmt die Tagungsleitung.

13 Deutsche Bewerbung um die Ausrichtung des IUCr-Kongresses 2029

Manfred Weiss leitet dieses Vorhaben. Zum derzeitigen Zeitpunkt, lange vor der geplanten Vorbewerbung auf der IUCr 2020 in Prag, gibt es aber nur einige Werbeaktivitäten.

14 Verantwortlicher für Öffentlichkeitsarbeit

Ralf Ficner ruft zur Suche nach einem neuen Verantwortlichen für Öffentlichkeitsarbeit auf. Dieses Amt ist seit längerem *de facto* vakant. Öffentlichkeitsarbeit erfolgt derzeit nur sporadisch. Eine regelmäßige Öffentlichkeitsarbeit ist aber wichtig, sowohl für die zukünftige Entwicklung der DGK als auch der Kristallographie als Fach. Im Vorstand wird diskutiert, dieses Amt aufzuwerten.

15 Sonstiges

Anträge auf finanzielle Unterstützung für Veranstaltungen der Arbeitskreise sind bei Bedarf auch kurzfristig, abweichend von den Terminen der Vorstandssitzungen, möglich.



Daniel Többens
(Schriftführer)

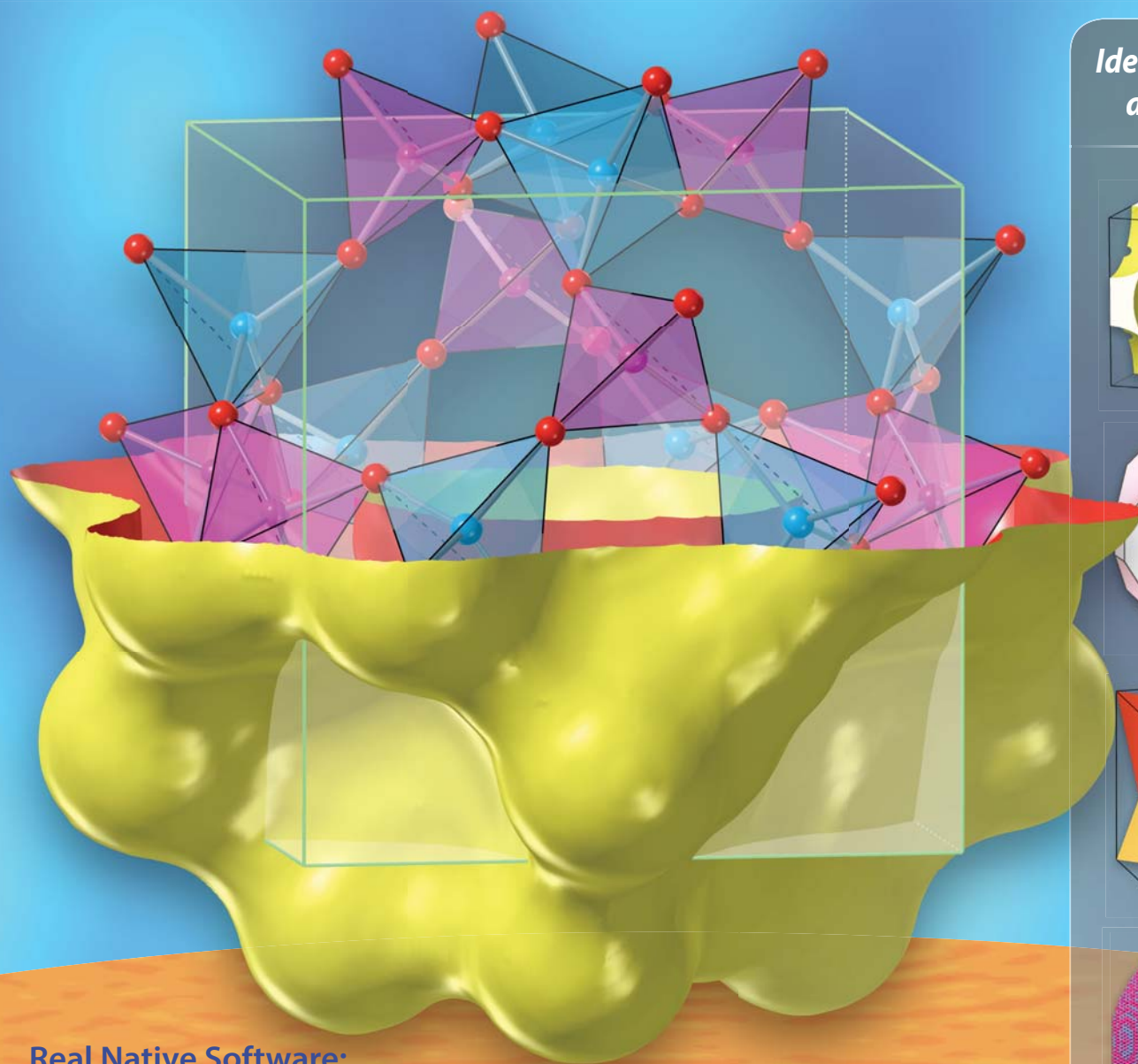
Visualize
Volumetric Data

THE ALL-NEW 64-BIT CRYSTALMAKER X

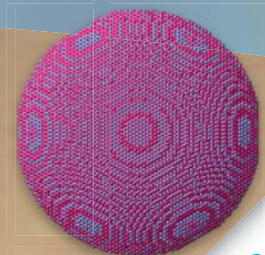
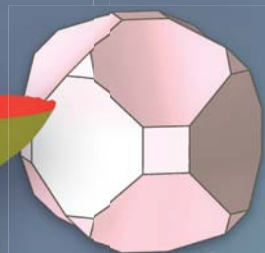
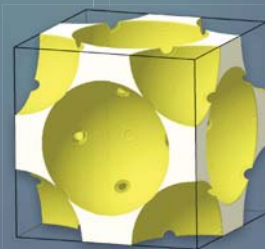
CrystalMaker[®]

INTERACTIVE CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURES MODELLING

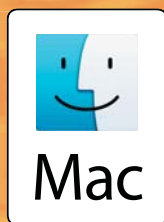
The best way to understand crystal structures and their properties.
Say goodbye to dusty crystallography • Bring crystals to life!



*Ideal for Teaching
and Research*



Real Native Software:
A Better User Experience

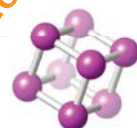


we innovate • others imitate

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTALMAKER.COM

**Download a Free Demo
New Video Tutorials**



ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DER VORSITZENDEN DES NATIONALKOMITEES

Im Rahmen der *Councils* der ECM31 in Oviedo am 23.08. und 25.08.2018 wurde Deutschland durch Dr. Ute Kolb, Dr. Claudia Weidenthaler, Prof. Torsten Gesing und Prof. Ralf Ficner vertreten. Dr. Manfred Weiss wurde als Gast akzeptiert. Es wurde das Ansinnen Deutschlands in 2029 zur Bewerbung für die IUCr kundgetan.

Nach Entlastung des alten Vorstands wurde ein neuer Vorstand gewählt. Vize-Präsident Prof. Udo Heinemann (Berlin) wurde neuer Präsident der ECA. Vize-Präsident ist jetzt Prof. Marijana Đaković, (Prag/Tschechien). Der Schatzmeister der ECA Prof. Christian Lehmann (Mülheim) gibt sein Amt an Dr. Jacob Overgaard (Aarhus/Dänemark) ab. Dr. Arie van der Lee (Montpellier/Frankreich) ersetzt Dr. Georgina Rosair (Edinburgh/UK) als Sekretär. Prof. Carl Henrik Gørbitz, Officer (Oslo/Norwegen) bleibt für die Stipendien zuständig.

Ehemalige Officer:

Prof. Marijana Đaković, Officer, Universität Zagreb, Kroatien
Prof. Joke Hadermann, Officer, Universität Antwerpen, Belgien
Dr. Fermín Otalora, Education Coordinator, Armilla, Granada, Spanien

Neu gewählte Officer:

Dr. Jan Dohlanek, Officer (SIG's), Vestec, Tschechische Republik
Prof. Delia Haynes, Officer (National Members), Universität Stellenbosch, Südafrika
Dr. Consiglia Tedesco, Officer (Education), Università di Salerno, Italien

Es wird mitgeteilt, dass die *African Crystallographic Association* (AfCA) auf der IUCr in Prag 2020 offiziell um Aufnahme in die IUCr als *Regional Associate* ersuchen wird. Des Weiteren muss Russland aus der ECA ausgeschlossen werden, da es von dort nicht möglich ist, die Beitragszahlungen durchzuführen. Die „Special Interest Group“ SIG2 wird in „Quantum Crystallography“ umgenannt. Die SIG-14 „Dynamics, Disorder, Diffuse Scattering (D3)“ wurde gegründet. Mitglieder von SIGs müssen jedoch immer Mitglieder der ECA sein.

Es wurden folgende ECM-Tagungsorte festgelegt:

2019: ECM32, Wien, Österreich, 18. – 23.08.2019
2020: IUCr, Prag, Tschechien, 22. – 30.08.2020
2021: ECM33, Versailles, Frankreich
2022: ECM34, Padua, Italien

Die Reihe der *European Crystallography School* (ECS) wird 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 Symmetriellehre und Beugungsmethoden.

Liste der ECS-Orte:

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

ECS4 (2017): Warschau, Polen, 70 studentische Teilnehmer

ECS5 (2018): Stellenbosch, Südafrika

ECS6 (2020): Budapest, Ungarn, 05. – 11.07.2020

ECA-Preise:

Der zehnte Max-Perutz-Preis der ECA (für signifikante Beiträge auf dem Gebiet der Kristallographie) wurde an Prof. Sine Larsen vom Institut für Chemie an der Universität in Kopenhagen, Dänemark für ihre vielfältigen Beiträge zu verschiedensten Aspekten der Kristallographie verliehen. Darunter sind Kristallstrukturanalysen organischer Moleküle und Proteine, Ladungsdichtestudien und die Entwicklung von Synchrotronstrahlungsanlagen.

Den neunten *Erwin Felix Lewy Bertaut Prize* der ECA und der *European Neutron Scattering Association* (ENSA) erhielt Dr. Matthias Zschornak von der Technischen Universität Bergakademie, Freiberg, Deutschland. Er wurde für seine herausragenden Beiträge zur Entwicklung der resonanten Röntgenbeugung, seine Perowskit-Strukturstudien und umfangreichen elektronischen Berechnungen ausgezeichnet, die ein gründliches physikalisches Verständnis der Eigenschaften wichtiger Materialien ermöglichen.

Das Treffen des Nationalkomitees fand am 25.08.2018 im Zuge der ECM31 statt. Anwesend waren Torsten Gesing, Claudia Weidenthaler, Ralf Ficner, Manfred Weiss. Für die Vorbereitung von Deutschland zum 28. IUCr-Kongress soll an der ECM in Wien bereits mit einem Stand geworben werden. Der 25. IUCr-Kongress findet in Prag, 22. – 30.08.2020 statt. Die Nominierungen für das *Executive Committee* und die Kommissionen der IUCr müssen Mitte 2019 eingereicht werden.

Der 26. IUCr-Kongress ist in Melbourne, Australien für 22. – 29.08.2023 geplant. Für 2026 hat sich Xian, China beworben.

Ute Kolb, Mainz

PHOTON III – Mixed Mode Detection



***We cannot solve our problems with the same thinking
we used when we created them.***

Albert Einstein

PHOTON III – Best performance for your application needs

The PHOTON III detector series benefits from mixed-mode detection, seamlessly combining photon counting and integration modes, to dramatically improve the data quality:

- No parallax smearing for superior data
- Photon counting with zero read noise and zero dark current for the ultimate in sensitivity
- Strong reflections accurately integrated with no count rate saturation
- Largest home-lab detector for efficient data acquisition
- Zero dead time, shutterless and continuous data collection for the fastest experiments

www.bruker.com/photon3

Innovation with Integrity

Crystallography

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Den Einnahmen von knapp 30.000 € stehen Ausgaben in Höhe von gut 25.000 € gegenüber, auf die ich im Einzelnen kurz eingehen möchte. Die Produktions- und Versandkosten der Mitteilungen übertreffen die Anzeigeneinnahmen mit ca. 2000 €. Leider ist die Summe der Rücklastschriften wieder angestiegen und entspricht den Beiträgen von 25 vollzahlenden Mitgliedern. Wir werden die betroffenen Mitglieder anschreiben, um aktuelle Bankverbindungen und Einzugsermächtigungen bitten und die Außenstände einfordern. Bei den Verwaltungskosten sind die Kosten in Höhe von 595 € für unsere Geschäftsstelle am Firmensitz von Conventus enthalten. Die Webseite wurde professionell auf Englisch übersetzt und ist damit für die Bewerbung um die IUCr2029 wesentlich besser aufgestellt. Die ECA hat für 2018 keinen Beitrag in Rechnung gestellt. Dies wird nach dem Wechsel im Amt des Schatzmeisters 2019 passieren und wieder mit ca. 1000 € zu Buche schlagen. Die AKs haben weniger Geld ausgegeben als beantragt; hier ist tatsächlich Luft nach oben. Die Reisestipendien wurden ausgeschöpft und das Preisgeld für den Liebau-Preis aus Ihren Spenden zur Verfügung gestellt.

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

Einnahmen-Überschussrechnung 2018 der DGK			
Einnahmen 2018			
Mitgliedsbeiträge inkl. Liebau-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2018	20 734,99 €	21 797,95 €
	Barzahler 2018	740,00 €	
	Entnahme Dauerm Mitglieder	182,96 €	
	Beiträge rückwirkend	140,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Spenden			0,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	1 700,00 €	2 990,30 €
	Rückzahlungen	1 290,30 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4 800,00 €
Summe Einnahmen			29 588,25 €
Ausgaben 2018			
Mitteilungen			-6 830,35 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragserstattung	0,00 €	-995,00 €
	Rücklastschriften	-995,00 €	
Administration	Bankgebühren	-232,02 €	-3 774,94 €
	Stornokosten	-92,94 €	
	Medaillenprägung	0,00 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-731,25 €	
	Webseite	-2 718,73 €	
	Reisekosten & Spesen	0,00 €	

Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-50,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-4 803,52 €	-13 769,52 €
	Ausgaben	-2 091,00 €	
Reisestipendien	ECM Oviedo	-2 600,00 €	
Spenden Liebau-Preisgeld		-2 775,00 €	
Max von Laue-Preisgeld		-1 500,00 €	
Summe Ausgaben			-25 419,81 €
Rücklagenkonto Dauermmitglieder 2018			
Einnahmen	3 neue Dauermmitglieder	360,00 €	360,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2018		-182,96 €
Überschuss 2018			177,04 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2018			4 345,48 €

Kontoführung 2018 der DGK			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	3 660,80 €	5 430,24 €	1 769,44 €
Rücklage Dauermmitglieder 910	1 926,98 €	2 104,02 €	177,04 €
Sonderkonto AK 21	737,84 €	1 636,84 €	899,00 €
DKG-Cash 085	34 516,50 €	36 016,50 €	1 500,00 €
Guthaben der DGK	40 842,12 €	45 187,60 €	4 345,48 €

Jahresabrechnung 2018 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2018			
Zinsen	Laue-Sparbuch 920	0,00 €	0,00 €
	Laue-Kapital 930	0,00 €	
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			0,00 €
Ausgaben 2018			
Laue-Preis 2018	Dr. Elena Bykova		-1 500,00 €
Summe Ausgaben (Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen)			-1 500,00 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben 2018			-1 500,00 €
Kontoführung 2018			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Laue-Sparbuch 920	112,65 €	112,65 €	0,00 €
Laue-Kapital 930	60 000,00 €	60 000,00 €	0,00 €
Kapital der Stiftung	60 112,65 €	60 112,65 €	0,00 €

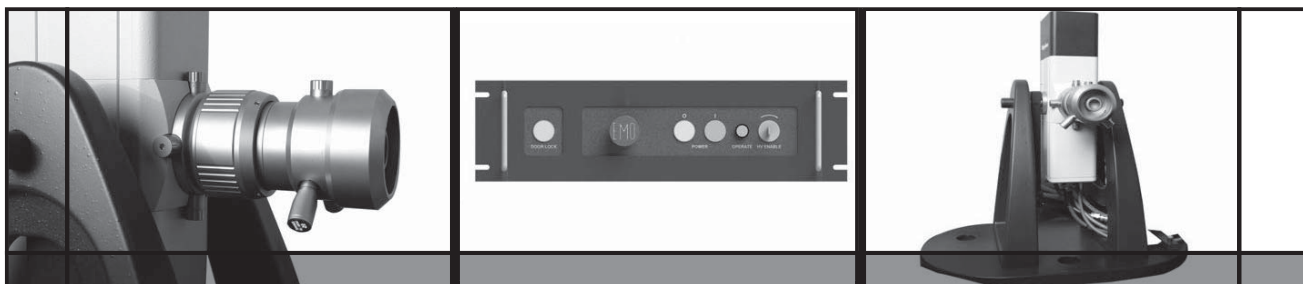
Jahresbilanz 2018			
Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie			
Einnahmen 2018			
Zinsen	Stiftungskapital 870	0,00 €	0,00 €
Spenden für Preisgeld			2 775,00 €
Summe Einnahmen			2 775,00 €
Ausgaben 2018			
Kein Preis vergeben			0,00 €
Summe Ausgaben			0,00 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben 2018			2 775,00 €
Kontoführung 2018			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Stiftungskapital 870	33 841,12 €	36 616,12 €	2 775,00 €
Kapital der Stiftung	33 841,12 €	36 616,12 €	2 775,00 €

Haushaltsvoranschlag 2019 der DGK				
Einnahmen 2019				Vorjahr
Mitgliedsbeiträge	500 Vollzahler	20 000,00 €	23 025,00 €	21 797,95 €
	75 Pensionäre/Rentner	1 125,00 €		
	75 Studierende	750,00 €		
	Dauerm Mitglieder	150,00 €		
	Barzahler 2019	1 000,00 €		
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €	0,00 €
Spenden			0,00 €	0,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	0,00 €	0,00 €	2 990,30 €
Anzeigen Mitteilungen			4 000,00 €	4 800,00 €
Summe Einnahmen			27 025,00 €	29 588,25 €
Ausgaben 2019				Vorjahr
Mitteilungen			-7 500,00 €	-6 830,35 €
Mitgliedsbeiträge	Rücklastschriften/ Erstattung	-400,00 €	-400,00 €	-995,00 €
Administration	Bankgebühren	-250,00 €	-3 950,00 €	-3 774,94 €
	Geschäftsstelle	-600,00 €		
	Medaillen	-2 700,00 €		
	Reisekosten & Spesen	-400,00 €		
Verbände	ECA, BVMatW		-2 200,00 €	-50,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-13 600,00 €	-21 600,00 €	-13 769,52 €
Reisestipendien	ECM 32, ECS6, CCK	-4 000,00 €		
Ehrenabend Leipzig	Paulinum	-1 200,00 €		
IUCr Berlin 2029	Werbematerial	-2 500,00 €		
Laue-Preisgeld	Auszahlung	-1 500,00 €		
Summe Ausgaben			-36 850,00 €	-25 419,81 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2019			-9 825,00 €	4 168,44 €

X-ray Beam Modules

Rigaku Innovative Technologies

New Components and Retrofitting Existing Systems

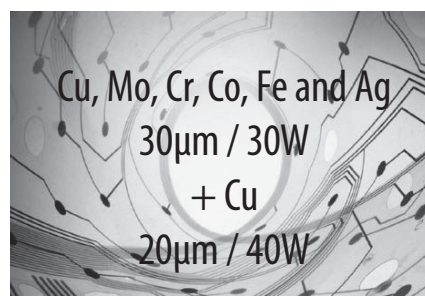
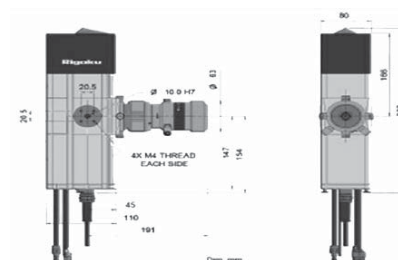


Retrofitting Existing Equipment

- 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
 - Spectral purity, exemplary beam size and minimal **divergence**
- One or two dimensional optics, bent – and channel – cut crystals and pyrolytic graphite



Available beam modules

Sources

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

Over 400 X-ray Beam Modules Sold

www.rigakuoptics.com

www.rigaku.com


Rigaku

ANLAGE ZU PUNKT 6.5:

BERICHT DER KASSENPRÜFER

Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2018 wurde von Ullrich Pietsch (Universität Siegen) und von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) am 11. und 12. März 2019 durchgeführt.

Der Schatzmeister der DGK, Herr Christian Lehmann, hatte dafür die zur Prüfung erforderlichen Unterlagen, d. h. sämtliche Kontoauszüge mit Buchungsbelegen und Rechnungsabschlüssen aller vorhandenen Unterkonten, die Auflistung der Bankeinzüge der Mitgliederbeiträge, eine detaillierte Aufstellung der Umsätze aller Unterkonten und eine Gesamtbilanz, in elektronischer Form vorgelegt.

Die Prüfung der uns vorgelegten Belege und Übersichten hat die Stimmigkeit der Aufstellung und Bilanzen in der Buchführung ergeben. Die anhand der Bankauszüge geprüften Kontostände zu Jahresbeginn und Jahresende stimmen mit den von Herrn Lehmann für das Geschäftsjahr 2018 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

Ende 2018 erfuhr das Kapital der DGK einen Zuwachs von mehr als 4.000 € und beträgt nun etwas mehr als 45.000 €. In Anbetracht der Höhe des Guthabens und der positiven Bilanzen befürworten wir ausdrücklich die Bildung einer zweckgebundenen Rücklage zur Unterstützung der deutschen Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr2029.

Alexandra Friedrich (Würzburg) und Ullrich Pietsch (Siegen)

ANLAGE ZU PUNKT 6.6:

BERICHT DES VERTRETERS DER DMG IM VORSTAND DER DGK

Zwei DMG-Vorstandssitzungen erfolgten am 26.09.2018 im Rahmen der Jahrestagung GEOBONN 2018 (als Gemeinschaftstagung der DMG/DGGV/PalGes und des Dachverbands GVGeo) an der Universität Bonn (Vorsitz Reiner Klemm, stellv. Vorsitzender R. X. Fischer) sowie am 21./22.02.2019 im Physikzentrum, Bad Honnef (Vorsitzender R. X. Fischer).

Erfolgte Ehrungen und Preisverleihungen der DMG auf der GEOBONN 2018:

- Abraham-Gottlob-Werner Medaille in Silber: Ulrich Bismayer, Universität Hamburg
- Goldschmidt Preis (2018): Oliver Plümper, Universität Utrecht, Niederlande
- Beate-Mocek-Preis: Jaake Lynn Fiege, Universität Hannover und *American Museum of National History*, New York, USA
- Paul-Ramdohr-Preis für 2017: Jessica Starke, Tübingen

Die Professoren Walter Maresch (Bochum) und Klaus Heide (Jena) wurden auf der Tagung zu Ehrenmitgliedern der DMG ernannt.

Die Kandidatenvorschläge zur DFG-Fachkollegienwahl 2019 erfolgten in Abstimmung mit der DGK. Die Umbenennung des FK 316-01 in „Mineralogie, Petrologie und Geochemie“ wird kritisch gesehen und sollte geändert werden.

Die 2019 angebotenen acht DMG-Doktorandenkurse, sowie ein Online-Kurs finden sich auf der DMG Homepage: <https://www.dmg-home.org/aktuelles/doktorandenkurse/>

Nächste Tagungen:

Die DMG 2019 (GeoMünster) findet gemeinsam mit der DGGV vom 22. bis 25. Sept. 2019 in Münster statt (Organisation H. Bahlburg): www.geomuenster2019.de. Michael Fischer und Thomas Malcherek organisieren dort eine Session „Structural properties of minerals and materials“. Deadline für die Einreichung von Beiträgen ist der 15.05.2019.

2020 wird die DMG ihre Jahrestagung vom 06. bis 10.09.2020 im Rahmen der emc2020 in Krakau, Polen durchführen.

Information: http://www.elementsmagazine.org/archives/e14_2/e14_2_soc_EMU.pdf

Für 2021 ist eine gemeinsame Tagung mit der ÖMG in Wien in der Diskussion.

Ulrich Bismayer (Hamburg) und Jürgen Schreuer (Bochum)

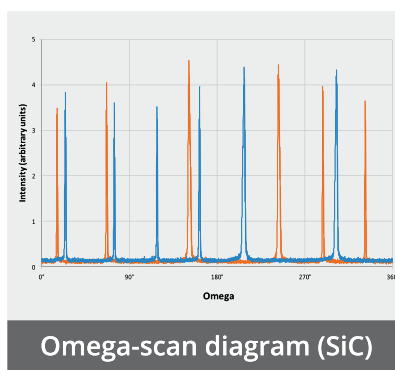


Omega/Theta X-ray diffractometer

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°



ORDNUNG ZUR ORGANISATION UND DURCHFÜHRUNG DER JAHRESTAGUNGEN DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

FASSUNG VOM 26. MÄRZ 2019

BESCHLOSSEN AUF DER MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DGK IN LEIPZIG

1. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie führt in der Regel jährlich eine Jahrestagung durch.
2. Die Jahrestagung dient dem wissenschaftlichen Erfahrungs- und Gedankenaustausch sowie der Weiterbildung und erfüllt die wissenschaftlichen und gemeinnützigen Zwecke nach § 2 der Satzung im weitesten Sinne.
3. Der Vorstand beauftragt jeweils ein oder mehrere Mitglieder der DGK, die Jahrestagung eigenverantwortlich zu veranstalten (im weiteren Tagungsleitung genannt).
4. Die Tagungsleitung stellt zu ihrer Unterstützung ein Programm- und Organisationskomitee zusammen. Der/die stellvertretende Vorsitzende der DGK ist Mitglied dieses Komitees.
5. Die Tagungsleitung gibt Tagungsort und -datum rechtzeitig bekannt und ruft zum Einreichen wissenschaftlicher Beiträge auf.
6. Grundsätzlich besteht die Jahrestagung aus folgenden Teilen:
 - a. Wissenschaftliches Programm: Plenarvorträge, freie Vorträge, Postersitzungen sowie eventuell ergänzende Formate
 - b. Max-von-Laue-Preisvortrag
 - c. DGK-Ehrenabend
 - d. Welcome Reception
 - e. Gesellschaftsabend
 - f. Mitgliederversammlung und sonstige Sitzungen
 - g. Industrieausstellung
 - h. Workshops und Industriesymposien (Entscheidung obliegt Tagungsleitung)
7. Inhaltliche Schwerpunkte der Jahrestagung werden von der Tagungsleitung unter Berücksichtigung der internationalen wissenschaftlichen Tendenzen der Kristallographie und verwandter Fachgebiete in Abstimmung mit dem Vorstand festgelegt. Dabei ist darauf zu achten, dass alle in der DGK vertretenen Richtungen der Kristallographie angemessen vertreten sind. Die Arbeitskreise sind wie in der Arbeitskreisordnung vorgesehen zu beteiligen.
8. Die Beiträge sollen von der Tagungsleitung oder fachlich kompetenten Vertretern bewertet sowie begutachtet und in die wissenschaftlichen Schwerpunkte der Tagung als Vorträge oder Poster eingeordnet werden.

9. Die wissenschaftlichen Beiträge der Teilnehmenden sind von der Tagungsleitung in geeigneter und unmittelbar lesbarer Form zitierfähig zu publizieren (z. B. Supplement der Zeitschrift für Kristallographie) und allen Teilnehmenden rechtzeitig zur Nutzung auf der Jahrestagung zur Verfügung zu stellen. Die Autoren sind aufgefordert, präsentierte Strukturen in geeigneten Datenbanken zu hinterlegen.
10. Die Jahrestagung finanziert sich anhand optimaler Wirtschaftsführung selbst durch:
 - Erhebung eines Beitrags, den alle Teilnehmenden zu zahlen haben. Mitglieder der DGK mit vollen Rechten bezahlen einen um den jeweiligen Jahresbeitrag verminderten Beitrag.
 - Einnahmen aus auf der Jahrestagung durchzuführenden fachnahen Ausstellungen, Werbung u. Ä.
 - Zuschüsse und Zuwendungen Dritter, zu denen die Tagesleitung anregen soll.Kosten, die der unmittelbaren Verwirklichung des Vereinszwecks der DGK im Rahmen der Jahrestagung dienen, können von der DGK getragen werden.
Über die Höhe der Tagungsbeiträge ist mit dem Vorstand Einvernehmen zu erzielen.
11. Die Tagungsleitung kann Dritte – insbesondere unter dem Aspekt der Kostenminimierung – beauftragen, Aufgaben zur Organisation und Durchführung der Jahrestagung zu übernehmen. Vertragliche Vereinbarungen dazu bedürfen der Genehmigung des Vorstands.
12. Arbeitskreise der DGK können ihre Veranstaltungen – auf Antrag bei der Tagungsleitung – während der Jahrestagung durchführen, wobei die Tagungsleitung ihnen je nach den Gegebenheiten Räumlichkeiten und Technik bereitstellt.
13. Ein barrierefreier und ungehinderter Zugang zu allen für die Tagung genutzten Räumlichkeiten ist sicherzustellen.
14. Die Tagungsleitung hält Räumlichkeiten entsprechend dem Zweck zur Durchführung der Mitgliederversammlung sowie für Ehrungen und Preisvergaben vor.
15. Der Gesellschaftsabend ist ein Bestandteil der Jahrestagung und sollte der gesellschaftliche Höhepunkt sein.
16. Die Gestaltung des Ehrenabends obliegt dem Vorstand, der dabei in organisatorischen Fragen von der Tagungsleitung unterstützt wird.
17. Industriesymposien sind von einem Unternehmen unterstützte Veranstaltungen, die nicht von der Programmkommission, sondern von dem Unternehmen koordiniert und inhaltlich ausgestaltet wird. Die Tagungsleitung hat das Recht, die Programme von den Unternehmen abzufordern und diese inhaltlich zu prüfen.
18. Die Tagungsleitung ist dem Vorstand bezüglich wissenschaftlichen Inhalts, Organisation und Durchführung der Jahrestagung sowie hinsichtlich der finanziellen Mittel rechenschaftspflichtig.



seit 1997

RÖNTGENLABOR Dr. M. Ermrich

Röntgendiffraktometrie - Röntgenfluoreszenzanalyse

Am Kandelborn 7, D - 64354 Reinheim / b. Darmstadt

Email: roentgenlabor-dr.ermrich@t-online.de

<http://www.roentgenlabor-ermrich.de>

Fax: (+49) 6162 - 939 824

Tel.: (+49) 6162 - 837 56

Auftragsanalytik / Forschung / Projektarbeit

Reflexion / Transmission / Hochtemperatur / dünne Schichten ...

Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor

Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

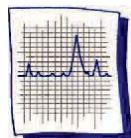
Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

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

sowie **problembezogene Seminare in Ihrem Haus !**

Ansprechpartner und Vertrieb des Rietveld- Programms

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



Das Werkzeug zur quantitativen Phasenanalyse im Labor.

Bestimmung des amorphen Anteils u.a.

Alle Datenformate.

Si- Phase

Einbindung von CIF- Files oder eigenen Strukturdaten

Initiierung und Teilnahme an Round Robin bzw. Laborvergleichen

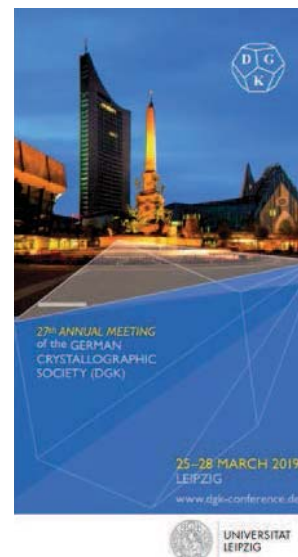
Handbuch: M. Ermrich / D. Opper

„XRD for the analyst“ (ISBN 978-90-809086-0-4)

„Einführung in die Röntgenbeugungsanalyse“

RÜCKBLICK ZUR 27. JAHRESTAGUNG DER DGK IN LEIPZIG

Vom 25. bis 28. März fand die diesjährige DGK-Jahrestagung an der Universität Leipzig statt. Die 368 Teilnehmer, davon 99 Studierende, reisten aus 19 Ländern an, um sich über die neuesten Forschungsergebnisse auszutauschen. 33 Aussteller aus der Industrie stellten ihre Angebote im Bereich der Kristallographie durch Informationsstände, Vorträge und Mittags-Symposien vor und rundeten so das Informationsangebot ab. Zu dieser Tagung haben Norbert Sträter, Oliver Oeckler und Holger Kohlmann von der Fakultät für Chemie und Mineralogie der Universität Leipzig eingeladen. Leipzig war damit zum zweiten Mal Gastgeber, denn vor genau 20 Jahren hatte Klaus Bente die erste DGK-Tagung in Ostdeutschland organisiert. Beide Tagungen fanden im Hörsaalgebäude am Augustusplatz statt, 1999 im maroden, mittlerweile abgerissenen Altbau, 2019 im modernen Neubau, der an dessen Stelle getreten ist.



In sechs Plenarvorträgen international renommierter Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler wurden die neuesten Entwicklungen der Kristallographie vorgestellt und moderne apparative Entwicklungen beleuchtet, die für Kristallographen aus verschiedenen Fachgebieten gleichermaßen interessant waren. Die weiteste Anreise hatte Ray Withers auf sich genommen, der aus Canberra in Australien nach Leipzig kam, um über diffuse Streuung zu berichten. In weiteren Plenarvorträgen berichteten Stefan Zaefferer (Düsseldorf) über Methoden der Elektronenbeugung in der Rasterelektronenmikroskopie, Arwen Pearson (Hamburg) über zeitaufgelöste Strukturbilogie, Harald Reichert (Grenoble) über die Bedeutung der nächsten Generation von Synchrotron-Strahlungsquellen für die Kristallographie, Xiaodong Zou (Stockholm) über *Ab-initio*-Kristallstrukturanalyse mittels Elektronenbeugung und Holger Stark (Göttingen) über die Symbiose von Röntgenkristallographie und Kryo-Elektronenmikroskopie.

Die 20 Mikrosymposien, welche die gesamte Breite der Kristallographie präsentierten, wurden in bewährter Weise durch die DGK-Arbeitskreise organisiert. Es wurden 138 Vorträge, davon 34 *Lightning Talks* zu Posterbeiträgen (organisiert durch die „Jungen Kristallographen“) und 127 Poster präsentiert. Die Tagungssprache war durchgehend Englisch.

Am ersten Abend wurde eine Reihe von Wissenschaftspreisen verliehen, vom Laue-Preis für Nachwuchswissenschaftler, der an Mirjam Zobel ging, über die Kleber-Gedenkmünze für Michael Ruck bis zur Carl-Hermann-Medaille, die das Lebenswerk von Georg E. Schulz honorierte. Der erst zum zweiten Mal verliehene Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie ging an Sebastian Bette. Die Preisverleihung fand im Rahmen eines Ehrenabends in der feierlichen Atmosphäre des neuen Paulinums statt.

Auch soziale Aspekte kamen nicht zu kurz. Am ersten Abend beim *Get-Together* im Foyer des Paulinums wurden bestehende Kontakte gepflegt und neue geknüpft. Die Gruppe der „Jungen Kristallographen“ veranstaltete eigene Mikrosymposien und ein Mittagstreffen am letzten Tag. Sicherlich war auch das Konferenzdinner im traditionsreichen Auerbachs Keller für viele Teilnehmer ein Highlight ihres Aufenthalts in Leipzig.

Die Tagung wurde wie in den vergangenen Jahren durch die Firma Conventus organisiert. Finanzielle Unterstützung gab es von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und den teilnehmenden Firmen, welche eine umfangreiche Industrieausstellung gestalteten. Dies wurde ergänzt durch zwei Lunch-Symposien der Firmen Rigaku und ThermoFisher. Insgesamt zeigte sich die Kristallographie bei der Jahrestagung in Leipzig in ihrer vollen Breite, wobei es besonders erfreulich war, dass Teilnehmer (275 männlich und 93 weiblich) aus allen Altersklassen vertreten waren, vom wissenschaftlichen Nachwuchs über erfahrene Wissenschaftler zu jung gebliebenen ehemals Aktiven.

Oliver Oeckler, Holger Kohlmann und Norbert Sträter, Leipzig



Norbert Sträter, Holger Kohlmann und Oliver Oeckler bei der Eröffnungsveranstaltung (links). Ray Withers bei seinem Plenarvortrag über diffuse Streuung (rechts).



Die weiteren Plenarredner: Stefan Zaefferer, Arwen Pearson, Harald Reichert, Xiaodong Zou und Holger Stark.



Ehrenabend im Paulinum (links) und Get-Together im Foyer des Augusteums (rechts).



Wissenschaftliche Diskussionen vor DDR-Auftragskunst „Arbeiterklasse und Intelligenz“.



DGK-Vorstandssitzung: Ralf Ficner, Daniel Többens, Ute Kolb, Susan Schorr und Christian Lehmann.



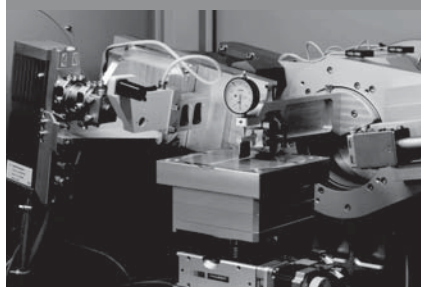
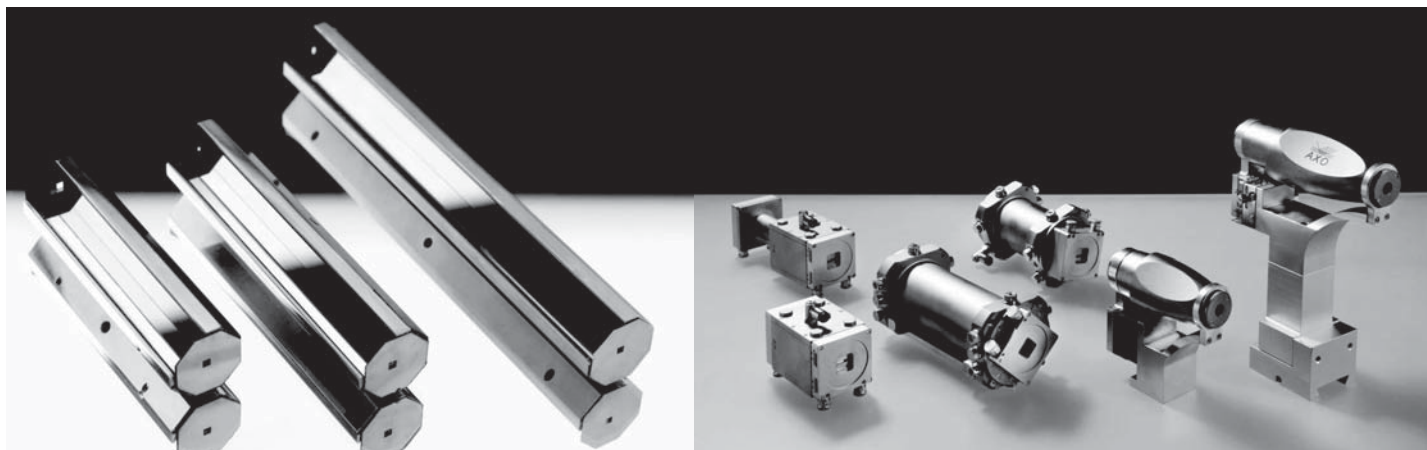
Postersession: Holger Kohlmann (mit grünem Rucksack) auf der Suche nach preiswürdigen Postern.



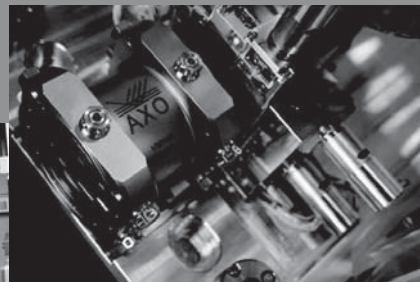
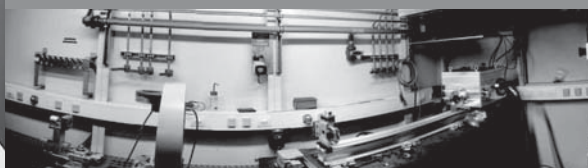
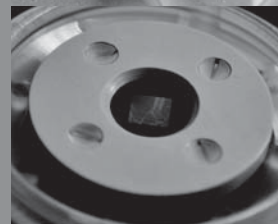
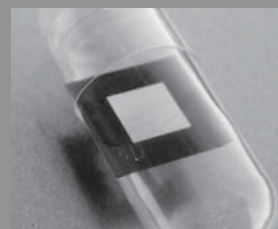
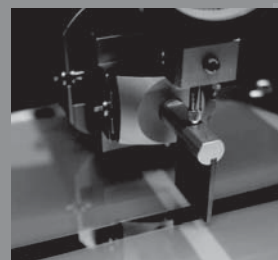
APPLIED X - RAY OPTICS

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

BERICHTE DER STIPENDIATEN ZUR ECM31 IN OVIEDO



Xiaofei Yin, Ludwig-Maximilians-Universität München

From 22 to 27 August 2018, the ECM31 was held in the beautiful Spanish city Oviedo, which is located in the heart of Asturias and famous of its natural sceneries. The meeting was an effervescent and intensive scientific congress focussed on the current frontiers of crystallography. 48 microsymbposia, 2 plenary lectures and 16 keynote lectures were organized over the 4 days. A statement of gender balance was announced by the organization committee aiming to promote the involvement of women in crystallography at all stages of their career. On-site children care and corresponding facilities and activities also made ECM31 a child-friendly conference.



The plenary lecture given by Dr. Lukáš Palatinus highlighted the electron-based techniques for the prospective development of crystallographic research, especially in the field of atomic-level chemical analysis and structures reconstruction of biologically relevant molecular systems. The keynote speeches given by Prof. Guillermo Montoya and Prof. Matthias Bochtler about genome editing and DNA binding modification were very interesting to me. The impressive presentation of Kirsten Marie Jensen demonstrated the unique method they had developed to understand the nucleation mechanisms. The combination of synchrotron X-ray total scattering and Pair Distribution Function analysis allowed the researchers to follow nanoparticle nucleation and growth *in situ*, which could be a fantastic method to investigate the pre-nucleation clusters in biomineralization field as it is an important issue to my own research interests.

I was very happy to have the opportunity to present my work about the calcite aggregates formed in bacterial EPS-agarose hydrogel systems in the Microsymposia 17 – Biominerals and bioinspired materials on the 25th. It was a further investigation of the project I had presented in ECM30 Basel 2016. In the current study, we used more natural growing media and considered the perspective of extracellular polymeric substances applications for a better mimicking of biological composites materials. The discussion after the presentation brought me some further possibility of characterization and new ideas about the interpretation of my preliminary results.

I really appreciate the financial support from DGK to support my travel to Oviedo and participation in this prestigious crystallographic meeting.

Marius Kremer, RWTH Aachen

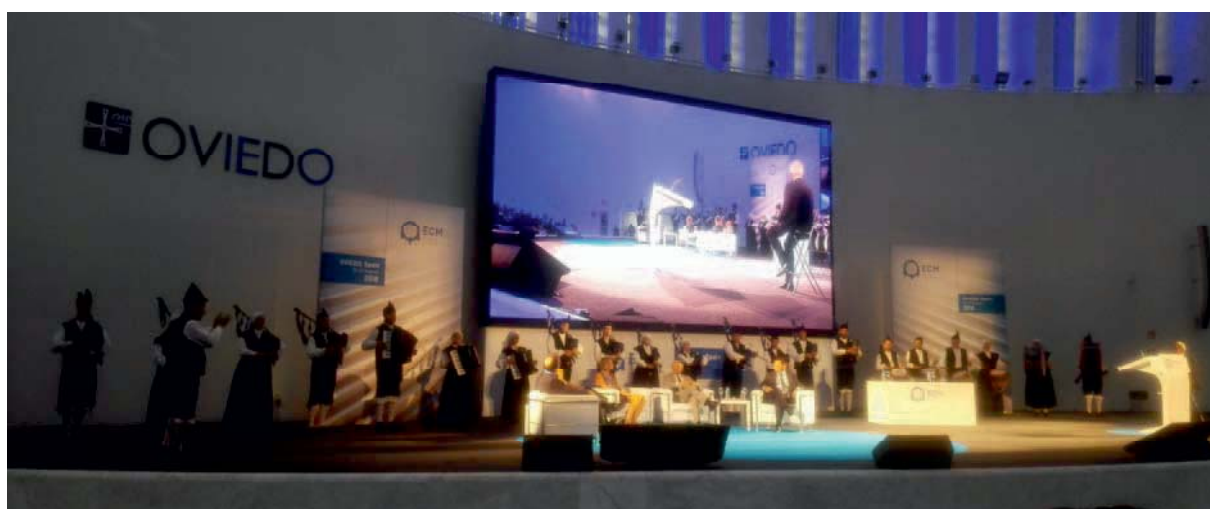
Vom 21. bis zum 27.08.2018 fand die 31. ECM-Tagung in Oviedo, Spanien, statt. Dank der großzügigen finanziellen Unterstützung der DGK konnte ich an der Konferenz teilnehmen. Da es sich hierbei um meine erste internationale Konferenz handelte, war ich begeistert meine Ergebnisse in Form meines Posters: „Copper based Bio-MOFs: Challenges and possibilities in crystal engineering“ zu präsentieren. Obwohl das Wetter tageweise eher unerwartet ausfiel, kann man die Konferenz nur als vollen Erfolg bezeichnen. *El Palacio de Exposiciones y Congresos* öffnete seine Türen für fünf Tage für uns und ermöglichte uns den Austausch über alle Aspekte der Kristallographie, Synthese, Analyse und Instrumentierung mit Kollegen aus der ganzen Welt. Mit 2 Plenarvorträgen, 16 *Keynote Lectures* und insgesamt 48 Mikrosymposien mit je 5 Vorträgen kam keine Langeweile auf. Im Zuge der insgesamt vier Postersessions konnte man die Forschung von Kollegen begutachten und die eigenen Ergebnisse diskutieren. Dieses wissenschaftliche Programm war eingebettet in ein hervorragendes Rahmenprogramm, das unter anderem aus einem Konzert des Symphonieorchesters Asturiens (OSPA), einem Konferenzdinner und einem „Young Crystallographers Mixer“ bestand.

Die Gastfreundschaft und Offenheit unserer spanischen Gastgeber war dabei durchweg zu spüren. Die Konferenz war speziell für Familien ausgelegt, und es gab auf dem Gelände sogar ein dediziertes Kinderzimmer, in dem die Kleinen betreut und bespaßt wurden.

Bei hervorragendem Essen, viel Kaffee und natürlich der lokalen Spezialität, Cider, der prinzipiell aus mindestens 2 Meter Entfernung in das Glas gegossen wurde, fühlte man sich während der ganzen Konferenz gut umsorgt und gefüttert.

Ich persönlich habe vor allem die Programmpunkte genossen, die weniger mit meinem eigenen Thema zu tun hatten, sondern mir neue Aspekte der Kristallographie nähergebracht haben. So habe ich zum Beispiel voller Begeisterung an den Mikrosymposien „Training computational method developers“ und „Crystallization for small and large molecules“ teilgenommen.

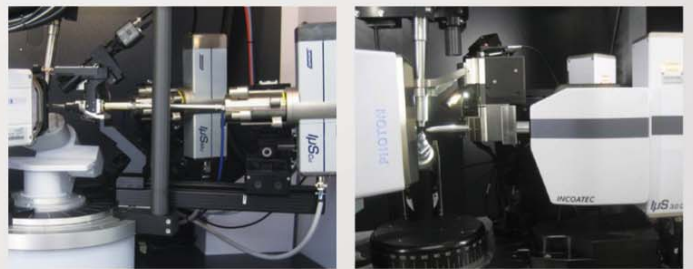
Insgesamt war die ECM31 eine sehr informative, spannende und unterhaltsame Konferenz. Ich habe viele Kontakte geknüpft, Pläne gemacht und Erfahrungen und Ergebnisse mit meinen Kollegen aus Europa und der ganzen Welt geteilt. Außerdem wurde ich zum Schatzmeister der Europäischen Jungkristallographen gewählt, und freue mich auf die Herausforderungen, die mit diesem Ehrenamt einhergehen. Ich möchte mich hiermit nochmals für die Unterstützung der DGK bedanken, ohne die das alles nicht möglich gewesen wäre.



Thank you to our customers for

1000

Incoatec Microfocus Sources $1\mu\text{S}$



The unique microfocus X-ray source for your
diffraction experiments

BRIGHTEN UP YOUR LAB

WAHLEN ZU DEN FACHKOLLEGIEN DER DFG

In diesem Jahr stehen wieder die Wahlen zu den Fachkollegien der Deutschen Forschungsgemeinschaft an. Diese werden als Online-Wahl diesen Herbst, voraussichtlich in der Zeit vom 21.10.2019 bis 18.11.2019, durchgeführt.

Bitte nehmen Sie ihr Wahlrecht war!

Die Bedeutung der Fachkollegien sollte nicht unterschätzt werden. Sie sind im Gegensatz zu manch anderem Gremium mit wohlklingendem Titel keine bloße Quasselbude: Die Fachkollegien der DFG bewerten die Anträge auf finanzielle Förderung von Forschungsvorhaben. Darüber hinaus kontrollieren sie die Wahrung einheitlicher Maßstäbe bei der Begutachtung und beraten bei der Weiterentwicklung und Ausgestaltung der Förderprogramme der DFG. Hierzu gehört auch die Festlegung der jeweils zukünftigen Fächerstruktur der Fachkollegien.

Der Senat der DFG hat am 15. März 2018 die Fächerstruktur für die Fachkollegienwahl 2019 und die nächste Amtsperiode der Fachkollegien von 2020 bis 2023 verabschiedet. Er hat den Zuschnitt der Fachkollegien und ihrer Fächer überprüft und Änderungen oder Ergänzungen vorgenommen, um die „Angemessenheit und Aktualität des Zuschnitts“ zu gewährleisten. (Die Darstellung in diesem Absatz stammt von der Webseite der DFG. Die Anführungszeichen stammen von mir.) Hierzu sammelte die DFG zunächst Anregungen aus der Wissenschaft und konsultierte alle an der vorangegangenen Fachkollegienwahl beteiligten wissenschaftlichen Fachgesellschaften (darunter natürlich auch die DGK) und Fakultätentage. Darüber hinaus rief sie öffentlich über eine „Information für die Wissenschaft“ dazu auf, Anregungen zur Anpassung der Fächerstruktur zu geben. Alle Anregungen aus der Wissenschaft wurden in den fachlich betroffenen, derzeit amtierenden Fachkollegien der DFG diskutiert und kommentiert und dann dem Senat der DFG zur Diskussion und abschließenden Entscheidung vorgelegt.

Die Änderungen der Fächerstruktur spiegeln zwar die zunehmende Wichtigkeit kristallographischer Methoden wieder, können aber vom Standpunkt eines Kristallographen aus weder als angemessen noch als aktuell gesehen werden.

Wir als DGK hatten in 2015 Vorschlagsrecht für Kandidaten zu folgenden Fächern:

- Fachkollegium Grundlagen der Biologie und Medizin:
201-04 Strukturbioogie
- Fachkollegium Physik der kondensierten Materie:
307-01 Experimentelle Physik der kondensierten Materie
- Fachkollegium Geochemie, Mineralogie und Kristallographie:
316-01 Organische und Anorganische Geochemie, Biogeochemie, Mineralogie, Petrologie, Kristallographie, Lagerstättenkunde
- Fachkollegium Materialwissenschaft:
406-04 Strukturierung und Funktionalisierung

Für die aktuelle Fächerliste haben wir das Vorschlagsrecht für sechs Fächer beantragt und erhalten:

- Fachkollegium Grundlagen der Biologie und Medizin:
201-04 Strukturbioogie
- Fachkollegium Physik der kondensierten Materie:
307-01 Experimentelle Physik der kondensierten Materie
- Fachkollegium Mineralogie, Petrologie und Geochemie:
316-01 Mineralogie, Petrologie und Geochemie
- Fachkollegium Materialwissenschaft:
406-03 Thermodynamik und Kinetik sowie Eigenschaften der Phasen und Gefüge von Werkstoffen
- Fachkollegium Molekülchemie:
321-01 Anorganische Molekülchemie – Synthese, Charakterisierung
- Fachkollegium Chemische Festkörper- und Oberflächenforschung:
322-01 Festkörper- und Oberflächenchemie, Materialsynthese

In dieser Liste taucht „Kristallographie“ nicht mehr auf. Tatsächlich findet sich unser Fach nirgendwo in der aktuellen Liste der Fächer der DFG! Stattdessen wird die Kristallographie unter chemischen, physikalischen, materialwissenschaftlichen und geowissenschaftlichen Fächern verteilt und dadurch unsichtbar gemacht. Dass dies für die Zukunft unseres Faches nicht gut sein kann, braucht wohl nicht extra erwähnt werden. Damit dies beim nächsten Neuzuschnitt der Fächer geändert werden kann, bedarf es aber entsprechender Stimmen in den beratenden fachlich betroffenen Fachkollegien der DFG. Und hierfür müssen die Gremien Mitglieder haben, die nicht nur kristallographische Methoden verwenden, sondern Kristallographie betreiben. Was in der Regel heißen dürfte: Mitglieder der DGK.

Die folgenden Kandidaten wurden entweder von der DGK vorgeschlagen oder sind Mitglieder der DGK, die unabhängig von dritter Seite vorgeschlagen wurden:

- 201-04 Strukturbioogie:
Milton Stubbs, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Markus Wahl, Freie Universität Berlin
Oliver Einsle, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Carola Hunte, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Ralf Ficner, Georg-August-Universität Göttingen
Norbert Sträter, Universität Leipzig
- 307-01 Experimentelle Physik der kondensierten Materie:
Claudia Felser, MPI für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden
- 316-01 Mineralogie, Petrologie und Geochemie:
Susan Schorr, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Gerhard Heide, Technische Universität Bergakademie Freiberg
- 321-01 Anorganische Molekülchemie – Synthese, Charakterisierung:
Dietmar Stalke, Georg-August-Universität Göttingen

- 322-01 Festkörper- und Oberflächenchemie, Materialsynthese:
Oliver Oeckler, Universität Leipzig
Barbara Albert, Technische Universität Darmstadt
Klaus Müller-Buschbaum, Julius-Maximilians-Universität Würzburg
Caroline Röhr, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Für das Fachkollegium Materialwissenschaft sind leider keine Vorschläge eingegangen.

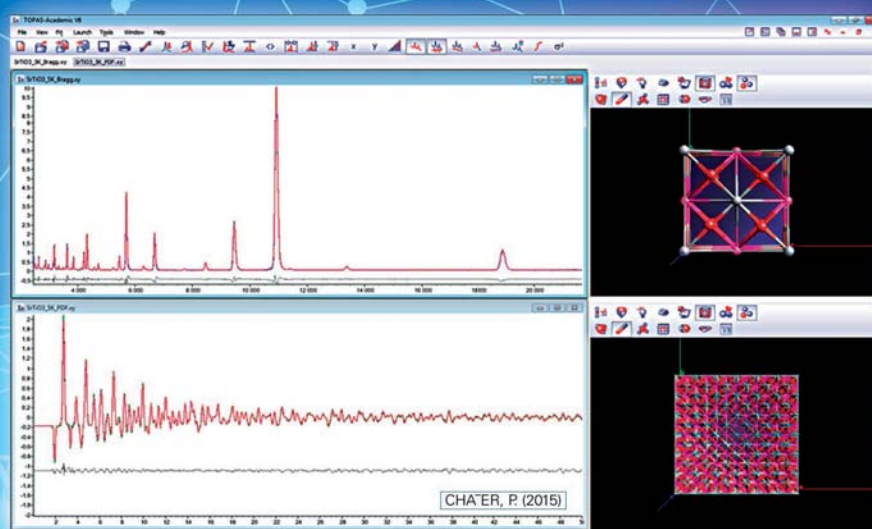
Zu Beginn der Wahl werden wir alle Mitglieder per Rundmail informieren.

Bitte nehmen Sie ihr Wahlrecht wahr!

Daniel Többens, Berlin

TOPAS V6

(Joint) Bragg and PDF Refinements at Lightning Speed



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

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

VERANTWORTLICHE FÜR DIE ÖFFENTLICHKEITSARBEIT GESUCHT

Seit einiger Zeit liegt das Amt des Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit in unserer Gesellschaft brach.

Die Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit sollen laut Satzung die Mitglieder der DGK sowie die fachnaher und assoziierter Gesellschaften, aber auch die allgemeine Öffentlichkeit aktuell über alle Veranstaltungen der DGK einschließlich die der Arbeitskreise sowie über allgemein interessierende Ereignisse aus Forschung und Lehre der Kristallographie, über Möglichkeiten der Vergabe von Preisen und Ehrungen der DGK und die Preisträger informieren.

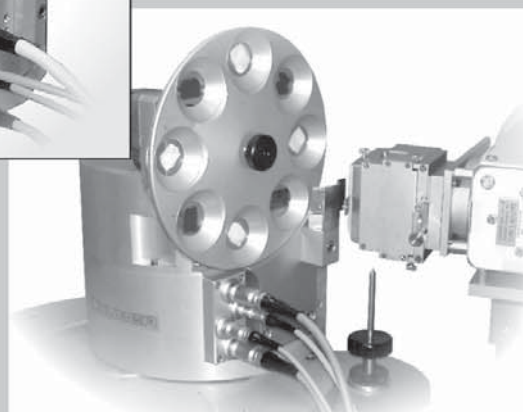
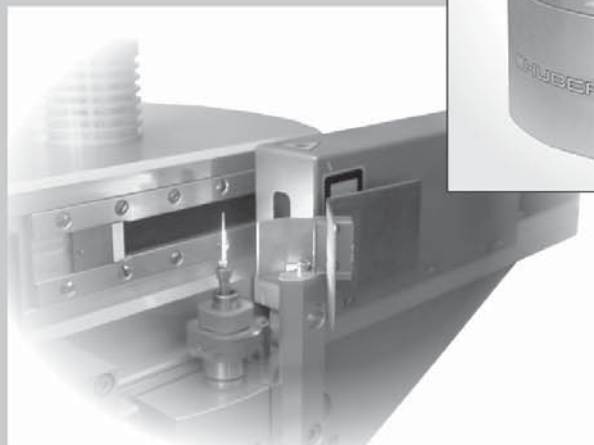
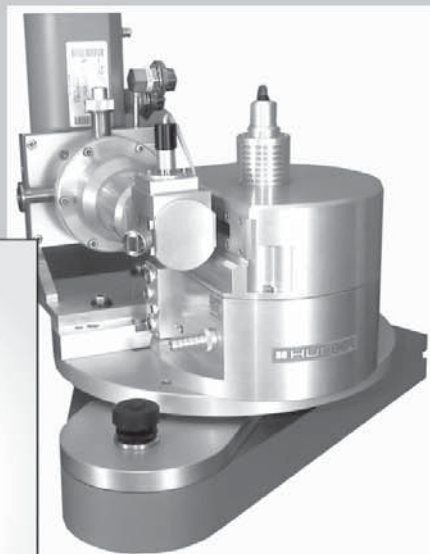
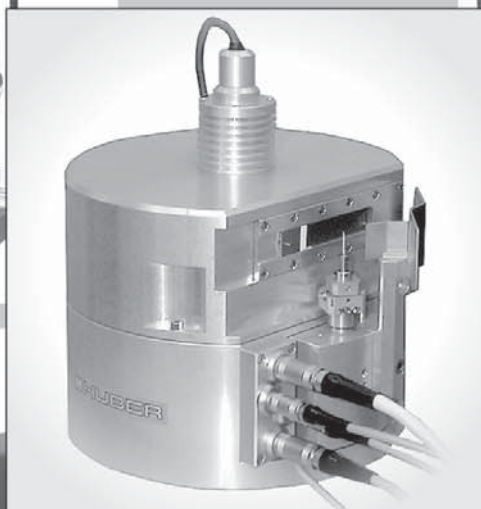
Offensichtlich ist diese Aufgabe sowohl für die Kernaufgabe der DGK, die Förderung der kristallographischen Wissenschaften, als auch für die Werbung neuer Mitglieder von höchster Wichtigkeit. Dies gilt umso mehr, als Kristallographie häufig nicht mehr in dedizierten kristallographischen Instituten, sondern als Nebenfach im Rahmen anderer Fächer gelehrt wird.

Um diesen bedauerlichen Zustand möglichst bald abzustellen, bittet der Vorstand darum, dass sich interessierte Mitglieder melden.

Daniel Többens, Berlin

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry



HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

- ☑ A factor of more than 100 faster compared to conventional step scan
- ☑ X-ray powder diffraction in 45° (asymmetric) transmission, 0° to 100° 2-theta
- ☑ Bulk samples in 17° (fixed grazing incidence) reflection, 50° to 150° 2-theta
- ☑ Plane foil or capillary samples. 8-fold sample changer for plane foil samples
- ☑ Vertical mount for liquids, 0° to 20° (adjustable grazing incidence) reflection
- ☑ Focussing monochromatic radiation, $K\alpha_1$ stripping not required
- ☑ Range of Bragg angles 100° 2-theta, 20001 steps @ 0.005°
- ☑ Laser scans signals @ 16 Bit A/D res. Linear dynamic range up to 200,000 counts
- ☑ Creates all common ASCII file types ready for data evaluation like Rietveld-Refinement
- ☑ Low-temperature attachment: Closed cycle He-refrigerator, 10 to 320 K
- ☑ Hi-temperature attachment: Diode laser heater, 300 to 1800 K
- ☑ Hi-pressure attachment: Diamond anvil cell, upto 70 GPa

HUBER
X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

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

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

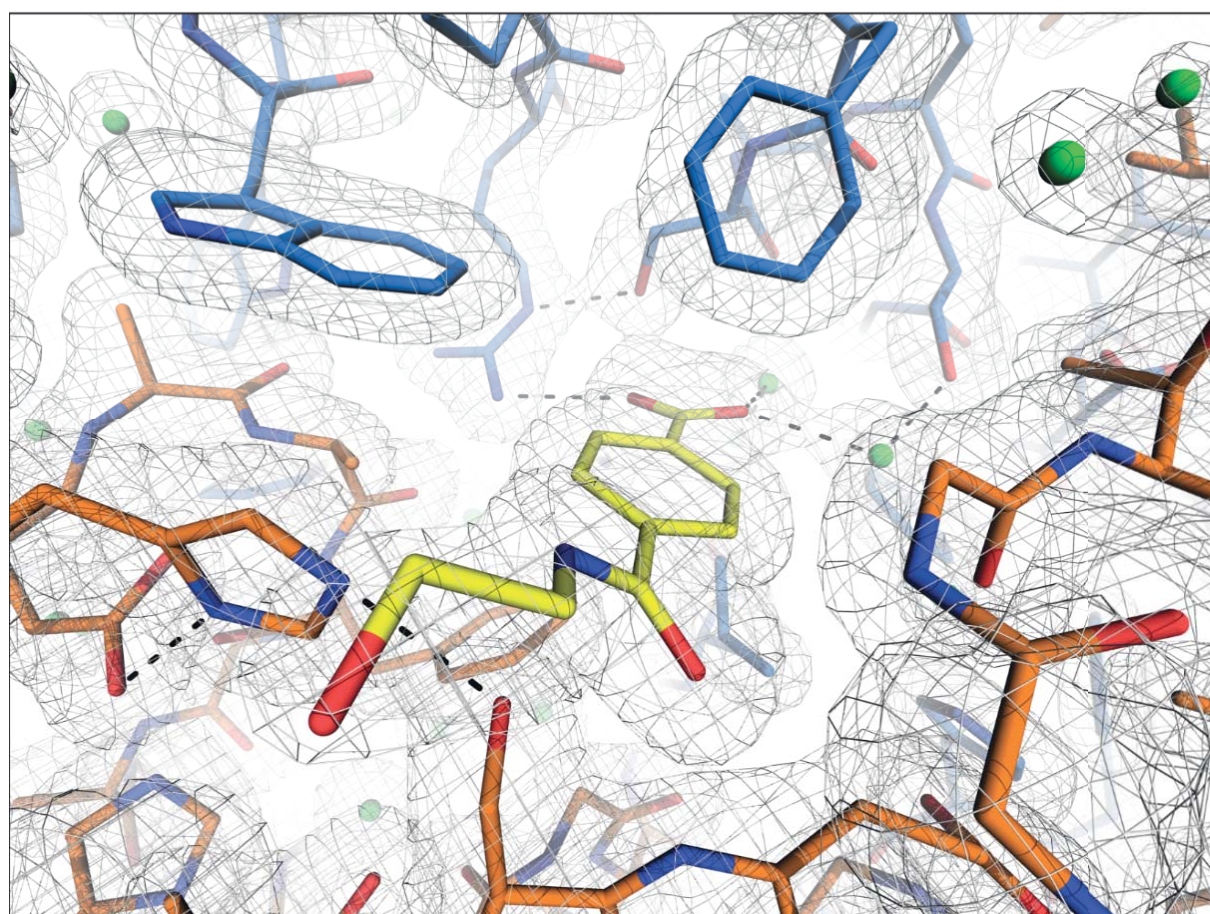
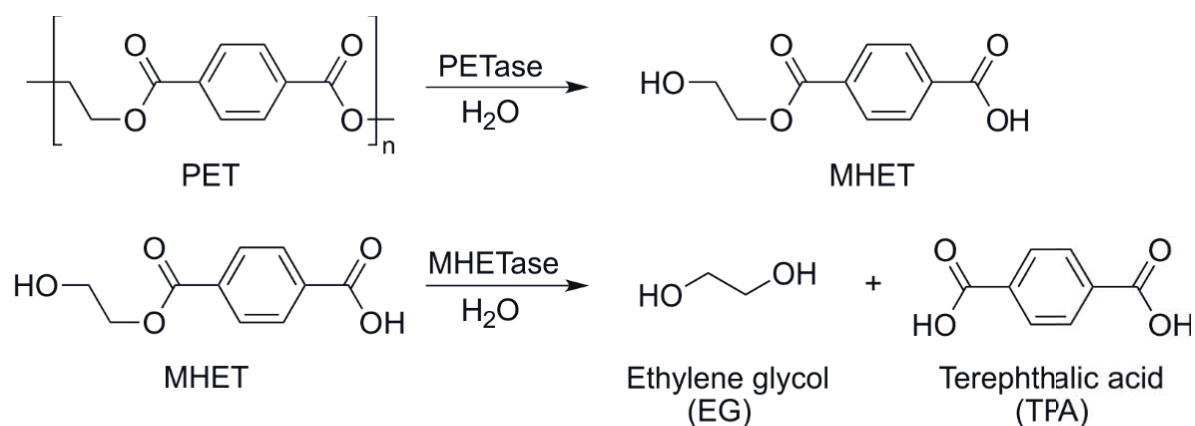
KRISTALLOGRAPHIE UND UMWELTSCHUTZ – BESTIMMUNG DER KRISTALLSTRUKTUR DES PLASTIKABBAUENDEN *IDEONELLA* *SAKAIENSIS* ENZYMS MHETASE IM KOMPLEX MIT EINEM NICHT- HYDROLYSIERBAREN LIGANDEN

Kunststoffe in der Umwelt stellen die Menschheit vor immer größere Probleme. Aufgrund ihrer extremen Haltbarkeit gibt es praktisch keine natürlichen Abbaewege. Einer der häufigsten Kunststoffe ist der Polyester Polyethylenterephthalat (PET), der 1941 erstmals von John Rex Whinfield und J. T. Dickson aus Terephthalsäure (TPA) und Ethylenglykol synthetisiert wurde. In Anbetracht seiner einfachen Synthese, Robustheit und Haltbarkeit wurde bald darauf die industrielle Produktion von PET aufgenommen und erreicht 2020 voraussichtlich über 70 Millionen Tonnen¹. Einer der größten Vorteile von PET, seine chemische Stabilität aufgrund der Hydrophobizität von Terephthalsäure, macht einen biologischen Abbau nahezu unmöglich². So führte die unkontrollierte Entsorgung von PET und anderen Plastiksarten global zu einer schwerwiegenden Belastung der Umwelt. Die konventionellen Recyclingverfahren für PET decken nur einen Bruchteil des PET-Abfalls ab und darüber hinaus liefert der Recyclingprozess entweder nur minderwertige Produkte oder hängt von großen Mengen an rohöl-basierten Ausgangsstoffen ab³. Alternativ sind Enzyme (Cutinasen) aus Bakterien und Pilzen bekannt, die prinzipiell PET bei erhöhten Temperaturen zu TPA und Ethylenglykol hydrolysieren können. Allerdings geschieht dies bislang mit nur geringer Aktivität⁴. Vor Kurzem entdeckte ein japanisches Forscherteam das Bakterium *I. sakaiensis*, das auf PET wachsen kann und zwei Hydrolasen, PETase und MHETase, zum spezifischen Abbau des Polymers besitzt. Dabei entsteht durch die Hydrolysereaktion der PETase aus PET MHET (Mono(2-hydroxyethyl)terephthalsäure), welches dann durch die MHETase zu TPA und Ethylenglykol umgesetzt wird. Im Gegensatz zu zuvor charakterisierten Enzymen erfolgt die Hydrolyse von PET durch *I. sakaiensis* bei Umgebungstemperatur, die Katalyse ist weitaus effektiver und selbst hochkristalline PET-Proben können prozessiert werden⁵.

Gegenwärtig sind mehrere Strukturen der PETase, auch im Komplex mit gebundenen Liganden, bekannt (zusammengefasst in Ref. 4). Einem Forscherteam des Helmholtz-Zentrums Berlin und der Universität Greifswald gelang es nun, die Struktur der MHETase isoliert und im Komplex mit einem nicht-hydrolysierbaren Liganden aufzuklären⁶. Auf Grund fehlender geeigneter Homologiemodelle und sehr großen asymmetrischen Einheitszellen der Kristalle (u. a. 10 Moleküle in der Raumgruppe *P1*) gestaltete sich die Strukturlösung äußerst schwierig. Die Faltung der MHETase ähnelt der von Feruloylsterasen – Enzyme, die in der Natur Feruloylsaccharide abbauen. Dabei haben die Substrate der Feruloylsterasen (Ferulasäure) und von MHETase (MHET) eine gemeinsame terminale Carboxylgruppe, die entscheidend für die Substratbindung der MHETase ist. Die struktur-basierte Charakterisierung des aktiven Zentrums der MHETase durch Mutanten und Bindungsstudien mit verschiedenen Substraten lieferten erste vielversprechende Ergebnisse. So konnte die molekulare Basis für die Produktinhibition durch Mutagenese und Aktivitätsmessungen charakterisiert werden und es gelang die Entwicklung von MHETase-Varianten mit erhöhter

Aktivität gegenüber MHET oder sogar einer veränderten Substratspezifität gegenüber BHET (Bis(2-hydroxyethyl)terephthalsäure). Es besteht die Hoffnung, dass mit den neuen Strukturdaten das derzeitige Verständnis von Enzymen, die synthetische Polyester abbauen, erheblich verbessert wird. Dies wird letztendlich zur Erzeugung von PET-abbauenden Enzymen führen, die ein beträchtliches biotechnologisches Potenzial erreichen können und eine Alternative zum konventionellen PET-Recycling darstellen.

Gert Weber und Manfred S. Weiss, Berlin



Referenzen

1. L. Wood: Research and markets,
<http://www.businesswire.com/news/home/20151210005465/en/Research-Markets-Global-Polyethylene-Terephthalate-Market-PET>
2. D. Kint, S. Muñoz-Guerra: A review on the potential biodegradability of poly(ethylene terephthalate), *Polym. Int.* 48 (1999) 346–352
3. J. Hopewell, R. Dvorak, E. Kosior: Plastics recycling: challenges and opportunities, *Philos. Trans. R. Soc. B Biol. Sci.* 364 (2009) 2115–2126
4. I. Taniguchi et al.: Biodegradation of PET: Current Status and Application Aspects, *ACS Catal.* 9 (2019) 4089–4105
5. S. Yoshida et al.: A bacterium that degrades and assimilates poly(ethylene terephthalate), *Science* 351 (2016) 1196–1199
6. G. J. Palm et al.: Structure of the plastic-degrading *Ideonella sakaiensis* MHETase bound to a substrate, *Nat. Commun.* 10 (2019) 1717

NEUER RÖNTGENTOPOGRAPH FÜR DIE INSPEKTION VON HALBLEITER-WAFERN

Im Rahmen einer strategischen Partnerschaft zwischen der Rigaku Europe SE und dem Fraunhofer IISB in Erlangen wurde im Januar 2019 ein neu entwickelter Röntgentopograph für die Charakterisierung von Halbleiter-Wafern in Betrieb genommen. Das Gerät mit dem Namen „XRTmicron“ erlaubt die Bestimmung kristallographischer Defekte wie Versetzungen, Gleitebenen, Korngrenzen, Einschlüssen, Ausscheidungen, Kratzern und auch Spannungen. Es ist sowohl für unprozessierte als auch beschichtete Wafer geeignet.



Blick in das kürzlich installierte XRTmicron am Fraunhofer IISB in Erlangen.

© Kurt Fuchs / Fraunhofer IISB

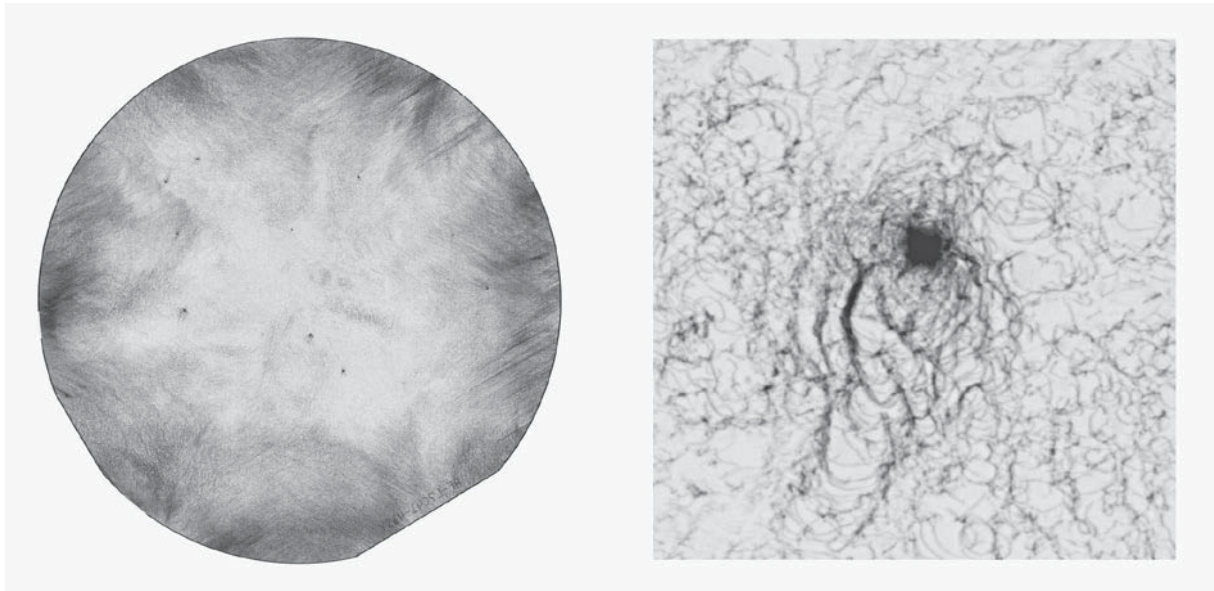
Durch die Nutzung von zwei Röntgenquellen – eine Kupfer-Röhre (40 kV / 30 mA) und eine Molybdän-Röhre (50 kV / 24 mA) – in Kombination mit einem großen Goniometerradius können vielfältige Beugungsbedingungen eingestellt werden. Das System kann damit für verschiedenste Halbleiter (z. B. Si, Ge, Diamant, SiC, GaN, AlN, GaAs, InP, CdTe, CdZnTe), Oxide (z. B. Saphir, Rubin, Granate, Vanadate, Niobate, Quarz) und Halide (z. B. Fluoride, Bromide) genutzt werden.

Das System kann sowohl in Reflexion als auch Transmission arbeiten, um Defekte entweder im Volumen oder nahe der Oberfläche der Waferprobe zu detektieren. Als Detektor können zwei verschiedene XTOP CCD-Kameras eingesetzt werden. Die Standardausführung bietet

eine räumliche Auflösung von 5,4 μm . Die hochauflösende Ausführung erreicht 2,4 μm Auflösung bei einer Einzelbildgröße von $18,0 \times 13,5 \text{ mm}^2$. Die vollständige Messung eines Wafers mit 150 mm Durchmesser dauert etwa eine Stunde. Maximal ist die Aufnahme von 300 mm Wafers möglich.

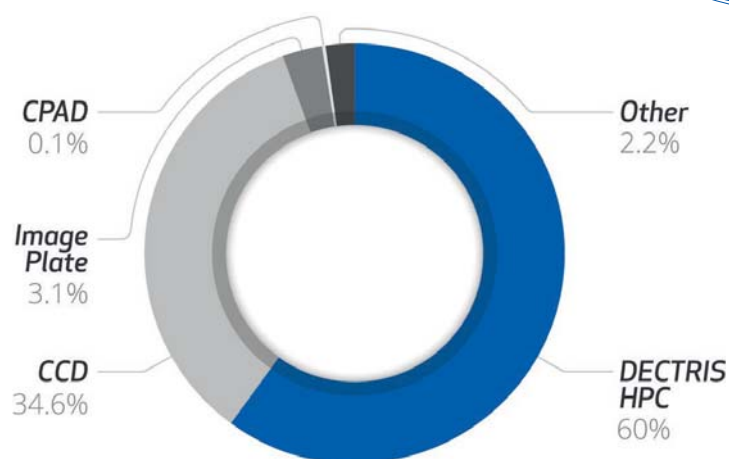
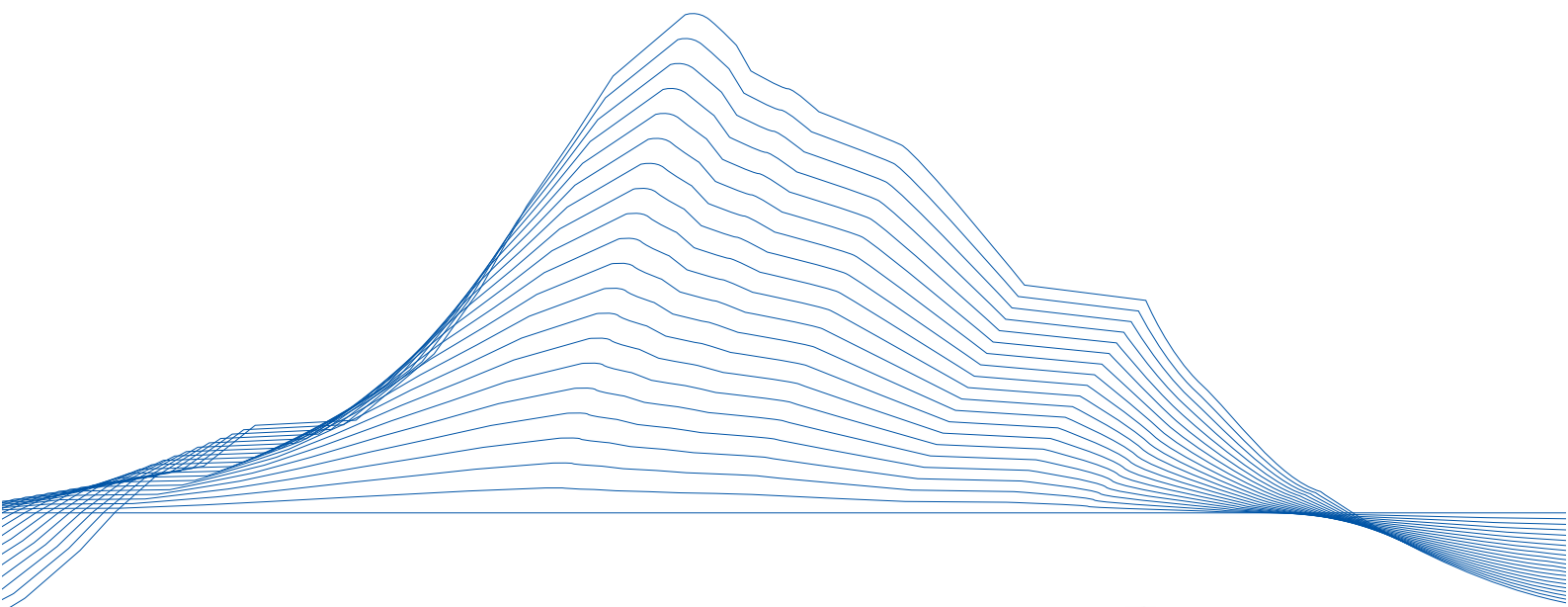
Das System ist mit einer speziellen Blenden-Konfiguration ausgestattet, um Querschnitt-Topographie mit hoher Auflösung zu ermöglichen. Damit erhält man Tiefeninformationen über den gesamten Querschnitt der Probe. Beispielsweise kann bestimmt werden, ob Gleitebenen von der Vorder- oder Rückseite des Wafers ausgehen. Außerdem erlaubt dieser Modus die Quantifizierung der Defektbildung durch die Abscheidung von Epi-Schichten.

Das Fraunhofer IISB wird als Demolabor für das XRTmicron-System in Europa dienen. Das Gerät ist zudem Teil der „Research Fab Microelectronics Germany (FMD)“, die vom BMBF gefördert wird.



Röntgen-Transmissionstopogramm des 101-Reflexes eines kompletten 100 mm 4H SiC-Wafers (links) und ein vergrößerter Ausschnitt des Wafers (rechts). © Fraunhofer IISB

Christian Reimann, Erlangen



*X-ray detector technologies used in PDB releases
in 2019, January to May*

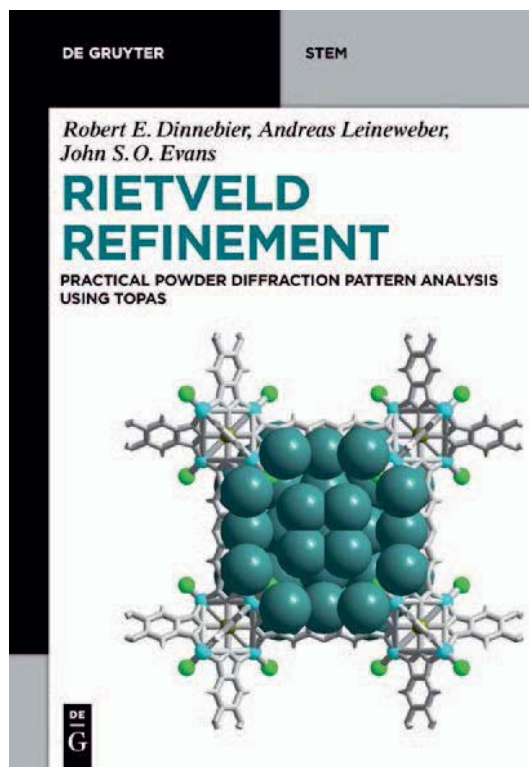
EIGER2 R

The most successful detector technology is getting even better

Sixty percent of the structures released in the Protein Data Bank are based on data acquired with DECTRIS HPC detectors at the synchrotron and in the laboratory. The successful series of PILATUS and EIGER detectors is now being continued with EIGER2.

Visit our website to learn more about the features and advantages of EIGER2 R.

BUCHREZENSION: „RIETVELD REFINEMENT: PRACTICAL POWDER DIFFRACTION PATTERN ANALYSIS USING TOPAS“



50 Jahre nach den ersten Veröffentlichungen von Hugo Rietveld zur vollständigen Anpassung von Pulverdiffraktionsdaten steht nun ein neues Lehrbuch zur gleichnamigen Methode bereit. „RIETVELD REFINEMENT: Practical Powder Diffraction Pattern Analysis using TOPAS“ richtet sich sowohl an Studenten als auch erfahrene Wissenschaftler und schließt die Lücke zwischen abstrakter Theorie und analytischer Praxis.

Zunächst wird die Pulverdiffraktion als physikalische Messmethode eingeführt, gefolgt von den Grundlagen der Rietveldverfeinerung. Anschließend widmen sich die Autoren ganzheitlichen Anpassungsmethoden nach Pawley und Le Bail sowie der Thematik der Peakformen und des Ursprungs von Peakverbreiterungen.

Das eigentliche Highlight des Buches folgt aber erst nach dieser Einführung. So finden sich im folgenden Teil des Buches Kapitel zu aktuellen Analysetechniken und Fragestellungen der modernen Pulverdiffraktometrie, wie der quantitativen Phasenanalyse, der Analyse von Stapelfehlern, parametrischen Rietveldverfeinerungen, der Analyse von magnetischen Phasen, der Analyse von Pulverdiffraktionsdaten mittels Symmetriemoden, der Analyse von Materialspannungen, modernen Strukturlösemethoden sowie ein eigenes Kapitel über *Total Scattering* und Paarverteilungsfunktionen (PDF). Abgeschlossen wird das Buch durch einen umfangreichen mathematischen Anhang, der in sämtliche im Buch verwendete Mathematik einführt.

Die Autoren gehen dabei die Themen auf neue sowie moderne didaktische Weise an. In den einzelnen Kapiteln werden zunächst sämtliche mathematische und physikalische Grundlagen gelegt, gefolgt von beispielhaften Programmcodes, welche direkt in einem der stärksten analytischen Softwareprodukte im Bereich der Pulverdiffraktometrie angewendet werden können.

Auf diese Art und Weise lässt sich theoretisch Gelerntes für den Anwender direkt auf eigene analytische Probleme anwenden. Datengrundlage für die Beispiele sind hierbei nicht nur Pulverdiffraktionsdaten aus Laborröntgendiffraktometern, sondern auch Daten die an Synchrotronstrahlungsquellen oder kontinuierlichen sowie gepulsten Neutronenquellen gewonnen wurden.

Zusammenfassend ist das vorliegende Lehrbuch ein Werk, welches nicht nur Studenten einen relativ einfachen und strukturierten Zugang zur Pulverdiffraktometrie ermöglicht, sondern auch Experten ein umfangreiches Nachschlagewerk vor allem in Bezug auf die benutzte Makrosprache der verwendeten Standardsoftware bietet.

Das englischsprachige Buch „Rietveld Refinement: Practical Powder Diffraction Pattern Analysis using TOPAS“ der Autoren Robert E. Dinnebier, Andreas Leineweber und John S.O. Evans ist erhältlich im Verlag de Gruyter (ISBN: 978-3-11-045621-9).

Martin Etter, Hamburg

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN

BERICHT ZU DEN AKTIVITÄTEN DES AK 1 „BIOLOGISCHE STRUKTUREN“

Beteiligung an den Jahrestagungen

Bei der Jahrestagung 2018 in Essen war der AK 1 „Biologische Strukturen“ im Programmkomitee vertreten und organisierte sechs „Bio-Crystallography“-Mikrosymposien mit insgesamt 65 Beiträgen (Vorträge und Poster). Auch zwei Plenarsprecher aus dem Bereich der Proteinkristallographie wurden auf Vorschlag des AK 1 eingeladen. Bei der Gestaltung der DGK-Jahrestagung 2019 in Leipzig ist der AK1 mit fünf „Bio-Crystallography“-Mikrosymposien mit insgesamt 44 Beiträgen (Vorträge und Poster) wieder stark vertreten.

AK-Treffen und AK-Leitung

Im Rahmen der Jahrestagung 2018 in Essen fand ein Arbeitskreistreffen statt, auf dem u. a. Martina Schäfer als Industrievertreterin offiziell gewählt wurde. Dies war notwendig, da bei der Wahl der Arbeitskreissprecher 2017 in Karlsruhe noch keine Kandidatur für diesen Posten vorlag. Damit wird der Arbeitskreis derzeit geleitet von Sprecher Prof. Dr. Hartmut Niemann (Universität Bielefeld), dem stellvertretenden Sprecher PD Dr. Roman Fedorov (Medizinische Hochschule Hannover) und der Industrievertreterin Dr. Martina Schäfer (Bayer AG, Berlin). Die nächsten Wahlen sind turnusgemäß für die Jahrestagung 2020 geplant.

AK-Aktivität: Workshop am BESSY

Im Juli 2019 findet am BESSY der DGK-AK1-Workshop „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ statt. Der Kurs wird von Dr. Manfred Weiss (HZI Berlin) organisiert und findet dieses Jahr bereits zum sechsten Mal statt. Der Workshop richtet sich an Studierende (Promovierende) im Bereich Biochemie, Chemie, Physik oder Kristallographie, die sich mit strukturb biologischen Fragestellungen beschäftigen. Das Ziel des Workshops ist die theoretische Vorbereitung und die praktische Durchführung eines Diffraktionsexperiments sowie dessen Auswertung. Die Gebühr (100 € für DGK-Mitglieder, 120 € für Nicht-Mitglieder) deckt neben allen Kursmaterialien auch Unterkunft und Verpflegung vor Ort ab. Die Teilnehmerzahl ist auf 20 beschränkt. Erfahrungsgemäß ist dieser Workshop mehrfach überbucht. Anmeldeschluss ist der 30.04.2019.

Personalia

Der AK 1 freut sich sehr, dass Prof. Dr. Ralf Ficner (Universität Göttingen), der ab 2009 für eine Wahlperiode Sprecher des AK 1 war, 2018 zum Vorsitzenden der DGK gewählt wurde. Der AK 1 freut sich ebenfalls dass Herrn Prof. Dr. Georg Schulz (Universität Freiburg) auf Vorschlag des AK 1 die Carl-Hermann-Medaille 2019 der DGK verliehen wird. Der AK 1 gratuliert Prof. Ficner und Prof. Schulz zu diesen schönen Erfolgen.

Hartmut Niemann, Bielefeld

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

4.–6. JULI 2019, HZB BERLIN-ADLERSHOF

Bereits seit 2007 ist eine der Hauptaktivitäten des DGK-Arbeitskreises 1 „Biologische Strukturen“ die Organisation und Ausrichtung des Workshops „Diffraction Data Collection Using Synchrotron Radiation“ am BESSY II-Speicherring des Helmholtz-Zentrums Berlin in Berlin-Adlershof. In diesem Jahr fand der Workshop bereits zum sechsten Mal nach 2007, 2009, 2011, 2013 und 2016 statt; und zwar vom 4. bis zum 6. Juli.

Wie auch schon in den vorherigen Ausgaben des Workshops lag der Fokus auf der Vermittlung von theoretischem Wissen und praktischen Fertigkeiten auf dem Gebiet der makromolekularen Kristallographie. Behandelt wurden die Vorbereitung, Durchführung und Auswertung von Röntgenbeugungsexperimenten unter Verwendung von Synchrotronstrahlung. Der Teilnehmerkreis bestand aus 20 jungen Forschern (Masteranden, Doktoranden und Postdoktoranden) im Bereich Strukturbiologie aus Deutschland, England, Griechenland, Israel, Norwegen, Österreich, Polen, Schweden, Schweiz und Tschechien, die aus insgesamt 59 Bewerbern ausgewählt wurden. Alle Teilnehmer besaßen kaum oder allenfalls sehr begrenzte Kenntnisse auf dem Gebiet der makromolekularen Kristallographie, die durch den Workshop vermittelt und vertieft werden sollten.



Der dreitägige Workshop (www.helmholtz-berlin.de/events/dgk) behandelte die wissenschaftlichen Grundlagen der Methode in 10 Vorträgen der fünf eingeladenen Betreuer und der lokalen Organisatoren zu den Themen Röntgenstrahlung, Kristallvorbereitung, Sammlung und Auswertung von Diffraktionsdaten am Synchrotron, Qualitätskriterien von Diffraktionsdaten, strahlungsinduzierte Strukturveränderungen sowie Lösung des Phasenproblems in der makromolekularen Kristallographie. 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, BL14.2 und BL14.3 und bei der erfolgreichen Auswertung der Beugungsdaten durch die Betreuer unterstützt. Am Ende des Workshops hatten die Studenten Gelegenheit, ihre durchgeführten Experimente und die dabei erzielten Ergebnisse als Präsentation den anderen Teilnehmern vorzustellen. Das wissenschaftliche Programm wurde durch eine Postersession mit Beiträgen der Workshop-Teilnehmer abgerundet und es wurde ein durch die IUCr gestifteter Posterpreis für das beste Poster vergeben. Diesen erhielt Heidi Therese Hillier von der *Arctic University of Norway*, Tromsø, für ihr Poster „Characterizing Enzymes in the Ectoine Biosynthesis Pathway“. Eine Besonderheit dabei war, dass, wie bereits auch schon bei den letzten Malen, 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 100 € bzw. 120 € 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 2021 erneut stattfinden.

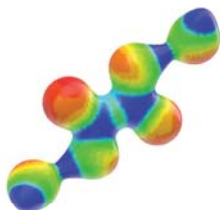
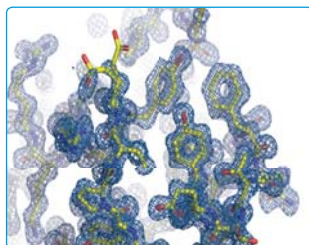
Manfred S. Weiss, Berlin

VERSATILE, POWERFUL, CUTTING EDGE

- One source, two wavelengths
- Much more flux than any microfocus sealed tube
- Curved detector for 150° of theta coverage per frame
- Hybrid photon counting detector with massive dynamic range
- Best in class data quality



Density maps from a ten minute thaumatin dataset solved by S-SAD phasing



Electron density from a 0.37 Å quantum crystallography measurement of oxalic acid

The XtaLAB Synergy-DW is a unique, versatile instrument giving you the ability to research a wide range of samples with just one very high flux instrument. Whether you are studying biological or chemical systems, weak or strong diffraction or something else, the XtaLAB Synergy-DW with the HyPix-Arc 150° is the cutting-edge solution you need.



JAHRESBERICHT 2018 DES AK 6 „MOLEKÜLVERBINDUNGEN“

Für das wissenschaftliche Programm der DGK-Jahrestagung 2018 in Essen hat unser Arbeitskreis zwei Mikrosymposien zu den Themen „Experimentelle Elektronendichte“ und „Developments in Molecular Crystallography“ organisiert. Schwerpunkt im erstgenannten Mikrosymposium war die Quantenkristallographie. Für eine gemeinsame Keynote konnten wir die üblicherweise nicht auf die DGK-Jahrestagung abonnierten Alessandro Genoni (Metz, Frankreich) und Piero Macchi (Bern, Schweiz) als Redner gewinnen. Messmöglichkeiten und Strukturverfeinerungen jenseits des Laboralltags bildeten den Kern des zweiten Mikrosymposiums. Der Zuspruch zu beiden Veranstaltungen übertraf unsere Erwartungen deutlich.

Im Rahmen der Jahrestagung wurde ein Arbeitskreis-Treffen mit den turnusmäßigen Wahlen rechtzeitig per E-Mail und auf der Homepage des AK 6 angekündigt und abgehalten. Der Vertreter (Alexander Pöthig, TU München) und der Sprecher (Ulli Englert, Aachen) wurden für drei Jahre im Amt bestätigt.

Unsere Jubiläumsveranstaltung, der 10. Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung“ fand im Zeitraum 17.–21. September 2018 an bewährter Stelle im Kloster Hardehausen statt. Für das wissenschaftliche Programm zeichneten die Dozenten Michael Bolte, Ulrich Flörke, Martin Nieger, Dieter Schollmeyer, Christoph Wölper und Ulli Englert verantwortlich, die Organisation oblag Beatrice Braun-Cula. Aus *angenehmer Arbeitsatmosphäre, guter & reichlicher Verpflegung* und *hervorragendem Wetter* ließe sich leicht eine Werbebroschüre schustern, so es denn nötig wäre: Wir waren überbucht! Unser Dank geht an die DGK für die finanzielle Unterstützung und an die genannten Personen für ihren Einsatz.

Für das laufende Jahr planen wir gemeinsam mit ChemKrist einen Workshop „Tipps und Tricks mit SHELX“ (<https://dgk-home.de/aks/jkyc/shelx>) in direktem zeitlichen und räumlichen Kontakt zum GDCh-Wissenschaftsforum in Aachen; vorgesehen sind der 18. bis 20. September 2019.

Ulli Englert, Aachen

D G K - W O R K S H O P

„B R E A K I N G T H E W A L L S : C O M P L E M E N T A R Y O F S Y N C H R O T R O N A N D N E U T R O N S C A T T E R I N G “ D E S A K 7 „N E U T R O N E N S T R E U U N G “

On September 19th and 20th 2018, immediately after the German conference on Synchrotron, Neutron and Ion scattering (SNI) on the TUM campus in Garching near Munich, the German Society of Crystallography (DGK) offered a satellite workshop with the topic: „Get the best of all: Structure research by merging the peculiarities of synchrotron, neutron, electron or ion radiation“. More than 20 participants had registered to this workshop, which was organized by the DGK workgroup “Neutron Scattering” and supported by the organizers of SNI/TUM by the provision of a seminar room in the Institute for Advanced Studies (IAS) on the TUM campus. Focusing on young scientists, the aim of this workshop was to introduce the peculiarities of different types of radiation to show how physics, chemistry, biology and materials science can be addressed today by smartly combining different scattering methods and different types of radiation to solve structural issues.

On Wednesday afternoon Prof. Schroer (PETRA III, DESY, Hamburg) gave an introduction into X-ray and synchrotron radiation, followed by Dr. M. Meven (RWTH Aachen, JCNS@MLZ) with an introduction into neutron radiation to prepare the participants for the various applications presented on the next day.

On Thursday morning Prof. Paulus (Université Montpellier) started the session with “Structural Difficulties Exploring Nonstoichiometric Oxides”, followed by Dr. M. Heere (IAM, KIT, Karlsruhe) with his talk “Learning from crystallography: from hydrogen storage to new (battery) applications”. Then, Dr. T. Schrader (JCNS@MLZ) gave an insight into state-of-the-art neutron studies on biological systems with his talk “Neutron protein crystallography: New developments and recent application examples” and Dr. F. A. Lima (European XFEL GMBH, Schenefeld near Hamburg) closed the session with his presentation of “Ultrafast X-ray Spectroscopy and Scattering Applied to Chemistry” at the brand new XFEL facility.

In the afternoon, a guided tour through the neutron source FRM II gave the participants the opportunity to visit a large scale facility during operation and to collect some background information about its typical manner of operation and application for beam time.

The working group would like to thank all participants for their active interest and vivid discussions as well as the speakers and the other involved colleagues for their support.

Martin Meven, Aachen

BERICHT ZU DEN AKTIVITÄTEN DES AK 12 „SPEKTROSKOPIE“ IM JAHR 2018

Vom 22. Mai bis 25. Mai 2018 fand am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum der alljährliche Shortcourse der DMG/DGK „Anwendung der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ statt. Zu diesem 18. Shortcourse kamen 13 Studierende und Doktoranden aus Berlin, Bochum, Bremen, Bonn, Clausthal, Freiberg, Freiburg, Mainz und Siegen aus den unterschiedlichsten Bereiche der Geowissenschaften, Chemie und Werkstoffwissenschaften zusammen.

Der nächste Shortcourse wird vom 11. bis 14. Juni 2019 stattfinden.

Der Arbeitskreis 12 wird auf der DGK-Tagung in Leipzig wieder ein Mikrosymposium „Spectroscopy“ mit angegliederter Postersession am Donnerstag, dem 28.03.2019 durchführen. Von den insgesamt 11 angemeldeten Beiträgen werden sechs als Vorträge und fünf als Poster präsentiert.

Das Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik ist mittlerweile in die neuen Gebäude IA und IB umgezogen. Das Festkörper-NMR-Spektrometer hat den Umzug gut überstanden und ist mittlerweile wieder voll in Betrieb. Es besteht die Möglichkeit, dass aufgrund des Umzuges alle Großgeräte, die älter sind als 15 Jahre durch Ersatzbeschaffungen im Rahmen des Ländergroßgeräteprogrammes ersetzt werden. Dies betrifft auch das NMR-Spektrometer. Nach einigen Verzögerungen im Ablauf ist damit zu rechnen, dass die Anträge demnächst durch die Universität an das Ministerium weitergeleitet werden und dann von der DFG begutachtet werden.

Michael Fechtelkord, Bochum

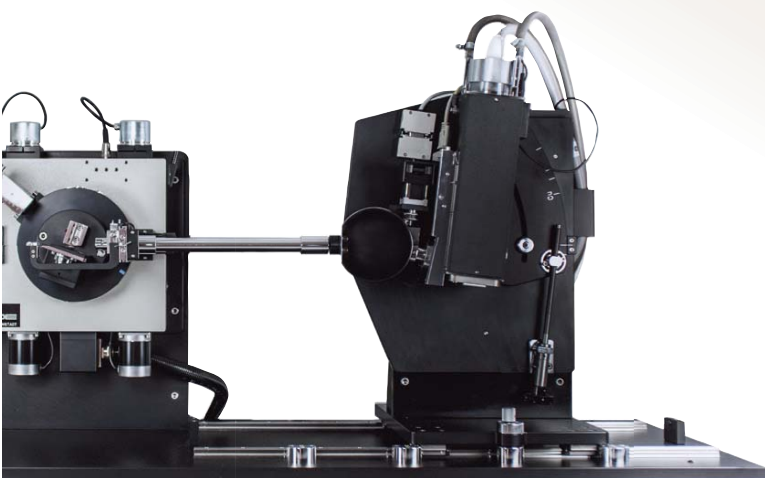


STADIVARI

THE FASTEST AND MOST FLEXIBLE
WAY TO EXPLORE RECIPROCAL SPACE.



SINGLE CRYSTAL
DIFFRACTOMETRY



STADI MP

ONE POWDER DIFFRACTOMETER -
THREE GEOMETRIES



POWDER
DIFFRACTOMETRY

STOE UNPARALLELLED 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

BERICHT ZUM 19. DMG/DGK - SHORTCOURSE „ANWENDUNGEN DER FESTKÖRPER-NMR-SPEKTROSKOPIE IN DER MINERALOGISCHEN UND GEOWISSENSCHAFTLICHEN FORSCHUNG“

11.–14. JUNI 2019, RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

In diesem Jahr fand der DMG/DKG-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ nun schon zum 19. Mal, in der Zeit vom 11. bis zum 14. Juni statt. Diesmal lockte es neun Postdocs, Doktorandinnen und Masterstudierende aus verschiedenen Bereichen der Geowissenschaften und Chemie an die Ruhr-Universität Bochum, um unter der Leitung von Dr. Michael Fechtelkord auf eine viertägige Reise in die Welt der NMR-Spektroskopie mitgenommen zu werden.

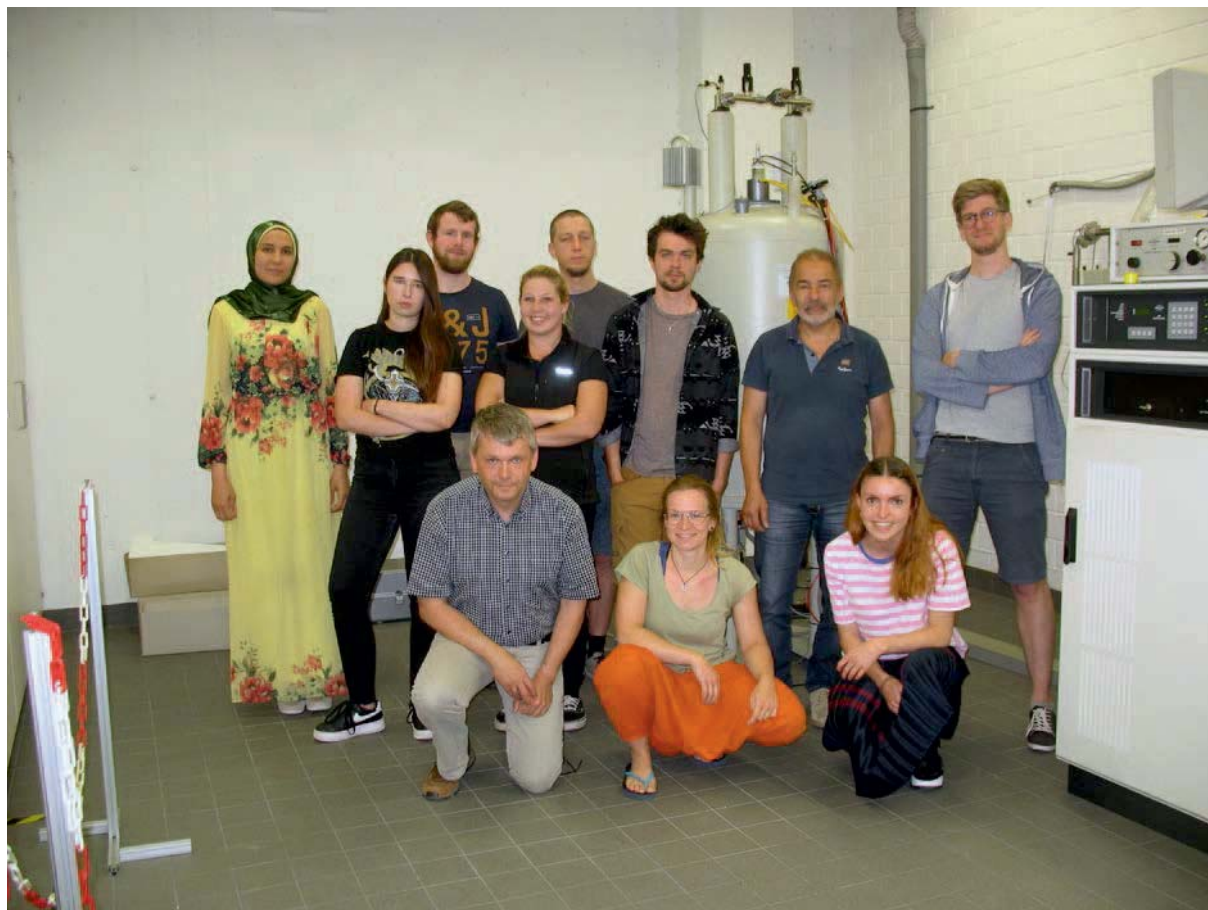
Die einzelnen Kurstage begannen jeweils mit einem morgendlichen Vorlesungsteil, in welchem die theoretischen Grundlagen für die darauffolgenden Messungen gelegt wurden sowie der anschließenden Auswertung der Spektren.

Der Beginn des ersten Tages bestand aus einer allgemeinen Einführung in die Thematik, welche die Funktionsweise und Geschichte der Methode abdeckte. Weiterhin wurde am Gerät selbst der Aufbau des NMR-Spektrometers erklärt. Der praktische Teil widmete sich der ^1H -Spin-Gitter-Relaxation am Beispiel des Tetramethylammoniumjodids und vermittelte somit eine Vorstellung über die Möglichkeiten dynamische Prozesse in Festkörperproben zu untersuchen. An die Messung schloss sich die „händische“ Auswertung der aufgenommenen Daten an. Den Abschluss des Tages bildete ein gemütliches Beisammensein in der fußläufig erreichbaren Kneipe „Summa Cum Laude“. Hier bot sich den Teilnehmenden bei Speis und Trank die Möglichkeit des näheren Kennenlernens in lockerer Atmosphäre.

Der zweite Tag widmete sich der Wechselwirkung der magnetischen dipolaren Kopplung und der chemischen Verschiebung sowie einer Einführung in das Verfahren *Magic-Angle-Spinning* (kurz: MAS). Auf den Theorieteil folgte die Anwendung eben dieser Methode zur Untersuchung von ^{29}Si , ^{19}F und ^1H in synthetischen Phlogopiten. Nach der Mittagspause wurden die Teilnehmenden mit dem Fit-Programm „DMFit2019“ vertraut gemacht, um die zuvor aufgenommenen Spektren eigenständig auszuwerten.

Am dritten Kurstag ging es um die Anwendungsmöglichkeiten von Multipulstechniken und die Grundlagen des Kreuzpolarisationsexperimentes. Der Praxisteil bestand aus der Durchführung von kontaktzeitabhängigen CPMAS-Experimenten an Kaolinit. Am Nachmittag erfolgte unter Verwendung eines Tabellenkalkulationsprogrammes die Auswertung der Messungen mit dem Ziel, die Atomabstände zwischen Si und H zu berechnen.

Während die vorherigen Tage jeweils Proben mit einem Kernspin von $I = \frac{1}{2}$ zum Untersuchungsobjekt hatten, lief der letzte Tag unter dem Motto „Quadrupol-Kerne“.



Dabei wurde auf verschiedene Untersuchungsverfahren wie „Double Rotation“ (DOR), „Multi-Quanten-Magic-Angle-Spinning“ (MQMAS) und „Satellite Transition Spectroscopy“ (SATRAS) eingegangen. Letzteres wurde daraufhin im Praxisteil mit dem Fokus auf die Quadrupol-Kerne ^{23}Na und ^{27}Al in verschiedenen Salzen bzw. in Korund angewendet. Im Anschluss erfolgte auch hier wieder die eigenständige Auswertung der aufgenommenen Spektren.

Abschließend bleibt zu sagen, dass vier Tage mit Sicherheit nicht ausreichen, um die Welt der NMR-Festkörperspektroskopie für sich zu erobern. Die Zeit reichte aber allemal um eine Vorstellung davon zu entwickeln, welche Informationen die Methode über ein Material geben kann. Dementsprechend sollten die Teilnehmer nun befähigt sein, die potentielle Anwendung für zukünftige Projekte abschätzen zu können, sofern diese nicht schon längst anstehen.

Im Namen aller Teilnehmenden möchte ich hiermit nicht nur Dr. Micheal Fechtelkord meinen Dank für diesen durchaus gelungenen Shortcourse aussprechen, sondern auch Lara Sulcek, welche uns in den praktischen Einheiten stets mit Rat und Tat zur Seite stand.

Maximilian Schulze, Freiberg

DMG/DGK P.H.D. STUDENT COURSE: “PAIR DISTRIBUTION FUNCTION ANALYSIS WORKSHOP” OF THE AK 13 “PULVERDIFFRAKTOMETRIE”

On 11-12 October 2018, more than 35 students from different nationalities joined the “Pair distribution function (PDF) analysis workshop” at Max Planck Institute in Stuttgart, an event supported by the Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) and the Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG). The course, organized by Prof. Dr. Robert E. Dinnebier and Dr. Maxwell Terban from the Max Planck Institute for Solid State Research (MPI-FKF), provided an introduction to the basics of the Pair Distribution function and an extended tutorial session using the software Topas 6 (offered by Bruker Corporation). The participants were able to run the software on their own laptop and to practice analysis of PDF data.



The main topics, covered by Max Terban and Sebastian Bette (MPI-FKF), were:

- Introduction to the PDF method, measurements and data reduction
- 2D to 1D data conversion with pyFAI
- Data reduction with PDFGetX3
- Topas structure refinements:
 - Basic setup, simulation, refinement and experimental effects
 - Nanomaterials, domain size and shape effects
 - Molecular materials and rigid bodies
 - Layered materials and stacking faults
 - Single dataset r-dependent fitting and analysis of multiple dataset

During the workshop, the Max Planck Institute provided coffee breaks and lunch at the canteen of the institute. The dinner, offered by STOE & Cie GmbH, provided the perfect setting to make new contacts with many fruitful scientific discussions.

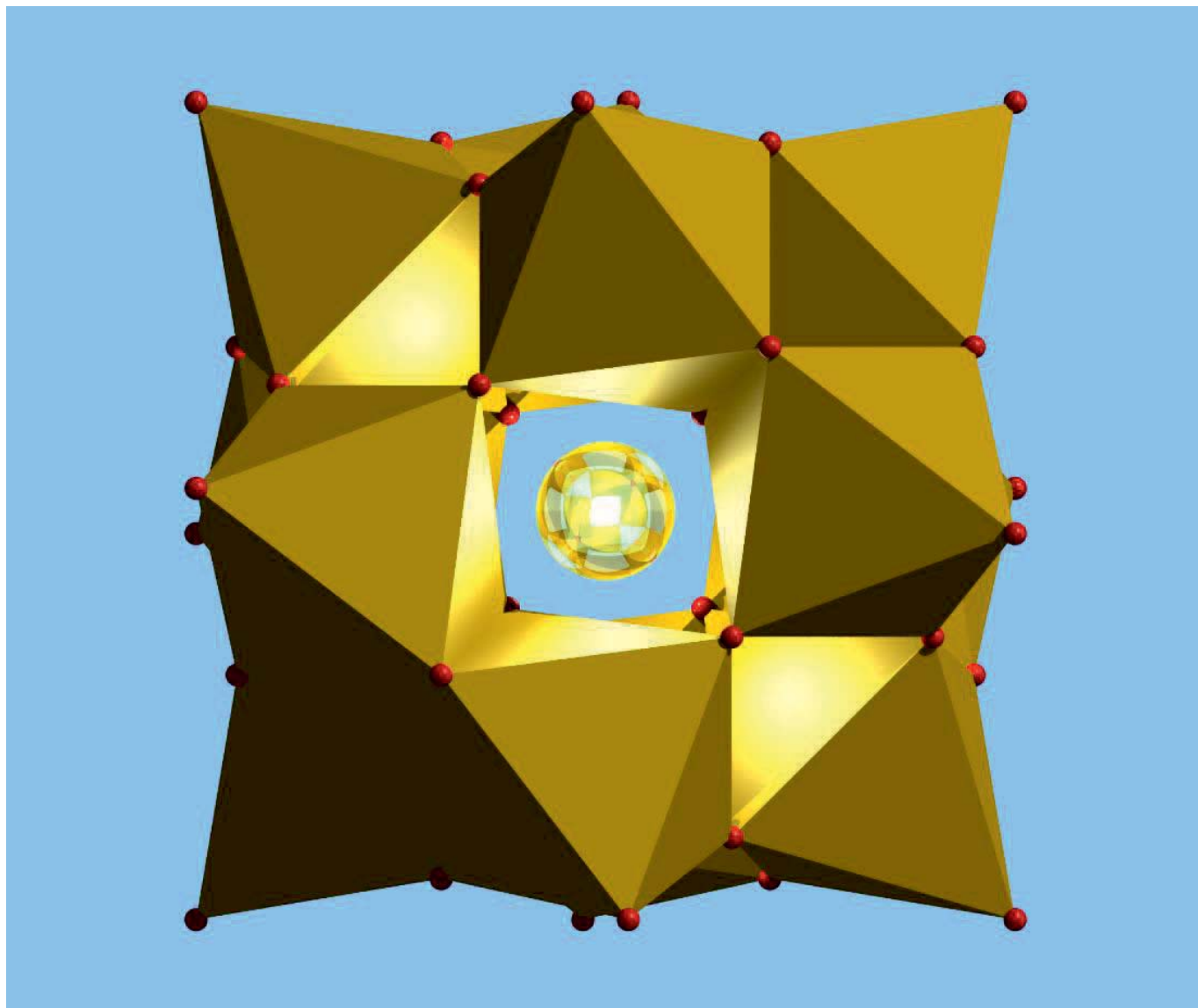
We would like to thank the sponsors who made this course possible: MPI-FKF, DGK, DMG, and the companies Bruker Corporation and STOE & Cie GmbH.

Gianpiero Gallo, Stuttgart



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Funktionen verfügbar!

Die neue Version 4.6 bietet den Export der 3D-Strukturbilddaten in den Formaten OBJ und STL sowie die verbesserte Auswahl, Verarbeitung und Darstellung von Fehlordnungen und Mischlagen.

In den vorigen Versionen 4.3 bis 4.5 sind bereits die Erstellung von animierten POV-Ray-Bildern sowie Sequenzen aus gerenderten POV-Ray-Bildern sowie eine Datenbank der häufigsten anorganischen Strukturtypen hinzu gekommen.

Eine kostenlose Demoversion sowie weitere Infos finden Sie unter:

<https://www.crystalimpact.de/diamond>



**CRYSTAL
IMPACT**

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

Tel.: +49 (228) 981 36 43
Fax: +49 (228) 981 36 44
E-Mail: info@crystalimpact.de
<https://www.crystalimpact.de>

TÄTIGKEITSBERICHT DES AK 19 „KRISTALLCHEMIE“

Der AK 19 hat im Rahmen der 26. Jahrestagung der DGK in Essen eine Mitgliederversammlung abgehalten, auf der u. a. eine Neuwahl von Sprecher/in und Stellvertreter/in stattfand. Gewählt wurden Prof. Dr. Thomas Doert, TU Dresden, als AK-Sprecher (bisher stellv. Sprecher) und Prof. Dr. Caroline Röhr, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg als stellvertretende Sprecherin. Wir danken dem ausscheidenden Sprecher Prof. Dr. Thomas Schleid, Universität Stuttgart, für den langjährigen Vorsitz des Arbeitskreises 19.

Der AK 19 ist traditionell eng verwoben mit der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung der Gesellschaft Deutscher Chemiker. Um diese Verbindung zu stärken und die Festkörperchemiker wieder vermehrt zu Aktivitäten in und mit der DGK zu motivieren, organisieren die Arbeitskreise 2 (Extreme Bedingungen) und 19 (Kristallchemie) gemeinsam mit der GDCh-Fachgruppe einen Workshop „Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie“. Die Veranstaltung wird vom 30.09.2019 bis 02.10.2019 am Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden stattfinden und von DGK und GDCh kofinanziert. Zielgruppe sind Doktoranden und PostDocs aus beiden Gesellschaften. Einzelheiten finden sich auf der Homepage <https://www.cpfs.mpg.de/symmetrie2019>. Wir hoffen auf rege Teilnahme aus beiden Gesellschaften und danken dem DGK-Vorstand schon vorab für die zugesagte finanzielle Unterstützung.

Die Sprecher von AK 2 und AK 19 haben für die Jahrestagung in Leipzig zwei Mikrosymposien „Inorganic crystal structures“, sowie jeweils ein Mikrosymposium „Extreme/non-ambient conditions“ und „Structure-property-relationships“ organisiert.

Neben den kristallographischen Veranstaltungen von DGK, ECA oder IUCr sind viele Kristallchemiker beim alljährlichen Hemdsärmelkolloquium der Festkörperchemie aktiv mit Vorträgen vertreten. Die letztjährige Veranstaltung war vom 08. bis 10. März in Leipzig und wurde von den AK 19-Mitgliedern H. Kohlmann und O. Oeckler organisiert. Etwa ein Viertel der ca. 70 Vorträge wurde von Mitgliedern des AK 19 beigesteuert. Dieses Jahr findet das Hemdsärmelkolloquium bereits vor der DGK-Jahrestagung statt, und zwar vom 7. bis 9. März in Kiel (W. Bensch, C. Näther). Auch hier werden die Kristallchemiker mit voraussichtlich ca. 15 Vorträgen präsent sein.

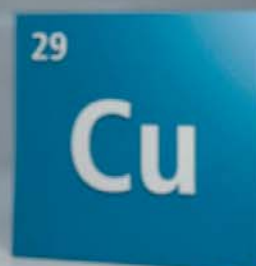
Thomas Doert, Dresden



**Malvern
Panalytical**

SEE MORE WITH HARD RADIATION

Easy and quick setup of experiments in your own lab with Empyrean



IS THE NEW



- Crystallography
- Short-range order measurements (pair distribution function)
- Computed Tomography
- *In operando* studies of batteries
- ... and more

Pixirad

Unique hybrid pixel X-ray detectors
for synchrotrons and lab sources

www.malvernpanalytical.com

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

Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ ist seit 2013 Jahren ein fester Bestandteil der DGK. Auch im letzten Jahr konnten wir uns über steigende Mitgliederzahlen freuen und verzeichnen nun fast 190 Mitglieder aus 14 verschiedenen europäischen und nicht-europäischen Ländern. Die Mitglieder des Arbeitskreises stammen zu großen Teilen aus den Gebieten der Materialwissenschaften und Chemie, gefolgt von der Mineralogie, der Biologie und der Physik.

Das breite und steigende Interesse am Arbeitskreis verdanken wir der starken Präsenz durch unsere jährlichen Herbsttreffen, unseren Auftritt auf der DGK-Homepage und der Unterstützung durch Gruppenleiter und unsere Industriepartner. Wir präsentieren uns sowohl auf der DGK-Homepage (<http://dgk-home.de/aks/jkyc>) als auch mit einem detaillierten und regelmäßig aktualisierten Blog. Des Weiteren sind wir in verschiedenen Karrierenetzwerken (LinkedIn und XING), aber auch in den sozialen Medien (Facebook und Twitter) aktiv. Die jährlich stattfindenden Herbsttreffen an deutschen Hochschulen sowie die *Lab Meetings*, ebenso wie das regelmäßige *Get Together* während der DGK-Frühjahrstagung helfen uns, ein großes Netzwerk aufzubauen. Wir hoffen, dass wir diese schöne Tradition auch in den kommenden Jahren fortsetzen können.

Vom 12. bis 14. September 2018 fand das 3rd *Meeting of the „Young Crystallographers“* in Aachen statt (<http://dgk-home.de/aks/jkyc/aachen-2018>), welches von Mitarbeitern des Instituts für Anorganische Chemie (Khai-Nghi Truong, Marius Kremer, Ulli Englert) und dem Institut für Kristallographie (Sophie-Charlotte Lappe) der RWTH Aachen gemeinsam organisiert wurde. An den drei Veranstaltungstagen, an denen 30 junge Wissenschaftler zugegen waren, fanden neben *Lightning Talks* und *Poster Sessions* auch Labortouren und Vorträge aus der Wissenschaft und Industrie statt. Die Posterpreise, gesponsert durch STOE, gingen an Stefanie Hauber (Fraunhofer ISC), Marchel Lach (Aachen) und Christian Ludt (Freiberg). Die akademischen Vorträge aus den vielfältigen Bereichen der Kristallographie wurden von Martin U. Schmidt (Frankfurt), Janine George (Louvain, Belgien), Karen Friese (Jülich/Aachen), Gernot Heger (Aachen), Kari Rissanen (Jyväskylä, Finnland) und Lars Redecke (Lübeck) gehalten. Das Programm wurde durch verschiedene *Social Events* abgerundet. Wir bedanken uns für die großzügige Unterstützung der DGK, dem FCI und unseren Industriepartnern STOE Cie & GmbH, Solid State Concepts, Malvern Panalytical, Horn & Co. Group und Merck KGaA.

Bei der DGK-Tagung im März 2019 in Leipzig haben die Jungen Kristallographen gleich mit mehreren Teilveranstaltungen aktiv beigetragen (<https://dgk-home.de/aks/jkyc/leipzig-2019>). Auch in diesem Jahr konnten insgesamt 33 TeilnehmerInnen in zwei Mikrosymposien in Kurzvorträgen à fünf Minuten ihre aktuelle Forschung vorstellen. Wir hoffen, im nächsten Jahr auf der gemeinsamen Tagung mit der polnischen Gesellschaft für Kristallographie erneut zwei Symposien gestalten zu können. Die *Lightning Talk Sessions* wurden ergänzt durch die zugehörigen *Poster Sessions*, in denen die Ergebnisse intensiv mit anderen TagungsteilnehmerInnen diskutiert werden konnten. Wie auch in den letzten Jahren wurden wieder die drei besten Poster prämiert, gesponsort durch die Firma STOE. Herzlichen Glückwunsch an die Gewinnerinnen Julia Kratky (Universität Leipzig), Andrea Kirsch (Universität Bremen)

und Frederike Lehmann (Helmholtz-Zentrum Berlin). Neben den zwei Mikrosymposien fand während der Frühjahrstagung unser *Get Together* statt, bei dem die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises kurz zusammengefasst und kommende Events beworben wurden. Hierbei wurden ein neues Teammitglied gewählt: Nach zwei engagierten Jahren in der Führungsebene wurde der ehemalige Sprecher Khai-Nghi Truong (Jyväskylä, Finnland) von den im letzten Jahr gewählten Sprechern Linda Hollenbeck (Köln) und Michael Haiduk (Köln) abgelöst. Jan-Philipp Wöhrle (Freiburg) wurde als neuer stellvertretender Sprecher der Jungen Kristallographen gewählt. An dieser Stelle möchten wir allen ehemaligen und aktuellen Teammitgliedern für ihren hervorragenden Einsatz für die Jungen Kristallographen der DGK danken. Für die finanzielle Unterstützung des *Get Together* danken wir unseren Industriepartnern STOE und DECTRIS!



Teilnehmer und Gäste des 3rd Meeting of the „Young Crystallographers“ in Aachen

Vom 19. bis 20. September 2019 wird das *erste gemeinsame Treffen der Jungen Kristallographen der DGK und der Jungen Kristallzüchter der DGKK* in Köln stattfinden (<https://dgk-home.de/aks/jkyc/koeln-2019>). Das besondere Ziel unseres diesjährigen Herbsttreffens ist der Aufbau einer verstärkten Kooperation zwischen den Gesellschaften der Kristallographie und der Kristallzüchtung. Unser Herbsttreffen wird von Linda Hollenbeck und Michael Haiduk (beide Köln, DGK) und Patrizia Fritsch (Dresden, DGKK) und Melissa Roder (Freiburg, DGKK) organisiert. Zu der kommenden Veranstaltung erwarten wir TeilnehmerInnen aus den unterschiedlichsten Bereichen der Kristallographie und Kristallzüchtung. Neben *Lightning Talks* und Posterpräsentationen jedes Teilnehmers wird es zudem Vorträge aus dem Bereich der Wissenschaft und der Industrie geben. Des Weiteren wird eine Industrieexkursion oder Laborführung organisiert. Bereits bestätigte *Talks* aus dem Bereich

der Wissenschaft sind Claudia Weidenthaler (Mülheim), Andreas Danilewsky (Freiburg) und Hartmut Niemann (Bielefeld). Das Programm wird durch soziale Aktivitäten abgerundet, um die fortwährende Erweiterung unseres Netzwerks zu fördern. Wir bedanken uns im Voraus für die großzügige Unterstützung von STOE, Siltronic, der DGK und der DGKK.

Weiterhin freuen wir uns auf die *ECM32* im August 2019 in Wien und auf das *Polish-German Crystallographic Meeting 2020* in Wroclaw, auf dem wir, die Jungen Kristallographen, hoffentlich wieder erfolgreich zum Tagungsprogramm beitragen können.

Linda Kerkhoff (Köln), Michael Haiduk (Köln) und Jan-Philipp Wöhrle (Freiburg)

PERSONALIA

JUBILARE 2019

Name	Ort	Alter
Gertrud Bissert	Miltenberg	85
Siegfried Brauny	Dresden	85
Eckhard Hinze	Gießen	85
Horst Jullmann	Gießen	85
Volkhard Jung	Karlsruhe	85
Heinz Preuß	Hameln	85
Joachim Sommer	Dresden	85
Henning von Philipsborn	Regensburg	85
Wolfgang Wilke	Deggendorf	85
Lars Ickert	Berlin	85
Gerhard Pieper	Schwalbach	85
Rudolf Schicht	Engen	85
Achim Zedler	Rüdesheim am Rhein	85
Eberhard Born	Garching	80
Jürgen Buschmann	Berlin	80
Kurt Hümmer	Karlsruhe	80
Ursula Krämer	Dresden	80
Günter Liehr	Erlangen	80
Joachim Pickardt	Berlin	80
Wolfram Saenger	Berlin	80
Volker Schramm	Saarbrücken	80
Karlheinz Taxer	Frankfurt	80
Ulf Thewalt	Ulm	80
Jürgen Felsche	Konstanz	80
Alfred Gieren	Innsbruck	80
Karl-Friedrich Hesse	Kiel	80
Hans-Jörg Lindner	Darmstadt	80
Gerhard Mieke	Darmstadt	80
Wolfgang Friedrich Müller	Darmstadt	80
Georg E. Schulz	Freiburg	80
Joachim Sieler	Leipzig	80
Dieter Stephan	Dresden	80
Hans Boysen	München	75
Bernward Engelen	Siegen	75
Werner Massa	Marburg	75
Heinz Rotter	Erlangen	75
Robert Schwarzer	Clausthal	75
Wulf Depmeier	Kiel	75
Eckhart Förster	Jena	75
Klaus Funke	Münster	75

Walter Hoyer	Chemnitz	75
Rolf Klaska	Ennigerloh	75
Kurt Klepp	Linz	75
Wolfgang Neumann	Berlin	75
Harm Wulff	Greifswald	75
Jan Willem Bats	Frankfurt	70
Gerd Meyer	Köln	70
Manfred Mühlberg	Köln	70
Matthias Müller	Jena	70
Reinhard Nesper	Zürich	70
Heinz-Jürgen Schmidt	Berlin	70
Michael Serafin	Gießen	70
Karsten Tellert	Erlangen	70
Angelika Teresiak	Dresden	70
Gerhard Cordier	Darmstadt	70
Peter Häussler	Chemnitz	70
Jürgen Ketterer	Marly	70
Klaus Kosten	Alsdorf	70
Andreas Magerl	Erlangen	70
Norbert Mattern	Dresden	70
Gerhard Blockus	Ludwigshafen	65
Detlev Götz	Almelo	65
Susanne Herting-Agthe	Berlin	65
Rolf Hilgenfeld	Lübeck	65
Gerhard Klebe	Marburg	65
Ursula Probst	Gundelfingen	65
Heidrun Sowa	Göttingen	65
Peter Adelman	Karlsruhe	65
Herta Effenberger	Wien	65
Reinhard Fischer	Bremen	65
Peter Gille	München	65
Robert Haberkorn	Saarbrücken	65
Nikolaus Herres	Buchs	65

VERSTORBENE MITGLIEDER

Dr. Kay Schürmann

Mineralogische Sammlung am Forschungsinstitut und Naturmuseum Senckenberg
Frankfurt am Main

† 11.07.2018

Prof. Dr. Otto Jarchow

Mineralogisches Institut der Universität Hamburg

† 29.07.2018

Prof. Dr. Horst Pentinghaus

Technische Mineralogie am Forschungszentrum Karlsruhe

† 26.11.2018

Giesela Freydank

Baugrundlabor Freydank, Kleinmachnow

† 04.12.2018

Prof. Dr. Wolfgang Haase

Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie an der TU Darmstadt

† 11.12.2018

Dr. Wolfgang Poll

Institut für Anorganische Chemie und Strukturchemie an der HHU Düsseldorf

† 08.06.2019

Prof. Dr. Johann Peisl

Lehrstuhl für Experimentalphysik an der LMU München

† 12.06.2019

E H R U N G E N

Herrn **Prof. Dr. Ing. Dr. h. c. mult. Hartmut Fueß** vom Institut für Materialwissenschaft der Technischen Universität Darmstadt wurde die Ehrendoktorwürde der Universität Ankara (Türkei) für seine herausragenden Verdienste in der Strukturforschung von Materialien und für seine freundschaftliche Verbundenheit mit der Universität verliehen.

Herrn **Prof. Dr. Ing. Dr. h. c. mult. Hartmut Fueß** vom Institut für Materialwissenschaft der Technischen Universität Darmstadt wurde die Ehrendoktorwürde der Universität Sfax (Tunesien) für seine wertvollen Beiträge zur Entwicklung von Kooperation und wissenschaftlicher Partnerschaft zwischen deutscher und tunesischer Universität verliehen.

Prof. Dr. Wolfgang Bensch vom Institut für Anorganische Chemie der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel erhält den Wilhelm-Klemm-Preis 2019 der GDCh.

MAX-VON-LAUE-PREIS 2019 AN MIRIJAM ZOBEL

IN ANERKENNUNG IHRER UNTERSUCHUNGEN ZUR RESTRUKTURIERUNG VON
FLÜSSIGKEITEN AN FEST/FLÜSSIG-GRENZFLÄCHEN MITTELS
RÖNTGENSTREUUNG UND ANALYSE DER PAARVERTEILUNGSFUNKTION,
INSBESONDERE FÜR IHRE ERKENNTNIS DER RESTRUKTURIERUNG DER
FLÜSSIGEN GRENZSCHICHT AN NANOTEILCHEN



Die Laudatio wird im nächsten Heft der DGK-Mitteilungen erscheinen.

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER
WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2019
AN MICHAEL RUCK

FÜR SEINE EXZELLENTHE, BREITE UND WEITSICHTIGE FORSCHUNG
ZUR SYNTHESE, KRISTALLZÜCHTUNG UND STRUKTURAUFKLÄRUNG
ANORGANISCHER FESTSTOFFE



© Alexander Pöthig, München

Guten Tag, sehr geehrte Kollegen und Kolleginnen, sehr geehrte Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie und des Preiskomitees, sehr geehrte Damen und Herren,

ich freue mich sehr, Sie alle ganz herzlich zu einem überaus erfreulichen Anlass begrüßen zu dürfen: Dieses Jahr wird die Will-Kleber-Gedenkmünze für hervorragende wissenschaftliche Beiträge in der Kristallographie an Herrn Professor Michael Ruck verliehen. Als eine langjährige Mitarbeiterin seiner Arbeitsgruppe an der Technischen Universität Dresden ist es mir eine Ehre, die Laudatio halten und meine große Wertschätzung zum Ausdruck bringen zu dürfen.

Zunächst möchte ich seinen wissenschaftlichen Lebensweg kurz umreißen.

1989 schloss er mit einer Diplomarbeit sein Chemiestudium im Institut für Anorganische Chemie der Universität Karlsruhe unter Anleitung von Professor Hartmut Bärnighausen erfolgreich ab. Zwei Jahre später promovierte er in der Arbeitsgruppe von Professor Arndt Simon am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart. Seinen wissenschaftlichen Werdegang setzte er an der Universität Karlsruhe fort, wo er 1997 im Fach Anorganische Chemie habilitierte. Bereits 2000 folgte Michael Ruck einem Ruf auf eine C4-Professur an die TU Dresden, wo er neben Forschung und Lehre von 2000 bis 2006 auch als geschäftsführender Institutsdirektor, von 2006 bis 2009 als Fakultätsdekan, von 2010 bis 2015 als Mitglied des Hochschulrates und von 2015 bis 2017 als Prorektor für Universitätsplanung tätig war. Zu erwähnen sind die Ernennung zum Max-Planck-Fellow 2010 und seine

maßgebliche Rolle als Initiator und Koordinator des DFG-Schwerpunktprogrammes „Materialsynthese nahe Raumtemperatur“, welches seit 2013 mithilfe von 17 Teilprojekten unter niedrigeren Temperaturen realisierte nachhaltige chemische Prozesse zur effizienteren Herstellung bekannter und neuer Funktionsmaterialien mit höherer Reinheit und größerer Ausbeute erforscht.

Während dieser fast 30 Jahre konnte Professor Ruck zahlreiche Erfolge und Leistungen auf den Gebieten Synthese, Kristallzüchtung und Kristallographie verzeichnen. Seine Forschungsaktivitäten waren und sind durch eine hohe Bereitschaft geprägt, emergente Themen, oft abseits des Mainstreams, zu verfolgen, risikobereit neue Bereiche zu erkunden und stets neue Herausforderungen zu suchen. Er bleibt seinem Lieblingselement, Bismut, bereits seit seiner Habilitation treu. Professor Ruck zeigt eine sehr verlässliche Intuition im Hinblick auf neu aufkommende, interdisziplinäre Forschungsthemen und ihren Transfer in sein Fachgebiet – so etwa im Falle von topologischen Isolatoren, deren Vorhersage ursprünglich dem Feld der theoretischen Physik entstammt und seit 2006 zahlreiche explorative Arbeiten in verschiedenen Bereichen motivierte. Der erste Nachweis eines schwachen dreidimensionalen topologischen Isolators gelang 2013 anhand einer in der Arbeitsgruppe von Professor Ruck entdeckten Verbindung, $\text{Bi}_{14}\text{Rh}_3\text{I}_9$.

Seit unserem ersten Treffen in Dresden 2006 habe ich die überaus bereichernde Gelegenheit, an diesem Forschungsprozess mitzuwirken. Ich bin nach wie vor sehr beeindruckt davon, dass Michael Ruck stets bereit ist, wissenschaftliche Diskussionen mit seinen Mitarbeitern zu führen und dabei uneingeschränkt große Leidenschaft und ausgeprägtes Engagement zu zeigen. Jede Strukturbestimmung, die in seinem Arbeitskreis vorgenommen wird, nimmt er unter die Lupe und analysiert sie mit seinem scharfen Blick für jedes Detail, bis die echte Schönheit der korrekten Symmetrie enthüllt wird. Sein Ziel ist es, über die korrekte kristallographische Beschreibung, die vertiefte kristallchemische Diskussion unter Berücksichtigung der chemischen Bindung und der elektronischen Situation zu einem umfassenden Materialverständnis zu gelangen. Er nutzt komplementäre Charakterisierungsmethoden, um die Ergebnisse in vollen Umfang zu belegen.

Stundenlang könnte ich markante Beispiele aus seiner Forschung darlegen, da die Publikationsliste von Michael Ruck über 240 Einträge umfasst, u.a. in sehr hochrangigen Zeitschriften wie Nature Materials, Nature Physics, Angewandte Chemie usw. Ich kann an dieser Stelle nur einen groben Einblick gewähren.

Die außergewöhnlich breit gefächerte Forschung seiner Arbeitsgruppe umfasst methodische Entwicklungen zu Niedertemperatur-Materialsynthesen in ionischen Flüssigkeiten, die mikrowellengestützte Herstellung von metallischen Nanopartikeln, innovative Syntheseverfahren wie Pseudomorphose, die Umsetzung oder chemische Änderung im festen Stand und, seit Kurzem, die Hydroflux-Synthese.

In seinen kristallographischen Arbeiten wurden komplexe Phänomene wie die Pseudosymmetrie und ihre Konsequenzen, die Zwillingsbildung, die Fehlordnungsproblematik, Domänenstrukturen und weitere Aspekte behandelt, die ersichtlich werden lassen, wie eine reale Struktur sich in Röntgenexperimenten bemerkbar macht. Bismut-Kristallchemie weist zahlreiche Beispiele von niederdimensionalen Strukturen auf, in welchen eine ungestörte Periodizität nicht erhalten bleibt oder eine hohe Symmetrie durch mehrfache Verzwilligung vorgetäuscht wird. Dazu trägt die Problematik von extrem hohen Absorptionskoeffizienten bei. Solchen Herausforderungen, die auch oft in Kombinationen auftreten, geht Professor Ruck mit großer Sorgfalt, fachlicher Qualität und analytischer Schärfe auf den Grund.

Korrekte kristallographische Daten sind eine entscheidende Voraussetzung für das Verständnis physikalischer Eigenschaften.

Jeder Chemiker freut sich sehr, wenn ein von ihm entdecktes Material oder Mineral ihm zu Ehren nach ihm benannt wird. Die Bezeichnung „Kleberit“ für ein selten vorkommendes Mineral aus der Klasse der Eisen-Titan-Oxid-Hydroxide bringt das in bleibender Erinnerung hinterlassende Wirken von Professor Kleber zum Ausdruck.

In der Arbeitsgruppe Ruck gelang es 2005, eine neue Modifikation von Phosphor über eine chemische Transportreaktion zu synthetisieren und strukturell mit Einkristall-Röntgenstrukturanalyse aufzuklären. Die besondere Herausforderung lag in der Präparation der faserförmigen Kristalle, welche zum Verwachsen und Spleißen neigen. Diese neue Phosphormodifikation wurde schon bereits kurze Zeit nach der Veröffentlichung in „Angewandte Chemie“ als Ruckscher Phosphor in „Moderne Anorganische Chemie“ von Erwin Riedel erwähnt.

Professor Ruck fördert die Kristallographie auch im Kontext der Lehre. Er legt großen Wert darauf, seine fundierten kristallographischen und kristallchemischen Kenntnisse an die jungen Generationen der Wissenschaftlichen zu übermitteln, sowohl im Institutsalltag als auch in der akademischen Lehrpraxis. An dieser Stelle möchte ich das Beispiel von Buerger-Präzessions-Kameras anführen, die 2006 und 2007 im Arbeitskreis zum Einsatz kamen, um die Qualität der gepickten Kristalle zu überprüfen, bevor sie überhaupt mittels des Einkristall-Röntgendiffraktometers gemessen werden konnten. Damals war die Arbeitsgruppe in dem historischen Fritz-Förster-Bau am Campus angesiedelt, welcher ausstattungs-technisch viele Herausforderungen barg. Heutzutage ist der Röntgenraum des AK Ruck im Neubau Chemie untergebracht, der mit mehreren modernen Geräten für anspruchsvolle Röntgenexperimente aufwartet, aber die Präzessions-Kameras sind noch dort vorzufinden. Sie werden für die praktischen Aufgaben im Rahmen von vertieften Praktika genutzt, sodass Studierende Grundlagenkenntnisse erwerben.

Man schafft nicht alles allein. Michael Ruck betont immer, dass er die Teamarbeit in der Forschung sehr schätze. Dank seiner Persönlichkeit fanden sich mehrere motivierte und begabte Studierende und Mitarbeiter im Arbeitskreis ein, welche sich auf genannte Themenstellungen einließen und immer wieder neue Impulse für die Forschung erbrachten. Mich persönlich berührt es, dass Herr Professor Ruck, sein akademischer Lehrer, Herr Professor Bärnighausen, und ihr wissenschaftlicher Nachwuchs immer noch zusammen das Hirscheegg-Seminar für Festkörperchemie im Kleinwalsertal regelmäßig besuchen. Diese schöne sommerliche Tradition hebt hervor, dass die Bärnighausen-Stammbäume gut gepflegt werden und Früchte tragen.

Damit bin ich am Ende meiner Lobrede angelangt. Ich bedanke mich ausdrücklich dafür, dass ich diesen Weg zum Teil mitgehen durfte. Dem Geehrten und seinem Arbeitskreis wünsche ich viele weitere Jahre erfolgreicher und innovativer Forschung mit zahlreichen neuen Herausforderungen und Entdeckungen.

Anna Isaeva, Dresden

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DER
CARL-HERMANN-MEDAILLE 2019
AN GEORG E. SCHULZ

IN ANERKENNUNG SEINES WISSENSCHAFTLICHEN LEBENSWERKES,
BESONDERS SEINER ZAHLREICHEN BEITRÄGE ZUR STRUKTURAUFKLÄRUNG
VON ENZYMEN UND MEMBRANPROTEINEN, DURCH WELCHE ER MAßGEBLICH
ZUM VERSTÄNDNIS DER ZUSAMMENHÄNGE ZWISCHEN STRUKTUR,
BIOLOGISCHER FUNKTION UND EVOLUTION BEIGETRAGEN HAT



Lieber Georg,

tja, jetzt stehen wir hier zusammen auf der Bühne. Du bekommst die Carl-Herrmann-Medaille der DGK für Dein wissenschaftliches Lebenswerk verliehen, und ich soll Deine Leistungen würdigen. Ich habe mir natürlich ein paar Gedanken gemacht, wie ich das am besten anstelle, und ich würde sagen, ich nenne einfach mal ein paar Zahlen aus Deiner Biographie.

Du hast mit dem Studium der Physik angefangen. Studiert hast Du in Berlin und in Heidelberg, und dort hast Du auch in Physik promoviert. Das war 1966. Dann hast Du Dir in den Kopf gesetzt, Strukturbioogie zu lernen und bist an die Yale University über den großen Teich gegangen. Eineinhalb Jahre später bist Du nach Heidelberg zurückgekommen, um am Max-Planck-Institut für medizinische Forschung in Heidelberg eine Arbeitsgruppe für Proteinkristallographie aufzubauen. Nach einem Forschungsaufenthalt in Israel, am Weizmann-Institut in Rehovot, bist Du wieder nach Heidelberg zurückgekehrt. 1984 bist Du dann als ordentlicher Professor nach Freiburg gegangen und bist dort bis zu Deiner Emeritierung 2007 geblieben. Das hört sich so erstmal recht unspektakulär an. Deshalb

möchte ich Deine Biographie einfach mal im Kontext der Entwicklung der Strukturbioogie als Forschungsgebiet im Allgemeinen beleuchten.

Das geht am besten, wenn man sich die Gesamtzahl und die jährliche Anzahl der bestimmten Proteinstrukturen ansieht (Abbildung 1). Dazu gibt es in unserem Forschungsfeld die Proteinstrukturdatenbank, abgekürzt PDB, in der alle bestimmten und veröffentlichten makromolekularen Strukturen abgelegt, archiviert und öffentlich zugänglich gemacht werden. Letzte Woche (Anmerkung des Autors: das war am 19. März 2019) überstieg die Gesamtzahl an Strukturen in der PDB erstmals 150.000!!! Ich habe in dem Schaubild die x-Achse mal ein wenig nach links erweitert, um Dein Promotionsjahr mit abzubilden. Und auch das Jahr Deiner Entscheidung, in die USA zu gehen, um als Postdoktorand Proteinkristallographie zu lernen. Wenn ich mir das so ansehe, frage ich mich, wie zum Henker bist Du nur auf diese Idee gekommen? Das war doch verrückt. 1966 war in dem Gebiet praktisch noch nichts bekannt. Strukturbioogie!!! Gerade mal zwei (!!!) Proteinstrukturen waren zu der Zeit veröffentlicht, eine weitere Handvoll vielleicht war irgendwo in Bearbeitung. Und das war's. Strukturbioogie als Forschungsgebiet war praktisch nicht existent. 1968 dann, als Du nach Deutschland zurückkamst, um am MPI eine Forschungsgruppe aufzubauen, immer noch das gleiche Bild. 1984, als Du in Freiburg Deinen Lehrstuhl antratst, waren gerade mal 150 Proteinstrukturen veröffentlicht und etwa alle 2 Wochen kam eine weitere dazu. Ich kann mich noch sehr gut daran erinnern, dass wir in unserem Literaturseminar JEDE einzelne Proteinstruktur besprochen haben. Das ist heute natürlich undenkbar. Heute sind es, wie gesagt, 150.000 Proteinstrukturen, und jeden Tag (!) kommen 30 weitere dazu. Jeden Tag. Sogar samstags, sonntags und feiertags.

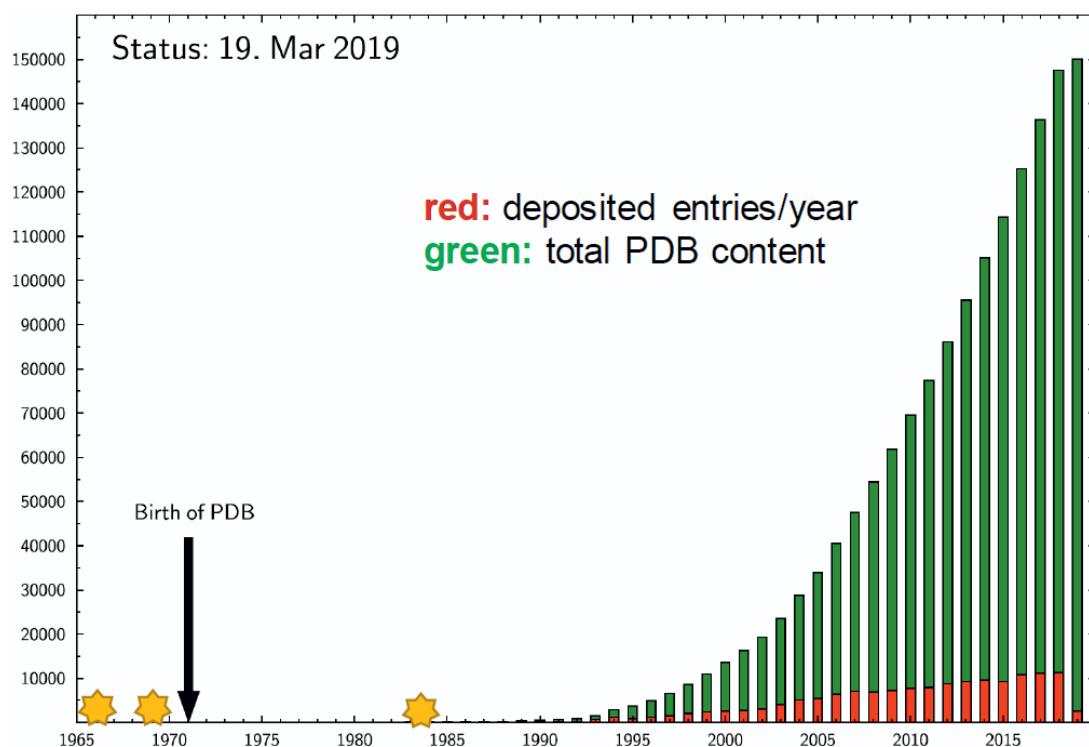


Abbildung 1: Gesamtzahl der Proteinstrukturen (grün) und jährliche Anzahl der bestimmten Proteinstrukturen (rot). Quelle: www.rcsb.org/pdb. Die drei Sterne bezeichnen die Jahre 1966 (Promotion), 1968/9 (Rückkehr nach Deutschland von der Postdoc-Zeit in den USA) und 1984 (Antritt der Professur in Freiburg) von Georg Schulz. Der Pfeil bezeichnet das Gründungsjahr der PDB 1971.

Um das Ganze noch weiter zu verdeutlichen, soll nun die y-Achse der Abbildung mal um den Faktor 100 gespreizt werden (Abbildung 2). Nicht vergessen, es ist das exakt gleiche Schaubild. Wenn man sich das so betrachtet, muss man sich fragen, hast Du, Georg, das alles vorausgesehen? Warst Du ein Visionär? Leider ist ja, seit Helmut Schmidt mal gesagt hat, dass einer, der Visionen hat, besser zum Arzt gehen sollte, das Wort Visionär ein wenig verbrannt. Dann vielleicht besser Pionier. Man kann – so glaube ich – mit Fug und Recht behaupten, dass Du im wahrsten Sinne des Wortes ein Mann der ersten Stunde, ein Pionier* der Proteinkristallographie warst. In Deutschland gab es außer Dir noch die Gruppe von Wolfram Saenger in Berlin (nebenbei gesagt, Wolfram Saenger hat die Carl-Herrmann-Medaille 2004 bekommen), dann die von Robert Huber am MPI in München und dann eben Dich und Deine Gruppe, erst in Heidelberg, dann in Freiburg. Du hast, und das kann man getrost und ohne Einschränkung sagen, die Proteinkristallographie mit nach Deutschland gebracht und sie dort etabliert. Und zwar lange bevor es viele andere nachmachten.

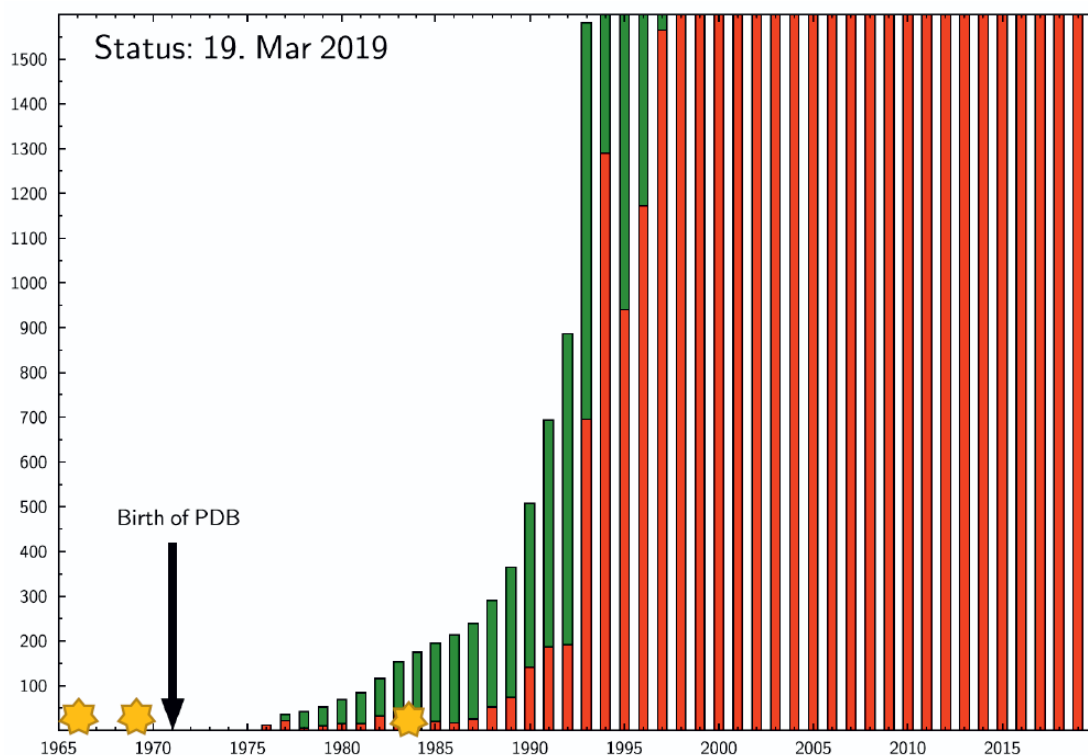


Abbildung 2: Siehe Abbildung 1. Die y-Achse ist hier im Vergleich zu Abbildung 1 um den Faktor 100 gespreizt.

* Unter einem Pionier (Lehnwort aus mfrz., frz. *pionnier* = Schanzgräber, fig. Wegbereiter, Vorkämpfer) versteht man im Bereich Forschung einen Menschen, der auf einem bestimmten Gebiet eine Vorreiterrolle einnimmt, der etwas Bahnbrechendes geleistet und damit weiteren wissenschaftlichen Arbeiten und Erkenntnissen den Weg geebnet hat. Quelle: www.wikipedia.de

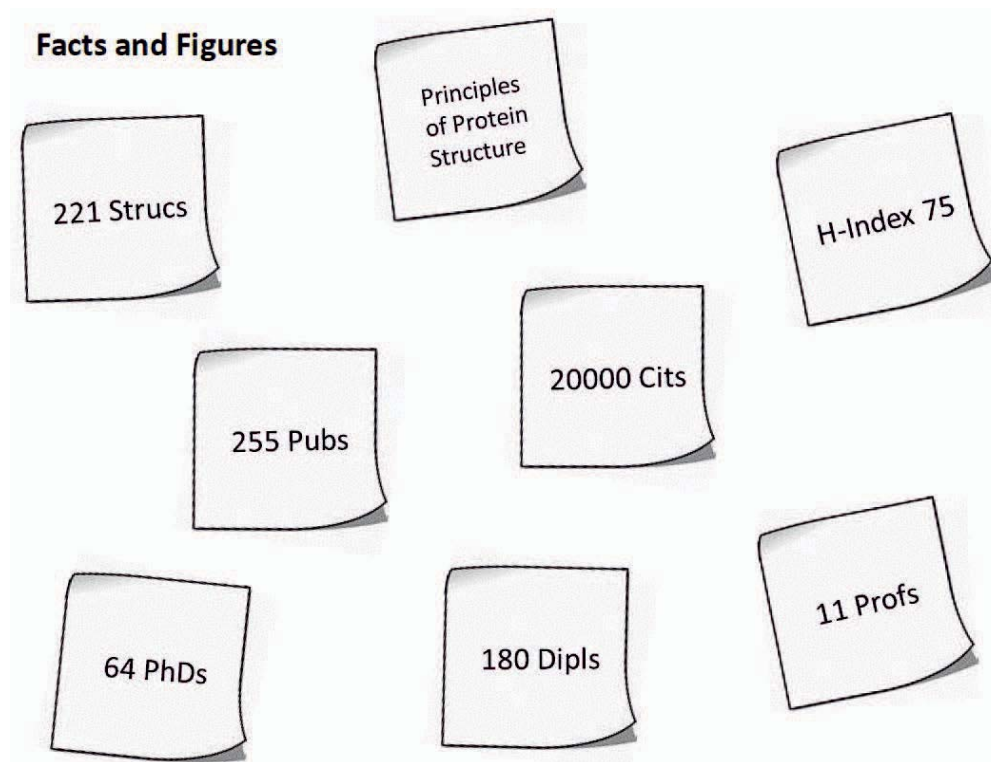


Abbildung 3: Key Performance Indicators von Georg Schulz.

Zum Schluss möchte ich noch ein paar weitere Zahlen, oder wie man heute so schön sagt, *Key Performance Indicators*, präsentieren (Abbildung 3). Georg Schulz hat 255 Originalarbeiten veröffentlicht, die insgesamt fast 20.000 Mal zitiert wurden. Selbst 2018, 11 Jahre nach seiner Emeritierung, wurden seine Arbeiten noch über 400 Mal zitiert. Damit steht sein Hirsch-Index bei 75. 221 Strukturen in der PDB (www.rcsb.org/pdb) sind mit seinem Namen verbunden. Georg Schulz hat das Buch „Principles of Protein Structure“ geschrieben, ein Klassiker, der bis heute über 2000 Mal in Publikationen zitiert wurde. Und er hat 64 Doktoranden promoviert, und 180 Diplomarbeiten betreut. Insgesamt 11 Professoren gingen aus seiner Schule hervor.

Ich bin absolut überzeugt davon, dass es gänzlich außer Frage steht, dass Du, Georg, die Carl-Herrmann-Medaille, den höchsten Preis, den die DGK vergibt, für Dein herausragendes wissenschaftliches Lebenswerk verdient hast, und ich bin sehr froh, dass das Preiskomitee dem Vorschlag des Arbeitskreises 1 „Biologische Strukturen“ gefolgt ist.

Ganz herzlichen Glückwunsch Georg!

Manfred S. Weiss, Berlin

LAUDATIO ANLÄSSLICH DER VERLEIHUNG DES
WALTRUDE UND FRIEDRICH LIEBAU-
PREISES ZUR FÖRDERUNG DER
INTERDISZIPLINARITÄT DER
KRISTALLOGRAPHIE 2019
AN SEBASTIAN BETTE

IN ANERKENNUNG SEINER BEDEUTENDEN WISSENSCHAFTLICHEN ARBEITEN,
MIT DENEN ES IHM IN BESONDERER WEISE GELUNGEN IST, MODERNE
METHODEN DER KRISTALLOGRAPHIE, SPEZIELL DER
RÖNTGENPULVERDIFFRAKTOMETRIE, MIT VORGEHENSWEISEN DER
KONSERVIERUNGSWISSENSCHAFTEN, INSBESONDERE BEI IHREN AUFGABEN
DES ERHALTS UND DER RESTAURIERUNG VON ARCHÄOLOGISCHEN,
ETHNOLOGISCHEN, KUNSTHANDWERKLICHEN UND KÜNSTLERISCHEN
OBJEKTEN, ZUM BEIDERSEITIGEN VORTEIL ZUSAMMENZUFÜHREN



Liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist mir eine besondere Ehre, heute Abend die Laudatio für den diesjährigen Preisträger des Waltrude und Friedrich Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie, Herrn Dr. Sebastian Bette, zu halten.

Seit Anbeginn der Kristallographie als eigenständige Wissenschaftsrichtung gegen Ende des 18. Jahrhunderts wurde diese eher kritisch gesehen, wie ein Zitat von 1794 aus dem „Intelligenzblatt der Allgemeinen Literaturzeitung“ anschaulich demonstriert:

„Was nützt die Kristallographie? Gar nichts! Viele Kristalle sind überhaupt keiner Kristallisation fähig. Jeden Augenblick wirken andere Ursachen anders. Sogar

Sonnenlicht und Temperatur spielen eine Rolle. Die kleinen Dreiecke, Vierecke die man oft kaum sieht gehören in die Mathematik und sind unter der Würde der Mineralogie.“

Aber genau das ist ja eben das Spannende an der Kristallographie, wenn die Materialien nanokristallin oder amorph sind, nur in Pulverform vorliegen, wenn Umwelteinflüsse, die Zusammensetzung der Atmosphäre, Feuchtigkeit, Kontaktmaterialien, Temperatur und Licht eine Rolle spielen. Damit ist die Kristallographie wie geschaffen für die Korrosionsforschung. Wie kann man die Bildung der Korrosionsprodukte verstehen, wie kann man diese steuern, oder auch verhindern, welche Eigenschaften, welche Struktur haben diese Materialien? All diese Fragen spielen hinein in die klassischen Betätigungsfelder der Kristallographie, der Mineralogie, Chemie, Biologie, Festkörperphysik und Materialwissenschaft. Kristallographie war und ist eben eine ausgeprägt interdisziplinäre Wissenschaft; Fluch und Segen zugleich. Die Kristallographie muss sich immer wieder neu erfinden, neue Betätigungsfelder erschließen, um als eigenständige Wissenschaft überleben zu können.

Umso wichtiger ist es zu zeigen, dass die konsequente Anwendung kristallographischer Methoden auf anderen Gebieten etwas Neues schafft, Dinge unter einem anderen Blickwinkel erscheinen lässt und dabei hilft komplexe Fragen beantworten zu können.

Herrn Bette ist es in besonderer Weise gelungen, moderne Methoden der Kristallographie, speziell der Röntgenpulverdiffraktometrie, mit Vorgehensweisen der Konservierungswissenschaften, insbesondere bei Ihren Aufgaben des Erhalts und der Restaurierung von archäologischen, ethnologischen, kunsthandwerklichen und künstlerischen Objekten, zum beiderseitigen Vorteil zusammenzuführen.

Nicht zu unterschätzen ist dabei natürlich die Öffentlichkeits-Wirkung: Das Bild einer von Grünspan überzogenen Statue oder einer von Ausblühungen überzogenen antiken Vase ist einfach viel publikumswirksamer als ein graues Pülverchen in einer Glaskapillare. Dieser Aspekt der Arbeit von Herrn Bette kommt nicht zuletzt in Zeitungsartikeln wie „Nachrichten aus der Chemie“ und auf Titelseiten von renommierten Fachzeitschriften (zuletzt bei „European Journal of Inorganic Chemistry“) zum Ausdruck.

Lassen Sie mich nun den bisherigen Lebenslauf von Herrn Bette ein wenig ausführen: Herr Bette wurde am 17.07.1986 in Lutherstadt Wittenberg geboren. Nach dem Gymnasium, das er mit einer Abiturnote von 1,0 abschloss und dem Grundwehrdienst als Panzergrenadier begann er an der TU Freiberg ein Chemiestudium, das er 2016 als Dr. rer. nat. mit der Gesamtnote *summa cum laude* beendete. Thema der Promotion war: „Über basische Chloride des Nickel(II) und Magnesiums – Strukturen, Phasenbildung und Löslichkeit“. Es war die Beschäftigung mit den Sorel-Zementen und Magnesiumsalzen, die Herrn Bette für mehrere Forschungsaufenthalte zu mir ans Max-Planck-Institut für Festkörperforschung führte. Während dieser Forschungsaufenthalte hat Herr Bette nicht nur Strukturlösungstechniken aus Röntgenpulverdaten erlernt, sondern auch einen vielbeachteten Rekursionsalgorithmus zum Modellieren von Stapelfehlern für das Programm TOPAS entwickelt.

Nach seiner Promotion forschte Herr Bette als wissenschaftlicher Mitarbeiter ein Jahr am Institut für Quantenmaterialien und funktioneller Materie der Universität Stuttgart an der Charakterisierung von stapelfehlerbehafteten Iridaten. Seit 2018 dann als wissenschaftlicher Mitarbeiter der Akademie der bildenden Künste, Stuttgart, unter anderem an der Synthese und Charakterisierung von Korrosionsprodukten und historischen Pigmenten. In beiden Fällen in

enger Zusammenarbeit mit der wissenschaftlichen Einrichtung Röntgenographie des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung.

Herr Bette hat ein stetig ansteigendes Portfolio von bisher 25 Publikationen in meist hochrangigen Zeitschriften wie *Nature*, *Science*, *Chemistry of Materials*, *Phys. Rev. B*, *European Journal of Inorganic Chemistry*, *Dalton Transactions*, *Corrosion Science* um nur einige zu nennen. Auch die Zahl von bisher 15 eingeladenen Vorträgen auf Fachtagungen ist beachtlich.

Der „Waltrude und Friedrich Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität in der Kristallographie“ ist nicht die erste Auszeichnung, die Herr Bette in seinem Leben bekommen hat. Zu erwähnen wären der H. C. Starck Promotionspreis verliehen von der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung der GDCh, der Ferdinand-Reich-Preis verliehen von der Fakultät für Chemie und Physik der TU Bergakademie Freiberg, der GDCh Abiturientenpreis (2006) und nicht zuletzt die mehrjährige Förderung durch die Studienstiftung des Deutschen Volkes.

Herr Bette ist anorganischer Chemiker mit Leib und Seele, der sich intensiv in die Kristallographie, insbesondere die Pulverdiffraktometrie eingearbeitet hat. Von großem Vorteil waren ihm dabei seine sehr guten Kenntnisse in Mathematik und Physik.

Herr Bette konnte mit kristallographischen Methoden einige grundlegende, teilweise seit über 100 Jahren bestehende Probleme der Restaurationswissenschaften lösen. Dabei ging es nicht nur um die Aufklärung der Kristallstrukturen aus teilweise sehr kleinen Mengen feinkristalliner Pulver von Korrosionsprodukten an kunsthistorischen Objekten, sondern auch um Fragen des Bildungsmechanismus, der Vermeidung von Korrosion und „last but not least“ der Entdeckung von Fälschungen. Herr Bette hat viele der von ihm untersuchten Verbindungen nachsynthetisiert. Das betrifft sowohl die als Grünspane bekannten Cu-Acetat-Verbindungen, verschiedenste Salzausblühungen an kalziumhaltigen Objekten, als auch komplexe Materialien, die an der Kontaktzone von Glas und Metall entstehen. In einigen Fällen wurden dabei vollkommen neue Substanzklassen mit teilweise erstaunlichen Eigenschaften entdeckt, deren Erforschung genügend Stoff für mehrere Master- und Doktorarbeiten bietet.

Nicht zuletzt wegen der Arbeit „Glass-Induced Lead Corrosion of Heritage Objects: Structural Characterization of $K(OH) \cdot 2PbCO_3$ “, die 2017 in *Inorganic Chemistry* erschienen ist, bin ich mir absolut sicher, dass Herr Liebau seine besondere Freude an diesem Preisträger gehabt hätte. Der Preis der „Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie“ soll ja explizit dazu beitragen, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen.

Es ist mir eine besondere Freude zu erwähnen, dass Herr Bette sich entschieden hat an der Universität Stuttgart zu habilitieren und ich bin sicher, dass sein weiterer Weg in der Wissenschaft sehr erfolgreich sein wird.

Lieber Sebastian, ich beglückwünsche Dich noch einmal von ganzem Herzen zu diesem wichtigen Preis und wünsche Dir für Deinen weiteren Lebensweg weiterhin so viel Erfolg wie bisher und eine nie nachlassende Freude am Forschen.

Robert Dinnebier, Stuttgart

ERWIN-FELIX-LEWY-BERTAUT-PREIS AN MATTHIAS ZSCHORNAK

IN ANERKENNUNG SEINER HERAUSRAGENDEN BEITRÄGE ZUR ENTWICKLUNG
DER RESONANTEN RÖNTGENBEUGUNG, ZU STRUKTURSTUDIEN VON
PEROWSKITEN UND ZU UMFANGREICHEN ELEKTRONISCHEN
BERECHNUNGEN, DIE EIN UMFASSENDES PHYSIKALISCHES VERSTÄNDNIS
DER EIGENSCHAFTEN WICHTIGER MATERIALIEN ERMÖGLICHEN



ECA-Präsidentin Alessia Bacchi, Matthias Zschornak und Udo Heinemann (von links)

Dr. Matthias Zschornak vom Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg wurde auf der Jahrestagung der *European Crystallographic Association* (ECA) am 24. August 2018 in Oviedo, Spanien der 9. Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis für Nachwuchswissenschaftler verliehen. Mit dem Preis ehrt die ECA zusammen mit der *European Neutron Scattering Association* (ENSA) seine herausragenden Beiträge zur Entwicklung der resonanten Röntgenbeugung, zu Strukturstudien von Perowskiten und zu umfangreichen elektronischen Berechnungen, die ein umfassendes physikalisches Verständnis der Eigenschaften wichtiger Materialien ermöglichen.

Dr. Zschornak diplomierte im Jahr 2008 in Physik an der TU Dresden bei Prof. Dr. Peter Paufler und Prof. Dr. Dirk C. Meyer. Daraufgehend gehörte er der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Sibylle Gemming am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf an, der er als externer Wissenschaftler insbesondere hinsichtlich der Modellierung der elektronischen Struktur in Kristallen bis heute aktiv verbunden ist. Im Jahr 2010 folgte er Prof. Dr. Dirk C. Meyer an die TU Bergakademie Freiberg, wo er im Jahr 2015 seine Promotion mit dem Prädikat *summa*

cum laude abschloss. Im Verlauf der Jahre bearbeitete Dr. Zschornak erfolgreich mehrere durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft und das Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderte Projekte. Am Institut für Experimentelle Physik in Freiberg ist Dr. Zschornak unter anderem für die Koordination von Forschungsaktivitäten an internationalen Synchrotronstrahlungsquellen wie der *European Synchrotron Radiation Facility* oder dem Deutschen Elektronensynchrotron in Hamburg verantwortlich.

Neben umfassenden Arbeiten zu oxidischen Funktionsmaterialien beschäftigt sich Dr. Zschornak fachlich auch mit kristallphysikalischen Prinzipien der Energiewandlung und -speicherung und arbeitet aktuell u. a. im BMBF-Verbundprojekt *R2R-Battery* zur Rolle-zu-Rolle-Fertigung elektrochemischer Energiespeicher. Dr. Zschornak ist aktives Mitglied der Deutschen Physikalischen Gesellschaft und der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.

Mit dem Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis werden seine Beiträge zur methodischen Weiterentwicklung der resonanten Röntgenbeugung gewürdigt, wobei erstmals die Nutzung partiell verbotener Reflexe zur Lösung des Phasenproblems demonstriert wurde. Damit konnten die atomaren Verrückungen in der Migrations-induzierten Feld-stabilisierten polaren Phase von SrTiO_3 mit Sub-Picometer-Genauigkeit bestimmt werden. Diese experimentellen Arbeiten werden von Dr. Zschornak immer durch Simulationen, z. B. per Dichtefunktionaltheorie oder Finite-Elemente-Methode, unterstützt, um eine belastbare physikalische Begründung für die Auswirkungen von Stöchiometrieänderungen auf elektronische, optische, mechanische und strukturelle Eigenschaften zu erhalten.

Luisa Rischer, Freiberg

ANKÜNDIGUNGEN

**POLSKIE TOWARZYSTWO
KRYSTALOGRAFICZNE
POLISH CRYSTALLOGRAPHIC
ASSOCIATION**



© promesaartstudio | Fotolia.com

JOINT POLISH-GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING 2020

JPGCM-2020

23–27 FEBRUARY 2020
WROCŁAW/BRESLAU
POLAND

conventus
CONGRESSMANAGEMENT

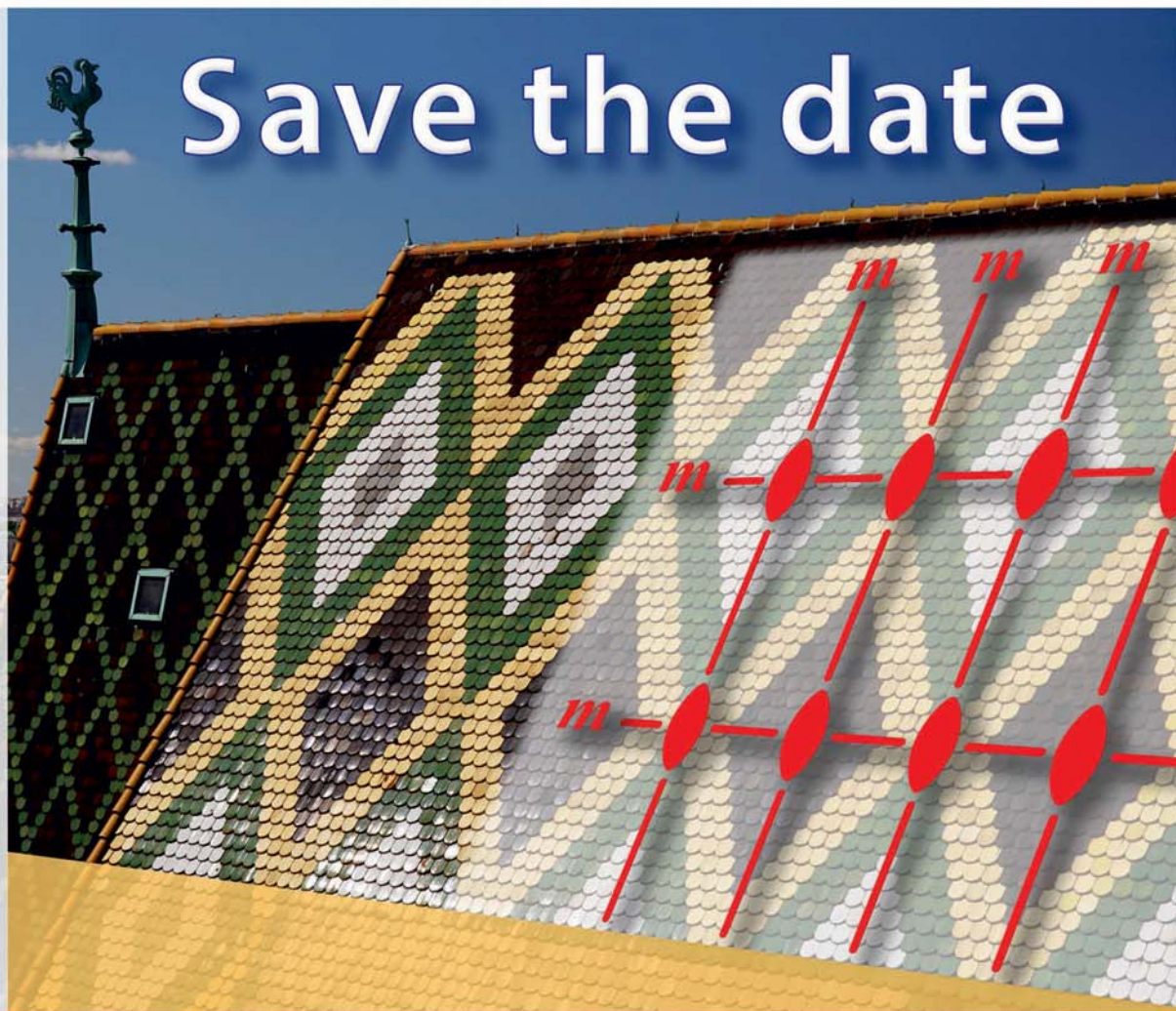
www.dgk-conference.de

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



ECM 32
VIENNA AUSTRIA 2019

Save the date



**Looking forward to welcoming
you at Vienna in August 2019 !**

Kristina Djinovic-Carugo
Klaudia Hradil
Ronald Miletich

On behalf of the Organising Committee



universität
wien



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna | Austria

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

BY AIR MAIL
par avion
Royal Mail®



European
Crystallographic
Association

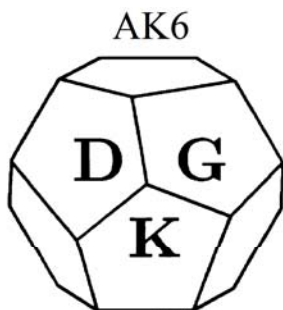


To

All Crystallographers
Considering to Participate in

ECM 32

18. – 23. 08. 2019, Vienna (Austria)

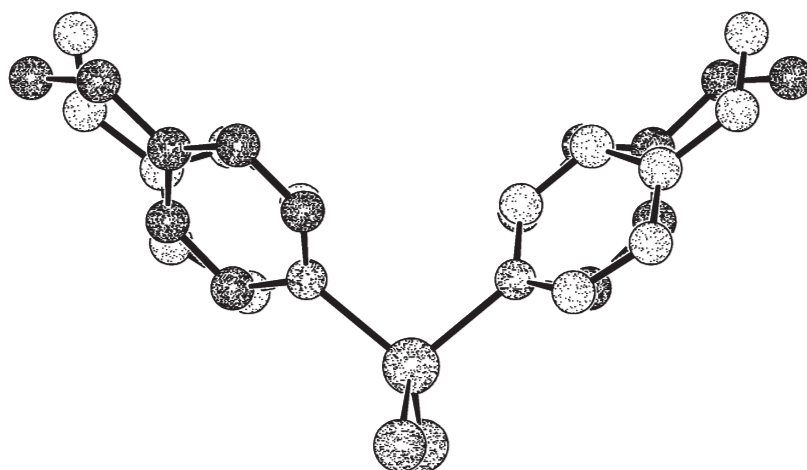


Molekülverbindungen



<http://dgk-home.de/aks/jkyc/shelx/>

Tipps & Tricks für SHELX



Zwilling?
Fehlordnung??
Constraints/Restraints???

18.09.2019, 14 Uhr bis 20.09.2019, 14 Uhr
Aachen, Institut für Anorganische Chemie

Mit freundlicher Unterstützung:



MERCK





The Commission on Aperiodic Crystals of the IUCr has decided to organize the 4th edition of the International School on Aperiodic Crystals (ISAC4). The school is jointly organised with the CNRS and European C-MetAC network.

The targeted audience is: PhD students, young or experienced scientists working in the field of crystallography, chemistry, material science or solid-state physics and willing to have a basic understanding of aperiodic crystals.

The school will be organized: from 8th to 14th of September 2019. The school will take place in Normandy, one of the 18 regions of France. Housing will be on-site in a holiday village located in Portbail.

Lectures: Superspace theory of modulated crystals, superspace theory of quasicrystals, phasons, aperiodic magnetic materials.

Tutorials: Structural analysis with Jana2006, Structural analysis of quasicrystals.

Organisers: O. Pérez, M. de Boissieu, S. van Smaalen, Ph. Boullay, E. Gaudry

Information available on the website of the school: <http://isac4.sciencesconf.org>





NEUTRON SCATTERING AND IMAGING FOR NEWCOMERS

SATELLITE AT ECM32, VIENNA

14TH TO 17TH AUGUST 2019

30 places are available for this exciting workshop. Please register early!
Free of charge for ECM32 participants.

Neutron Scattering is a very powerful method to investigate novel materials. Especially when focusing on magnetic properties or light atoms, neutron scattering is often the first-choice method. As neutron wavelength and neutron energy are simultaneously in the range of interatomic distances and nuclear or magnetic excitations, neutron scattering has proven to be a key technology in materials science.

We intend in this workshop to teach the basic techniques to the participants. This is essential to allow them to make the best use of these expensive large-scale facilities during their future career. Teaching the use of state-of-the-art data evaluation programs will round up this workshop.

Topics

Neutron Sources
Neutron Diffraction (Elastic, magnetic)
Inelastic Neutron Scattering
Biocrystallography
Diffuse Scattering
Magnetic Space Groups
Direct Methods
Combined Methods
Neutron Polarimetry
Neutron Imaging
Refinement Techniques
Single Crystal Refinement using JANA2006
Rietveld Powder Diffraction Refinement

Speakers

Stephan Allenspach, Geneva/PSI
Margarida Henriques, Prague
Anders Kaestner, PSI
Marc Janoschek, PSI
Astrid Schneidewind, JCNS@MLZ
Martin Meven, RTWH, JCNS@MLZ
Sebastian Mühlbauer, TUM
Reinhard Neder, Erlangen
Valodja Pomjakushin, PSI
Jürg Schefer, PSI
Tobias Schrader, JCNS@MLZ
Markus Strobl, PSI
Yaroslav Filinchuk, UCL Louvain

Funding and Support

This workshop is organized jointly by the German Crystallographic Society (DGK, AK7) and the Swiss Society for Crystallography (SGK) with kind support from the ECM32 organizing committee (Dr. K. Hradil), RWTH Aachen, Paul Scherrer Institute and SINE2020.

Organizers

Jürg Schefer (Paul Scherrer Institute, Switzerland)
Martin Meven (RWTH Aachen University and JCNS at Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Germany)

Please use the following page for registration:

www.ecm2019.org/satellites/neutron-scattering

MAX VON LAUE - PREIS 2020

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 sowie Mitglieder fachnaher und assoziierter Gesellschaften und andere interessierte Wissenschaftler!

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

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

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen des *Polish-German Crystallographic Meeting 2020* in Breslau statt.

Einsendeschluss: **30. November 2019**

Vielen Dank!

Alexandra Friedrich, Würzburg

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL - KLEBER - GEDENKMÜNZE 2020

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

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

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2019** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

Prof. Dr. Julia Dshemuchadse

Cornell University
Department of Materials Science and Engineering
Ithaca, NY, USA

E-Mail: jd732@cornell.edu

Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze:

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

Bisherige Preisträger:

- 2019 Michael Ruck
- 2018 Hermann Gies
- 2017 Peter Gille
- 2016 Sander van Smaalen
- 2015 Reinhard Neder
- 2014 Bernd Müller
- 2013 Helmut Klapper
- 2012 Helmuth Zimmermann
- 2010 Hans Boysen und Friedrich Frey
- 2009 Rudolf Allmann
- 2008 Joachim Bohm

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL-HERMANN-MEDAILLE 2020

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

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

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2019** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

PD Dr. Claudia Weidenthaler

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

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

Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille:

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

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

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

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

Der Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie ist mit 2000 € dotiert. Er wird auf dem Ehrenabend im Rahmen des *Polish-German Crystallographic Meeting 2020* in Breslau überreicht.

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

Vorschläge mit kurzer Begründung werden bis Freitag, den 29. November 2019, erbeten und sind per E-Mail bei dem Vorsitzenden der Preiskommission (Prof. Dr. Wulf Depmeier, Universität Kiel, wulf.depmeier@ifg.uni-kiel.de) einzureichen.

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

Wulf Depmeier, Kiel

TAGUNGEN UND TERMINE

September 2019

- 29.08. – 04.09.2019 **CIFiesta. AIC International Crystallography School 2019**
in Neapel (Italien)
Kontakt: <http://www.cristallografia.org/aicschool2019>
- 31.08. – 01.09.2019 **Traps in Mineralogy**
in Perth (Australien)
Kontakt: <http://www.minsocwa.org.au/images/flyerB-2019.jpg>
- 01.09. – 04.09.2019 **17th ECSSC European Conference on Solid State Chemistry**
in Lille (Frankreich)
Kontakt: <https://ecssc17.com>
- 01.09. – 06.09.2019 **Energy Science – an Interdisciplinary Challenge**
in Bad Honnef (Deutschland)
Kontakt:
<https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2019/bad-honnef-physics-school-energy-science-an-interdisciplinary-challenge-1>
- 01.09. – 06.09.2019 **57th European High Pressure Research Group Meeting on High Pressure Science and Technology**
in Prag (Tschechien)
Kontakt: <https://ehprg2019.org>
- 01.09. – 07.09.2019 **CCP4/BCA Protein Crystallography Summer School**
in York (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <https://synergy.st-andrews.ac.uk/proteincrystallography>
- 02.09. – 06.09.2019 **1st International Conference on Non-Covalent Interactions**
in Lissabon (Portugal)
Kontakt: <http://icni2019.eventos.chemistry.pt>
- 02.09. – 06.09.2019 **Cross-Scale Biological Structure: From Macromolecular Complexes and Organelles to Cells and Tissues. Cold Spring Harbor Asia meeting**
in Suzhou (China)
Kontakt: <https://www.csh-asia.org/2019meetings/structur.html>
- 02.09. – 06.09.2019 **Neutrons and Muons for Magnetism**
in Ispra (Italien)
Kontakt: <http://www.sisn.it/nmm19>

- 02.09. – 12.09.2019 **EMBO practical course on Image Processing for cryo EM**
in London (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <http://meetings.embo.org/event/19-cryo-em>
- 02.09. – 13.09.2019 **16th Oxford School on Neutron Scattering**
in Oxford (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <http://www.oxfordneutronschool.org>
- 02.09. – 13.09.2019 **23rd Laboratory Course on Neutron Scattering**
in Jülich/Garching (Deutschland)
Kontakt: http://www.fz-juelich.de/jcms/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/LabCourse/_node.html
- 04.09. – 06.09.2019 **7th Annual CCPBioSim Conference – Frontiers in Biomolecular Simulation**
in Bristol (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <http://www.ccpbiosim.ac.uk/ccpbiosim2019>
- 07.09. – 10.09.2019 **2019 Computational Structural Bioinformatics Workshop (CSBW)**
in Niagara Falls (NY, USA)
Kontakt: <http://www.cs.odu.edu/~bioinfo>
- 07.09. – 20.09.2019 **3rd Nordic-Baltic School in Neutron Scattering**
in Tartu (Estland)
Kontakt: <https://indico.nbi.ku.dk/event/1253>
- 08.09. – 14.09.2019 **Fourth International School on Aperiodic Crystals**
in Cabourg (Frankreich)
Kontakt: <https://isac4.sciencesconf.org>
- 09.09. – 13.09.2019 **WMESS. 5th World Multidisciplinary Earth Sciences Symposium**
in Prag (Tschechien)
Kontakt: <http://mess-earth.org/index.html>
- 09.09. – 13.09.2019 **XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry**
in Sankt Petersburg (Russland)
Kontakt: <http://mendeleev2019.ru/index.php/en>
- 09.09. – 20.09.2019 **School on Biophysical Approaches to Macromolecules and Cells: Integrated Tools for Life Sciences and Medicine**
in Arusha (Tansania)
Kontakt: <http://indico.ictp.it/event/8718>
- 10.09. – 13.09.2019 **DSEC VI Directionally Solidified Eutectics Conference**
in Fisciano (Italien)
Kontakt: <http://dsec6.physics.unisa.it>

- 10.09. – 13.09.2019 **Celebrating D.I. Mendeleev's Periodic System. A Historical Perspective**
in Sankt Petersburg (Russland)
Kontakt: <https://www.euchems.eu/events/celebrating-d-i-mendeleevs-periodic-system-a-historical-perspective>
- 12.09. – 14.09.2019 **HEC22. 22nd Heart of Europe Bio-crystallography Meeting**
in Oberurgl (Österreich)
Kontakt: <https://hec22.i-med.ac.at>
- 15.09. – 18.09.2019 **GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2019**
in Aachen (Deutschland)
Kontakt: <http://www.wifo2019-aachen.de>
- 16.09. – 18.09.2019 **International Conference on Materials Science and Engineering**
in Melbourne (Australien)
Kontakt: <https://www.materialsconferenceaustralia.com>
- 16.09. – 20.09.2019 **Neutrons for membrane biophysics**
in Garching (Deutschland)
Kontakt: www.fz-juelich.de/jcms/SINE2020
- 19.09. – 23.09.2019 **Wodil 2019: 8th French-German Workshop on Oxide, Dielectric and Laser single crystal**
in Lyon (Frankreich)
Kontakt: <https://www.afc.asso.fr/images/pdf/WODIL2019-Eng.pdf>
- 22.09. – 25.09.2019 **GeoMünster 2019 "Earth! Past, Present, Future"**
in Münster (Deutschland)
Kontakt: <http://www.geomuenster2019.de>
- 23.09. – 25.09.2019 **ESRF-EBS Workshop Series: Emerging Synchrotron Techniques for Characterisation of Energy Materials and Devices**
in Grenoble (Frankreich)
Kontakt: <http://www.esrf.eu/home/events/conferences/2019/energy-materials-workshop.html>
- 23.09. – 26.09.2019 **J-PARC Symposium 2019**
in Tsukuba (Japan)
Kontakt: <http://j-parc.jp/symposium/j-parc2019>
- 23.09. – 27.09.2019 **EMBO Practical Course: Small Angle Neutron and X-ray Scattering from Biomacromolecules in Solution**
in Grenoble (Frankreich)
Kontakt: <http://meetings.embo.org/event/19-small-angle-scattering>

- 24.09. – 25.09.2019 **International SAXS Symposium 2019: SAXS excites**
in Graz (Österreich)
Kontakt: <https://www.anton-paar.com/tu-graz/saxs-excites>
- 25.09.2019 **Good Research Practice**
in Frankfurt am Main (Deutschland)
Kontakt: <https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=8802>
- 26.09. – 27.09.2019 **Workshop on Perspectives and Applications of Deep Learning for Accelerated Scientific Discovery at Next Generation X-ray and Neutron Sources**
in Kopenhagen (Dänemark)
Kontakt: <https://indico.nbi.ku.dk/event/1256>
- 30.09. – 02.10.2019 **Workshop Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie**
in Dresden (Deutschland)
Kontakt: <https://www.cpfs.mpg.de/symmetrie2019>
- 30.09. – 03.10.2019 **EXPO&more International Workshop**
in Bari (Italien)
Kontakt: <http://www.ba.ic.cnr.it/expo-more-workshop2019>

Oktober 2019

- 01.10. – 06.10.2019 **Hot Topics in Contemporary Crystallography 4 Structural Biology**
in Dubrovnik (Kroatien)
Kontakt: <http://htcc4.org>
- 01.10. – 06.10.2019 **II School of the Latin American Crystallographic Association (LACA)**
in Bucaramanga (Kolumbien)
Kontakt: <http://ciencias.uis.edu.co/ivlaca2019>
- 07.10. – 09.10.2019 **EMBO Workshop: Tools for Structural Biology of Membrane Proteins**
in Hamburg (Deutschland)
Kontakt: <http://www.embl-hamburg.de/training/events/2019/TBP19-01>
- 07.10. – 10.10.2019 **NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung**
in Frankfurt am Main (Deutschland)
Kontakt: <https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=8786>

- 07.10. – 10.10.2019 **1st French Congress on Integrative Structural Biology**
in Toulouse (Frankreich)
Kontakt: <http://bsi-2019.ipbs.fr>
- 07.10. – 10.10.2019 **IV Meeting of the Latin American Crystallographic Association**
in Bucaramanga (Kolumbien)
Kontakt: <http://ciencias.uis.edu.co/ivlaca2019>
- 07.10. – 10.10.2019 **JCNS Workshop 2019 Trends and Perspectives in Neutron Instrumentation: Probing Structure and Dynamics in Soft Matter**
in Tutzing (Deutschland)
Kontakt: <http://www.fz-juelich.de/jcns/JCNS-Workshop2019>
- 08.10. – 10.10.2019 **Computational Approaches in Integration of Structural Biology Techniques. Instruct-ERIC workshop**
in Vestec (Tschechien)
Kontakt: <http://www.ibt.cas.cz/sd/udalosti/kalendar/191008-Instruct-ERIC-workshop.html>
- 10.10. – 11.10.2019 **Postrevolution Cryo-EM: Reaping the benefits while looking to the future**
in Stockholm (Schweden)
Kontakt: <https://www.scilifelab.se/events/postrevolution-cryo-em-reaping-the-benefits-while-looking-to-the-future>
- 15.10. – 30.10.2019 **CSHL X-ray Methods in Structural Biology Course**
in Cold Spring Harbor (NY, USA)
Kontakt: <https://meetings.cshl.edu/courses.aspx?course=C-CRYS&year=19>
- 17.10. – 20.10.2019 **6th International Symposium on Diffraction Structural Biology (ISDSB2019)**
in Osaka (Japan)
Kontakt: <https://isdsb2019.symposium-hp.jp>
- 21.10. – 26.10.2019 **2019 ILL Annual School on Neutron Diffraction Data Treatment**
in Grenoble (Frankreich)
Kontakt: https://workshops.ill.fr/e/FullProf_School_2019
- 24.10. – 26.10.2019 **The 77th Annual Pittsburgh Diffraction Conference**
in Oak Ridge (TN, USA)
Kontakt: <https://conference.sns.gov/event/78>
- 30.10.2019 **Energiewendesymposium**
in Frankfurt am Main (Deutschland)
Kontakt: <http://www.gdch.de/energiewende2019>

November 2019

- 03.11. – 05.11.2019 **PSDI2019. 27th Protein Structure Determination in Industry Meeting**
in Hinxton (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <https://psdi2019.org>
- 03.11. – 09.11.2019 **EMBO Course "Practical Integrative Structural Biology"**
in Hamburg (Deutschland)
Kontakt: <http://meetings.embo.org/event/19-integrative-structural-biology>
- 04.11. – 05.11.2019 **Engineering recombinant proteins for structural and functional studies**
in London (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <https://biochemistry.org/events/engineering-recombinant-proteins-for-structural-and-functional-studies>
- 13.11. – 15.11.2019 **eBIC's 2019 Cryo-EM Sample Preparation Workshop**
in Didcot (Vereinigtes Königreich)
Kontakt: <https://www.diamond.ac.uk/Home/Events/2019/Cryo-EM-Sample-Preparation-Workshop-2019.html>
- 16.11. – 21.11.2019 **Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering**
in Ken-Ting National Park (Taiwan)
Kontakt: <https://www.aocns2019.org>
- 19.11. – 22.11.2019 **X-Rays and Matter**
in Villers-les-Nancy (Frankreich)
Kontakt: <http://www.rayonsxetmatiere.org>
- 20.11. – 22.11.2019 **GISAXS 2019**
in Hamburg (Deutschland)
Kontakt: <http://gisaxs2019.desy.de>
- 27.11. – 28.11.2019 **Big Data – Grundlagen, Methoden und praktische Umsetzung**
in Frankfurt am Main (Deutschland)
Kontakt: <https://veranstaltungen.gdch.de/tms/frontend/index.cfm?l=8816>

Dezember 2019

- 01.12. – 06.12.2019 **Advanced Materials Exploration with Neutrons**
in Boston (MA, United States of America)
Kontakt: <https://mrs.org/fall2019/call-for-papers/call-for-papers-detail?code=MT04>

- 03.12.2019 **A quantum-chemical view on coordination chemistry: spectroscopy, catalysis, and bonding**
in Kaiserslautern (Deutschland)
Kontakt: www.gdch.de/ovv
- 09.12. – 13.12.2019 **American Geophysical Union Fall Meeting**
in San Francisco (CA, USA)
Kontakt: <https://meetings.agu.org/fall-meeting-2019>
- 11.12. – 13.12.2019 **BILL2019: Bilayers at the ILL Workshop**
in Grenoble (Frankreich)
Kontakt: <https://workshops.ill.fr/event/199>
- 17.12. – 20.12.2019 **16th Conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA2019)**
in Singapur (Singapur)
Kontakt: <https://asca2019.org>

Überblick 2020

- 26.02. – 28.02.2020 **Materials Science & Nanotechnology Conference**
in Lissabon (Portugal)
Kontakt: <https://materialsconference.yuktan.com>
- 13.01.2020 **Material aspects of alternative energy stores: Sodium-ion and solid-state batteries**
in Jena (Deutschland)
Kontakt: www.gdch.de/ovv
- 23.02. – 27.02.2020 **Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020**
in Wrocław/Breslau (Polen)
Kontakt: <https://www.dgk-conference.de>
- 15.03. – 20.03.2020 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie**
in Dresden (Deutschland)
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2020/dpg-fruehjahrstagung-der-sektion-kondensierte-materie>
- 19.07. – 24.07.2020 **Gordon Conference on Research at High Pressure**
in Holderness (NH, United States of America)
Kontakt: <https://www.grc.org/research-at-high-pressure-conference/2020>

- 22.08. – 30.08.2020 **Twenty-Fifth Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography**
in Prag (Tschechien)
Kontakt: <http://www.iucr25.org>
- 06.09. – 10.09.2020 **3rd European Mineralogical Conference**
in Krakau (Polen)
Kontakt: <https://emc2020.ptmin.eu/>
- September 2020 **3rd Meeting of the Young Crystallographers / Junge Kristallographen**
in Freiberg (Deutschland)
Kontakt: <https://dgk-home.de/aks/jkyc/>

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

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

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

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

<http://www.dmq-home.org>

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

WWW-Redakteur:

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

DMG-Mailingliste: Dr. Ralf Milke – milke@zedat.fu-berlin.de

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

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

<http://www.dgkk.de>

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

WWW-Administratoren:

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

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

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

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

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

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

Name: Vorname(n):

Geburtsdatum:

Dienstanschrift*:

Universität/Firma:

Institut/Abteilung:

Straße:

Ort: PLZ: Land (falls ≠ D):

Telefon: E-Mail:

Privatanschrift*:

Straße:

Ort: PLZ: Land (falls ≠ D):

Telefon: E-Mail:

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

Jahresbeitrag :

Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung.

Die Bankverbindung der DGK ist:

Sparda-Bank Hamburg, IBAN: DE83 2069 0500 0000 6085 99, SWIFT (BIC): GENODEF1S11

Bevorzugt sollte die Beitragszahlung über Bankeinzug erfolgen.

Füllen Sie dazu bitte die umseitige Einzugsermächtigung aus.

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

Ort, Datum: Unterschrift:

Einzugsermächtigung

Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK: DE48ZZZ00001148361

Mandatsreferenz: wird separat mitgeteilt

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

Kontoinhaber Name:
(wie bei der Bank angegeben)

Bankinstitut:

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

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

Ort, Datum: Unterschrift:

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

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

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

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

* Die Spende wird für das Preisgeld für den Max-von-Laue-Preis für hervorragende Leistungen von Nachwuchswissenschaftlern und -wissenschaftlerinnen verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen und nicht spenden möchten, können jederzeit gegenüber dem Schatzmeister von ihrem Widerspruchsrecht Gebrauch machen.

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

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

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

Das Formular für eine schriftliche Einzugsermächtigung findet sich unter folgender URL:

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

Die Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK lautet DE48ZZZ00001148361. Die Mandatsreferenz lautet DGK-#####, wobei ##### für die persönliche Mitgliedsnummer ergänzt durch führende Nullen steht.

Die Mitgliedsbeiträge für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. (Steuernummer 162/141/20724) sind mit Steuerbescheid vom 29.05.2019 des Finanzamts Jena 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 26. März 2019 in Leipzig beschlossen.

DATENSCHUTZERKLÄRUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE BEZÜGLICH PERSONENBEZOGENER MITGLIEDERDATEN

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

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

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

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

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

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