





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 GbR, Crystal Maker Software Ltd., Dectris Ltd., ELDICO Scientific AG, Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Jena Bioscience GmbH, Malvern Panalytical Ltd., Rigaku Europe SE, Röntgenlabor Dr. Ernrich, 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: Dr. Melanie Nentwich, melanie.nentwich@desy.de

Herstellung: Dr. Hartmut Stöcker, hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de

Druck und Bindung:

UNIdruckerei.de, Inh. Dipl.-Kfm. (FH) Bert Buschmann

Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351 3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

Vorsitzender: Prof. Dr. Thomas Schleid
Universität Stuttgart, Institut für Anorganische Chemie
Pfaffenwaldring 55, 70569 Stuttgart
Tel: 0711 685 64240, Fax: 0711 685 64241
E-Mail: schleid@iac.uni-stuttgart.de

Stellvertretender 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

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

Vorsitzender des Nationalkomitees: Prof. Dr. Thorsten M. Gesing
Universität Bremen, Institut für Anorganische Chemie & Kristallographie
Leobener Straße 7, 28359 Bremen
Tel.: 0421 218 63140, Fax: 0421 218 63145
E-Mail: gesing@uni-bremen.de

Vertreter der DMG: Prof. Dr. Jürgen Schreuer
Ruhr-Universität Bochum, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik
Universitätsstraße 150, 44780 Bochum
Tel: 0234 322 4381, Fax: 0234 321 4433
E-Mail: schreuer@rub.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 Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

als mich mein Amtsvorgänger, Prof. Dr. Ralf Ficner von der Universität Göttingen, zu Beginn des Jahres 2021 fragte, ob ich mir vorstellen könnte, den Vorsitz der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) zu übernehmen, habe ich mir zunächst ein paar Tage Bedenkzeit ausgeben. Einen eingetragenen Verein mit über 1000 Mitgliedern zu leiten, der sich der Förderung der kristallographischen Wissenschaften und der Forschung verschrieben hat, würde sicher nicht einfach werden. Welche Gründe sprechen überhaupt für mich? Ich bin doch nur dilettierender Kristallographie-Nutzer, war aber immerhin schon als Doktorand bei einigen AGKr-Tagungen dabei und später als Professor für Anorganische Chemie mit Spezialgebiet Festkörperchemie auf fast allen DGK-Jahrestagungen seit 1993. Dilettant heißt nach dem italienischen *dilettante* Kunstliebhaber, zumal *dilettare* im Sinne von erfreuen noch deutlicher aufzeigt, warum auf mich die Kunst der Kristallographie inspirierend wirkt, um anorganische Festkörperstrukturen mit möglichst wenigen Parametern so treffend und präzise zu beschreiben. Der Dilettant in Sachen Kristallographie hat aber nur unter der Bedingung zugestimmt, dass Dr. Daniel Töbrens als Schriftführer und Prof. Dr. Christian Lehmann als Schatzmeister erhalten bleiben, damit das DGK-Schiff auch weiterhin auf Kurs schwimmen kann.

Aufgrund der Corona-Pandemie musste die 29. DGK-Tagung vom 15. bis 18. März 2021 in Hamburg als Online-Konferenz stattfinden, wobei es dem engagierten Organisationsteam um Prof. Dr. Edgar Weckert vom DESY dennoch ganz hervorragend gelungen ist, den Teilnehmern etwas Tagungsflair zu vermitteln. Die 25. IUCr-Konferenz vom 14. bis 22. August 2021 in Prag ist als Hybrid-Konferenz (IUCr 25) deklariert und ich freue mich schon darauf, *on site* mit dabei sein zu können. Einmal mehr hat die DGK dazu Reisestipendien ausgelobt und damit vier jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern die Teilnahme ermöglicht. Mit ebenfalls einjähriger Verspätung wird das 33. *European Crystallographic Meeting* (ECM 33) vom 24. bis 28. August 2022 in Versailles ausgetragen. Bis dahin müsste eine komplette Präsenzveranstaltung hoffentlich auch international wieder möglich sein.

Zuvor soll aber die nächste DGK-Tagung, die 30. also, vom 14. bis 17. März 2022 auf historischem Boden stattfinden, nämlich in München, wo 1912 nicht nur das Laue-Experiment zur Röntgenbeugung an Kristallen Geschichte geschrieben hat, was zur Austragung der 20. DGK-Jahrestagung im Jahre 2012 führte, sondern 1991 auch die letzte schismatische AGKr-Tagung zur Loslösung von der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) stattfand, die gleichzeitig aber auch im Zeichen der Wiedervereinigung der kristallographischen Vereine beider deutschen Staaten – der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie (AGKr) der BRD und der Vereinigung für Kristallographie (VfK) der DDR – stand.

Wie üblich sind als alljährlich zu vergebende Preise der DGK die Carl-Hermann-Medaille, der Max-von-Laue-Preis, die Will-Kleber-Gedenkmünze und der Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis ausgeschrieben, doch ab 2022 kommt der Lieselotte-Templeton-Preis für hervorragende studentische Abschlussarbeiten mit kristallographischer Relevanz neu hinzu, was vor allem dem Betreiben der „Jungen Kristallographen“ zu verdanken ist. An dieser Stelle sei um konstruktive Vorschläge für alle fünf Preise geworben.

Abschließend erlaube ich mir den Wunsch, dass die Corona-Pandemie global abebben und auch mit ihren ansteckenderen Virus-Varianten nicht lebensbedrohlicher werden möge als eine atmische Grippe! In diesem Sinne grüße ich Sie herzlich und wünsche Ihnen viel Gesundheit.

Ihr
Thomas Schleid (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 16.03.2021	9
Anlage zu Punkt 6.2: Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees	18
Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters	20
Anlage zu Punkt 6.5: Bericht der Kassenprüfer	23
Anlage zu Punkt 6.6: Bericht des Vertreters der DGK im Vorstand der DMG	25
Anlage zu Punkt 6.7: Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand & Bericht des Vertreters der DGK in der DPG	27
Satzung für den Lieselotte-Templeton-Preis	29
Einrichtung des Lieselotte-Templeton-Preises für Studierende	31
Rückblick auf die 29. Jahrestagung der DGK	36
Buchrezension: „Will Kleber – Einführung in die Kristallographie“	38

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“	47
--	----

Personalia:

Jubilare 2021	55
Verstorbene Mitglieder	57
Max-von-Laue-Preis 2021 an Dorothee Liebschner	58
Will-Kleber-Gedenkmünze 2021 an Manfred Weiss	60
Carl-Hermann-Medaille 2021 an Karl Fischer	63
Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2020 an Gilberto Artioli	75
Heinrich Arnold	79
Ekkehart Tillmanns	81

Hans Boysen	87
Tibor Koritsanszky	89
Otto Wilhelm Flörke	91
Ankündigungen:	
30th Annual Conference of the German Crystallographic Society	97
DGK2022 Satellite Workshop Announcement	99
Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2022	101
Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2022	103
Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2022	105
Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie	107
Ausschreibung Lieselotte-Templeton-Preis 2022	109
Tagungen und Termine	110
Homepages von DGK, DMG und DGKK	114
Aufnahmeformular	115
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	117
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten	118

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

AM 16.03.2021

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen der 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie statt und wurde wie diese als Videokonferenz durchgeführt.

Hierfür wurde eine professionelle Version von Zoom Webinar verwendet. Die Durchführung erfolgte mit technischer Unterstützung durch die Conventus Congressmanagement & Marketing GmbH. Die Prüfung der Teilnahmeberechtigung erfolgte durch Abgleich der E-Mail-Adresse mit der in der Mitgliederdatenbank der DGK hinterlegten Adresse. Hierbei war eine Korrektur noch bis nach Beginn der Mitgliederversammlung möglich.

Abstimmungen und Wahlen wurden mit Hilfe der von Zoom Webinar bereitgestellten Funktionen durchgeführt. Zusätzlich zur manuellen Protokollierung der Ergebnisse stellen diese Funktionen ein anonymisiertes Wahlprotokoll bereit. Dieses erlaubt es, nachträglich Stimmzettel zu identifizieren und als ungültig zu entfernen, bei denen z. B. mehr als die zulässige Anzahl an Stimmen von einer Person abgegeben worden wäre. Diese Prüfung wurde vom technischen Personal von Conventus durchgeführt. Allerdings stellte sich heraus, dass alle abgegebenen Stimmzettel korrekt waren, sodass keine Korrektur der vorläufigen Wahlergebnisse nötig war.

Einfache Abstimmungen wurden mittels der „Hand heben“-Funktion durchgeführt. Bei dieser Methode besteht immer die Möglichkeit, dass einzelne Teilnehmer vergessen, diese wieder abzuschalten und so bei der Gegenprobe als Neinstimmen gezählt werden.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Ralf Ficner, eröffnet die Sitzung um 17:03 Uhr und begrüßt die anwesenden Mitglieder der DGK.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Es sind 97 Mitglieder anwesend. Nach § 9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 1037 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 52 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird unverändert angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 25.02.2020 in Breslau

Das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 25.02.2020 in Breslau, Polen wird – wie in Heft 50 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 wird eine Schweigeminute eingelegt.

6 Berichte

6.1 Bericht des Vorsitzenden

Ralf Ficner berichtet:

Mein Antrag an die DFG auf Bezahlung des Beitrags der DGK für die IUCr war erfolgreich, wobei es im letzten Jahr sehr viele Nachfragen seitens der DFG gab und ich schon die Befürchtung hatte, dass die DFG unseren Antrag ablehnen wird, was aber letztendlich dann nicht der Fall war.

Der Vorstand hat überprüft, welche Arbeitskreise der DGK in den letzten fünf Jahren keine Aktivitäten zeigten, um nun mit allen Arbeitskreisen eine Diskussion über die Zukunft der zuvor genannten Arbeitskreise zu führen. Dies betrifft u. a. die Arbeitskreise:

- AK 9 – Theoretische Kristallographie
- AK 10 – Mikroskopie
- AK 11 – Hochauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung
- AK 15 – Mineralogische und Technische Kristallographie
- AK 17 – Kristallographie in der Lehre

Nach der Vorstandssitzung im November hatte sich bereits eine kleine Diskussionsrunde mit mehreren Arbeitskreissprechern und -sprecherinnen gebildet, nämlich Frau Weidenthaler, Herrn Doert, Herrn Dinnebie, Herrn Meven, Herrn Schwarz und Frau Friese und diese Runde hat dem Vorstand ihre Ideen zur künftigen Re-Organisation der Arbeitskreise unterbreitet. Wir werden dies in den nächsten Monaten weiterverfolgen und gemeinsam mit den Arbeitskreisen eine neue Struktur erarbeiten, die wir dann bei der nächsten Mitgliederversammlung vorstellen möchten.

Ich habe die Koordinierung einer neuen Informationsbroschüre über die DGK und kristallographische Forschung in Deutschland übernommen. Hier werde ich in den nächsten Tagen auf alle Kollegen und Kolleginnen zukommen, die sich bereit erklärt hatten einen kurzen Beitrag zu verfassen.

6.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees

Der ausführliche Bericht von Ute Kolb ist angehängt.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet über die Entwicklung der Mitgliederzahlen. Die DGK hat aktuell insgesamt 1051 Mitglieder, davon 850 Vollmitglieder, 48 Studenten und Doktoranden, 135 Mitglieder im Ruhestand, 7 Ehrenmitglieder und 11 Institute und weitere unpersönliche Mitglieder. Von den persönlichen Mitgliedern sind 233 Damen und 804 Herren. Dies sind 19 Mitglieder weniger als vor einem Jahr.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann berichtet: Die Corona-Pandemie hat sich auch auf die finanziellen Aktivitäten der DGK ausgewirkt. Viele der geplanten Arbeitskreisaktivitäten sind ausgefallen und die bereits genehmigten Mittel wurden nicht abgerufen. Infolge der Verschiebung der IUCr-Tagung in Prag auf 2021 wurden auch keine Reisespenden bewilligt und ausgezahlt. Die Vergabe von zwei, über die Mitgliederspenden finanzierten Laue-Preise sowie die erfolgreiche Herausgabe des Mitteilungshefts stellten deshalb die größten Positionen auf der Ausgabenseite dar. Die Verwaltungskosten enthielten mit je knapp 600 € Zahlungen für die Geschäftsstelle und die Rechtsberatung anlässlich der Jahrestagung in Essen 2018. Des Weiteren musste unsere Vereinssoftware aktualisiert werden.

Da bei einer zunehmenden Zahl von Mitgliedern der Beitragseinzug in einer Rücklastschrift endete, wurden diese Mitglieder kontaktiert, Kontoverbindungen aktualisiert und Außenstände eingefordert. Die hierfür im Rahmen eines Werkvertrags angefallenen Kosten in Höhe von 400 € wurden durch zusätzliche Einnahmen in Höhe von über 1500 € bereits 2020 ausgeglichen, weitere Nachzahlungen von über 3000 € erfolgten von den Mitgliedern dann 2021. Erneut gab es erhebliche Probleme bei der routinemäßigen Abwicklung von Zahlungsaufträgen mit unserer Hausbank, der Sparda-Bank Hamburg. Nach einer Umstellung des Online-Bankingportals konnte dieses mehrere Wochen lang für uns als Vereinskunde nicht genutzt werden. Anschließend war es bis Jahresende nicht möglich Lastschriften bei der Bank einzureichen, weil unser Konto nicht für das neue FinTAN-Verfahren der Bank freigeschaltet werden konnte. In der Einnahmen-Überschussrechnung für 2020 findet sich in der Zeile Bankeinzug deshalb der Betrag 0,00 €. Die offenen Beiträge werden schrittweise Ihren Konten belastet. Zwischenzeitlich hat die DGK ein neues Bankkonto am Vereinssitz bei der Sparkasse Berlin eröffnet und wird den Zahlungsverkehr und die Geldanlage zu unserem neuen Geschäftspartner verlagern.

Aufgrund der oben dargelegten Gründe überstiegen die Ausgaben die Einnahmen für das Geschäftsjahr 2020 um knapp 10.000 €. Demgegenüber stehen allerdings offene Mitgliedsbeiträge von über 22.000 € sowie flüssige Mittel von über 27.000 € zum Stichtag 31.12.2020. Die Sondervermögen Max-von-Laue-Preis und Liebau-Stiftung sind im Bestand unverändert. Zusammen mit der neuen Geschäftsbank soll auf der Basis der beschlossenen Anlagerichtlinien eine ertragsorientierte Investition, der zusammen etwas weniger als 100.000 € betragenden Mittel, ausgearbeitet werden.

Die detaillierte Einnahmen-Überschussrechnung und die Jahresabschlüsse finden sich im Anhang.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch legen ihre Berichte zur Prüfung der Kassenunterlagen der DGK für das Geschäftsjahr 2020 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

Der ausführliche Bericht von Jürgen Schreuer ist angehängt.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand & Bericht des Vertreters der DGK in der DPG (in Personalunion)

Der ausführliche Bericht von David Rafaja ist angehängt.

6.8 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Die Redaktion der Mitteilungen dankt allen Autoren für ihre Beiträge und den Werbekunden für die Mitfinanzierung des Heftes. Für das nächste Heft laden wir wieder alle DGK-Mitglieder ein, das Heft aktiv zu gestalten. Redaktionsschluss wird wie in den vorherigen Jahren der 31. Mai sein.

6.9 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Die DGK-Homepage lebt von aktuellen Inhalten. Insbesondere die Arbeitskreise sind aufgerufen, ihre Aktivitäten auf der Webseite einzupflegen.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird mit 72 Stimmen, bei 3 Gegenstimmen entlastet.

8 Annahme der Beitragsordnung

Die von ordentlichen Mitgliedern und Mitgliedern im Ruhestand erbetene Spende in Höhe von 5 € wird zukünftig für den Liebau-Preis verwendet. Ansonsten bleibt die Beitragsordnung unverändert, wie am Ende dieses Heftes abgedruckt.

Diese Beitragsordnung wird mit 80 Stimmen, bei 2 Gegenstimmen angenommen.

9 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Die bisherigen Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch erklären ihre Bereitschaft, dieses Amt erneut zu übernehmen. Sie werden ohne Gegenstimmen wiedergewählt (Alexandra Friedrich: 89 Ja, 3 Enthaltungen, Ullrich Pietsch: 99 Ja, 1 Enthaltung).

10 Wahl des Vorstands

Es gab keine weiteren Kandidaturen zusätzlich zum satzungsgemäßen Vorschlag des amtierenden Vorstands. In den neuen Vorstand gewählt wurden:

- Vorsitzender: Thomas Schleid (Ja 84, Nein 2, Enthaltung 7)
- Stellvertretender Vorsitzender: Ralf Ficner (Ja 89, Nein 1, Enthaltung 0)
- Schriftführer: Daniel Többens (Ja 89, Nein 0, Enthaltung 2)
- Schatzmeister: Christian Lehmann (Ja 88, Nein 0, Enthaltung 4)

Im Anschluss an die Wahl wurde bemängelt, dass es jetzt kein weibliches Mitglied mehr im Vorstand gibt. Hierzu merkte Ralf Ficner an, dass im Vorfeld mehrere potentielle Kandidatinnen gefragt worden seien, diese aber alle eine Kandidatur abgelehnt hätten.

11 Wahlen zum Nationalkomitee

Insgesamt vier Mitglieder mussten gewählt werden. Andrzej Grzechnik und Thorsten Gesing verbleiben bis 2024 im Nationalkomitee. Yves Muller scheidet auf eigenen Wunsch vorzeitig aus dem Nationalkomitee aus. Aus diesem Grund war vor der regulären Wahl zuerst die Wahl eines Nachrücker notwendig. Diese Wahl erfolgt auf drei Jahre. Anders als bei der regulären Mitgliedschaft im Nationalkomitee ist eine direkte Wiederwahl möglich. Im Anschluss erfolgte die reguläre Wahl von drei Mitgliedern des Nationalkomitees auf sechs Jahre. Die Teilnahme an nur einer oder beiden Teilwahlen erfolgte auf Wunsch der jeweiligen Kandidaten.

11.1 Wahl eines Nachrücker in das Nationalkomitee

- Prof. Natalia Dubrovinskaia (Universität Bayreuth) 23 Stimmen
- Dr. Anna-Lena Hansen (Karlsruher Institut für Technologie) 41 Stimmen
- Prof. Hartmut Niemann (Universität Bielefeld) 12 Stimmen
- Dr. Stefan Stöber (Universität Halle) 5 Stimmen

Dr. Anna-Lena Hansen wurde als Nachrückerin auf drei Jahre in das Nationalkomitee gewählt.

11.2 Wahl von drei Mitgliedern des Nationalkomitees

- Prof. Natalia Dubrovinskaia (Universität Bayreuth) 39 Stimmen
- Dr. Helmut Ehrenberg (Karlsruher Institut für Technologie) 38 Stimmen
- Dr. Yasar Krysiak (Universität Hannover) 18 Stimmen
- Prof. Hartmut Niemann (Universität Bielefeld) 18 Stimmen
- Dr. Stefan Stöber (Universität Halle) 15 Stimmen
- Prof. Norbert Sträter (Universität Leipzig) 34 Stimmen
- Dr. Matthias Zschornak (TU Bergakademie Freiberg) 30 Stimmen

Prof. Natalia Dubrovinskaia, Dr. Helmut Ehrenberg und Prof. Norbert Sträter wurden in das Nationalkomitee gewählt.

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

Alle vier Mitglieder des Komitees für den Max-von-Laue-Preis mussten neu gewählt werden. Es wurde folgendermaßen abgestimmt:

- Prof. Leonid Dubrovinsky (Universität Bayreuth) 25 Stimmen
- Dr. Manuel Hinterstein (KIT) (Wiederwahl) 43 Stimmen
- Prof. Holger Kohlmann (Universität Leipzig) 38 Stimmen
- Dr. Hermann Schindelin (Universität Würzburg) (Wiederwahl) 42 Stimmen
- Prof. Björn Winkler (Universität Frankfurt) (Wiederwahl) 43 Stimmen
- Dr. Matthias Zschornak (TU Bergakademie Freiberg) 47 Stimmen

Dr. Manuel Hinterstein, Dr. Hermann Schindelin, Prof. Björn Winkler und Dr. Matthias Zschornak wurden in das Komitee für den Max-von-Laue-Preis gewählt.

13 Wahl zum Komitee für den Liebau-Preis

Alle drei Mitglieder des Komitees für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie mussten neu gewählt werden. Es wurde folgendermaßen abgestimmt:

- Prof. Thomas Doert (TU Dresden) 47 Stimmen
- Prof. Ullrich Englert (RWTH Aachen) (Wiederwahl) 60 Stimmen
- Prof. Volker Kahlenberg (Universität Innsbruck) 32 Stimmen
- Dr. Ulrich Schwarz (MPI Dresden) (Wiederwahl) 61 Stimmen

Prof. Thomas Doert, Prof. Ullrich Englert und Dr. Ulrich Schwarz wurden in das Komitee für den Liebau-Preis gewählt.

14 Neueinrichtung eines Studierendenpreises

14.1 Abstimmung zur Einrichtung eines Preises für Studierende

Die Abstimmung über die Einrichtung eines Preises für Studierende und die Abstimmung über die Satzung des Preises wurden als einzelne Abstimmungen durchgeführt. Ein Entwurf der Satzung war im Vorfeld allen Mitgliedern der DGK zugeschickt worden. Auf der Vorstandssitzung am 15. März 2021 war dieser noch einmal überarbeitet und der Umfang des Preises und das Prozedere der Nominierung und die Auswahlkriterien neu formuliert worden. Dieser Entwurf der Satzung wurde auf der Mitgliederversammlung diskutiert. Dabei wurde der Umfang des Preises noch ein weiteres Mal verändert: von einer „Übernahme von 50 % der Reisekosten gemäß Bundesreisekostengesetz“ auf eine „Übernahme der Reisekosten gemäß Bundesreisekostengesetz bis zu maximal 500 Euro“.

Die überarbeitete Satzung wurde von den Mitgliedern mit 68 Stimmen (ohne Gegenstimmen, 2 Enthaltungen) angenommen. Damit ist die Einrichtung eines Preises für Studierende beschlossen. Die Satzung des neuen Preises ist ab Seite 29 abgedruckt.

14.2 Abstimmung über den Namen des Studierendenpreises

Im Vorfeld der Mitgliederversammlung waren die Mitglieder der DGK aufgefordert, Vorschläge für den Namen des Studierendenpreises einzureichen. In einem leider zeitweilig etwas ungeordnetem Verfahren wurden diese zusammengestellt. Im Zuge der Diskussion in den Gremien der DGK wurde offensichtlich, dass einige der Vorschläge problematisch waren, da entweder bereits ein einschlägiger Preis dieses Namens existiert, eine rechts- oder linksextremistische ideologische Belastung nicht ausgeschlossen werden konnte, der Namensgeber noch lebte oder der Name Anlass zu unglücklichen Vergleichen gegeben hätte. Die Liste wurde deswegen auf der Vorstandssitzung am 15. März 2021 noch einmal ausgiebig diskutiert und eine verkürzte Liste erstellt. Die folgenden neun Vorschläge wurden der Mitgliederversammlung zur Abstimmung vorgelegt:

• Dorothy Crowfoot Hodgkin	10 Stimmen
• Rosalind Franklin	6 Stimmen
• Wolfgang Jeitschko	3 Stimmen
• Knipping-Friedrich-Preis	4 Stimmen
• Stephanie Kwolek	1 Stimmen
• Kathleen Lonsdale	6 Stimmen
• Barbara Wharton Low	0 Stimmen
• Lieselotte Templeton	26 Stimmen
• Young Crystallographer of the Year	15 Stimmen
• Enthaltung	4 Stimmen

Da kein Vorschlag eine absolute Mehrheit erzielt hatte, folgte wie angekündigt eine Stichwahl, bei der „Lieselotte Templeton“ mit 50 Stimmen gegen den Vorschlag „Young Crystallographer of the Year“ mit 21 Stimmen, bei 4 Enthaltungen gewann. Damit heißt der neu eingerichtete Preis für Studierende „Lieselotte-Templeton-Preis“. Bevor dies offiziell ist, soll aber noch die Zustimmung eventueller Nachfahren von Lieselotte Templeton eingeholt werden.

14.3 Wahl zum Komitee für den Studierendenpreis

Das Komitee für den Lieselotte-Templeton-Preis besteht satzungsgemäß neben dem Vorsitzenden der DGK und des Arbeitskreises Junge Kristallographen aus drei gewählten Mitgliedern. Es wurde folgendermaßen abgestimmt:

• Prof. Tobias Beck (Universität Hamburg)	39 Stimmen
• Dr. Joachim Breternitz (Helmholtz-Zentrum Berlin)	27 Stimmen
• Dr. Michael Fischer (Universität Bremen)	28 Stimmen
• Prof. Holger Kohlmann (Universität Leipzig)	40 Stimmen
• Dr. Tilmann Leisegang (TU Bergakademie Freiberg)	33 Stimmen

Tobias Beck, Holger Kohlmann und Tilmann Leisegang wurden in das Komitee für den Lieselotte-Templeton-Preis gewählt.

15 Wechselseitig reduzierte Mitgliedsbeiträge bei Doppelmitgliedschaften

Die Diskussion um reduzierte Mitgliedsbeiträge bei gleichzeitiger Mitgliedschaft in der DGK und anderen Gesellschaften läuft darauf hinaus, dass dies nicht sinnvoll sei. Dies ist vor allem darin begründet, dass die Mitgliedsbeiträge der DGK von vorneherein sehr niedrig sind. Die geringe Ersparnis für einige Mitglieder stehe deswegen in keinem sinnvollen Verhältnis zu dem damit verbundenen Verwaltungsaufwand.

16 Sonstiges

Es werden keine weiteren Beiträge angemeldet.

17 Jahrestagung 2023

Die Jahrestagung 2023 wird in Frankfurt am Main stattfinden. Hauptorganisator ist Prof. Stefan Knapp von der Goethe-Universität Frankfurt.

18 Jahrestagung 2022

Dr. Martin Meven trägt den Stand der Planungen für die DGK-Jahrestagung 2022 in München vor. Die Tagung wird in der Zeit vom 14. bis 17. März 2022 stattfinden (siehe Ankündigung auf Seite 97). Hauptorganisator ist Prof. Wolfgang Schmahl von der LMU München.

Die Sitzung endet um 19:30 Uhr mit 72 anwesenden Teilnehmern.



Daniel Többens
(Schriftführer)

ONLY WITH

CrystalMaker[®]

S O F T W A R E

The screenshot displays the CrystalMaker software interface. On the left, a 3D molecular model shows a complex structure with purple and blue polyhedral units and red spheres, resting on a yellow, irregularly shaped base. The top right shows a 'Symmetrical Electron Diffraction' pattern with a grid of colored spots and a circular inset showing a unit cell. The bottom right features a 'Powder Diffraction' plot with intensity versus 2θ (degrees) on the x-axis and a list of peaks with their corresponding d spacings. A sidebar on the right contains various settings for the diffraction simulation.

A	B	C	A ² +B ² (Å ²)	A ² +C ² (Å ²)	B ² +C ² (Å ²)	1/d ² (Å ⁻²)
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0	100	100	20000.0000	1.0000	1.0000	0.0000

Native on
Apple M1
and Intel

CrystalMaker[®]
Crystal/Molecular Modelling

CrystalDiffract[®]
Interactive Powder Diffraction

SingleCrystal[™]
Single-Crystal TEM & XRD

Award-Winning Tools for Teaching & Research



CrystalMaker Software
27 Years of Innovation

we innovate • others imitate

Download a **FREE Demo**
Bring Crystals to Life



CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DER VORSITZENDEN
DES NATIONALKOMITEES

Aufgrund der bestehenden Pandemie wurde die IUCr-Konferenz in Prag (Tschechien) auf den 14.–22.08.2021 verschoben. Dieser Kongress wird als Kombination von Präsenz und virtuellen Beiträgen durchgeführt. Die Registrierung ist bereits über <https://www.conftool.com/iucr2020> möglich. Die Registrierung der bereits für 2019 angemeldeten Teilnehmer bleibt bestehen. Es werden Bestätigungen der einzelnen Teilnehmer eingeholt.

Die Nominierungen für das *Executive Committee* und die Kommissionen der IUCr müssen Mitte 2021 eingereicht werden.

IUCr Ewald prize: Olga Kennard (Cambridge, Großbritannien) für ihre Beiträge zur Datenbank-Entwicklung und weitere Aktivitäten (CSD, CCDC, PDB)

IUCr Bragg Prize: James Fraser (San Francisco, USA) für seine Arbeiten zur Bestimmung von Makromolekül-Kristallstrukturen, insbesondere eines intakten HIV-Hüllentrimmers, und Jean-Philippe Julien (Toronto, Canada) für seine Studien zur Flexibilität und Konformationsvariabilität in Makromolekülen.

Das *European Crystallographic Meeting* (ECM) wird in Versailles (Frankreich) am 23.–27.08.2022 und der 26. IUCr-Kongress in Melbourne (Australien) am 22.–29.08.2023 stattfinden. Die ECM-34 in Padova (Italien) ist für den 20.–24. August 2024 geplant.

Die *10th International Conference on Aperiodic Crystals* und die EPDIC wurden auf 2022 verlegt.

Workshops:

- ECS Budapest 2020: 04.–10.07.2021 online
- 7th ECS Lissabon 2021: verschoben nach 2022

Ute Kolb, Mainz



Gegr. 1997

RÖNTGENLABOR Dr. Ermrich

Röntgendiffraktometrie - Röntgenfluoreszenzanalyse

Am Kandelborn 7, D - 64354 Reinheim / b. Darmstadt
Zweigstelle: Bismarckstr. 29-31, D - 64853 Lengfeld / Otzberg
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 V5.0 (Sietronics Pty Ltd., Canberra, Australien)



Das Werkzeug zur quantitativen Phasenanalyse im Labor.
Bestimmung des amorphen Anteils u.a.
Alle Datenformate.

Si- Phase

Einbindung von CIF- Files oder eigenen Strukturdaten

Handbuch: M. Ermrich / D. Opper

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

„Einführung in die Röntgenbeugungsanalyse“

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2020 der DGK			
Einnahmen 2020			
Mitgliedsbeiträge inkl. Liebau-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2020	0,00 €	2.260,00 €
	Barzahler 2020	670,00 €	
	Entnahme Dauermitglieder	0,00 €	
	Beiträge rückwirkend	1.590,00 €	
Zinsen und Gebühren	Laue-Sparbuchauflösung	112,65 €	112,65 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Umbuchung Liebau-Preisgeld			2.304,30 €
Arbeitskreise	Einnahmen	200,00 €	200,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			3.900,00 €
Summe Einnahmen			8.776,95 €
Ausgaben 2020			
Mitteilungen			-6.977,00 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragsersatzung	-80,00 €	-360,00 €
	Rücklastschriften	-280,00 €	
Administration	Bankgebühren	-172,55 €	-2.574,60 €
	Stornokosten	-24,54 €	
	Ehrungen und Preise	-119,75 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-1.844,40 €	
	Webseite	-214,76 €	
	Reisekosten & Spesen	-198,60 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-1.013,52 €
Arbeitskreise	Förderung	0,00 €	-7.499,99 €
	Ausgaben	-399,99 €	
Reisestipendien	DGK Breslau	-2.100,00 €	
Liebau-Preisgeld		-2.000,00 €	
Max-von-Laue-Preisgeld		-3.000,00 €	
Summe Ausgaben			-18.425,11 €
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2020			
Einnahmen	3 neue Dauermitglieder	360,00 €	360,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2020		-378,47 €
Überschuss 2020			-18,47 €
Rücklage IUCr 2029			
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin			15.000,00 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2020			-9.648,16 €

Kontoführung 2020 der DGK			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	22.792,17 €	4.389,55 €	-18.402,62 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.104,02 €	2.085,55 €	-18,47 €
Sonderkonto AK 21	1.636,84 €	1.909,77 €	272,93 €
Rücklage IUCr 2029	0,00 €	15.000,00 €	15.000,00 €
DKG-Cash 085	10.516,50 €	4.016,50 €	-6.500,00 €
Guthaben der DGK	37.049,53 €	27.401,37 €	-9.648,16 €

Jahresabrechnung 2020 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2020			
Auflösung	Laue-Sparbuch 920	-112,65 €	-112,65 €
Zinsen	Laue-Kapital 930	0,00 €	
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			-112,65 €
Ausgaben 2020			
Laue-Preis 2020	Dr. Tobias Beck		-1.500,00 €
Laue-Preis 2020	Dr. Matthias Zschornak		-1.500,00 €
Summe Ausgaben (Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen)			-3.000,00 €
Überschuss Einnahmen und Ausgaben 2020			-3.112,65 €
Kontoführung 2020			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Laue-Sparbuch 920	112,65 €	0,00 €	-112,65 €
Laue-Kapital 930	60.000,00 €	60.000,00 €	0,00 €
Kapital	60.112,65 €	60.000,00 €	-112,65 €

Jahresbilanz 2020 Liebau-Stiftung			
Einnahmen 2020			
Zinsen	Stiftungskapital 870	0,00 €	0,00 €
Spenden für Preisgeld			0,00 €
Summe Einnahmen			0,00 €
Ausgaben 2020			
Liebau-Preis 2020	Dr. J. Voss-Andreae		-2.000,00 €
Kosten Preisverleihung	2019		-304,30 €
Summe Ausgaben			-2.304,30 €
Überschuss Einnahmen und Ausgaben 2020			-2.304,30 €
Kontoführung 2020			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Stiftungskapital 870	34.616,12 €	32.311,82 €	-2.304,30 €
Kapital der Stiftung	34.616,12 €	32.311,82 €	-2.304,30 €



I μ S DIAMOND – Simply Brilliant

'Diamonds are a crystallographer's best friend'

The extreme hardness of diamonds has allowed crystallographers to study materials at pressures greater than the core of the Earth. Now, the extreme heat conductivity of diamond gives crystallography a new X-ray source without equal: the I μ S DIAMOND source. Diamond conducts heat five times more efficiently than any other known material, making it perfect to cool the intense heat loads in a modern microfocus source.

This results in a source better than any microfocus rotating anode: higher intensity, stability and reliability, lower power consumption, and no regular maintenance costs.

Contact us for a personal system demonstration.

www.bruker.com/imsd

Innovation with Integrity

Crystallography

ANLAGE ZU PUNKT 6.5:

B E R I C H T D E R K A S S E N P R Ü F E R

Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2020 wurde von Ullrich Pietsch (Universität Siegen), und von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) am 15. März 2021 im Zuge einer Videokonferenz 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 2020 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

Ende 2020 erfuhr das Kapital der DGK eine Abnahme von mehr als 9 000 € und beträgt nun etwas mehr als 27 000 €. In dieser Bilanz sind noch nicht die Einnahmen der Mitgliedsbeiträge 2020 via Bankeinzug berücksichtigt, welche rückwirkend in 2021 erwartet werden.

Alexandra Friedrich, Würzburg und Ullrich Pietsch, Siegen

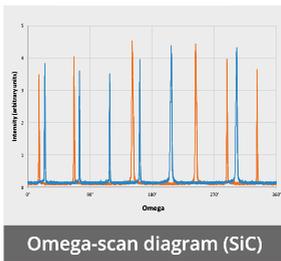


Omega/Theta X-ray diffractometer

- 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°



ANLAGE ZU PUNKT 6.6:

**BERICHT DES VERTRETERS DER DGK
IM VORSTAND DER DMG**

Am 19./20.10.2020 fand eine Vorstandssitzung der DMG in Bad Honnef statt, gefolgt von einer Online-Mitgliederversammlung am 20.10.2020, 14–16 Uhr.

Personalia:

Am 01.01.2021 übernimmt Friedhelm von Blanckenburg (Potsdam) den Vorsitz der DMG von Reinhard Fischer (Bremen).

Ehrungen und Preise:

- Abraham-Gottlob-Werner-Medaille an Prof. Dr. Ekkehart Tillmanns (Wien) für seine besonderen Verdienste um die Förderung der Mineralogischen Wissenschaft.
- Goldschmidt-Preis an Dr. Mathias Burisch-Hassel (Freiburg) für seine besonderen wissenschaftlichen Leistungen.
- Beate-Mocek-Preis an Marina Veter (Sydney) als Unterstützung zu ihrem Forschungsvorhaben.
- Ehrenmitgliedschaft für Prof. D. Klaus Keil (Honolulu) für seine besonderen Verdienste um die Wissenschaft der Mineralogie.
- Paul-Ramdohr-Preis: Die beiden besten Poster der *Virtual Poster Session* der DMG (siehe unter Tagungen) sollen ausgezeichnet werden.

Beitragsordnung:

Die DMG führt eine Beitragsreduktion von 10 € für persönliche Mitglieder ein, die zugleich Mitglied in einer anderen Gesellschaft des DVGeo oder GeStEIn e. V. sind. Die DMG möchte dies auch auf DGK-Mitglieder erweitern.

European Journal of Mineralogy (EJM):

Der Übergang zu *Open Access* ist erfolgreich vollzogen. Für DMG-Mitglieder gelten vergünstigte *Page Charges*, auch weitergehende Erstattungen sind möglich.

Tagungen:

- 2020 (30.11.–02.12.): *Virtual Poster Session* der DMG als Ersatz für die ausgefallene Jahrestagung (siehe DMG-Homepage).
- 2021 (29.08.–02.09.): emc² in Krakau („Mineralogy in the modern world“). Wegen der Corona-Pandemie wurde die für 2020 geplante Veranstaltung um ein Jahr verschoben.
- 2022 (11.–15.09.): 100. Jahrestagung der DMG in Köln.
- 2023 (voraussichtlich 11.–14.09.): DGGV-Tagung zum 175-jährigen Bestehen der Geologischen Gesellschaft in Berlin. Wegen der Nähe zu politischen Entscheidungsträgern und vorgesehenen Themenbereichen wie Endlager, Klimawandel, Energiewende wird dieser Veranstaltung strategische Bedeutung beigemessen.
- 2023 (voraussichtlich 17.–20.09.): Gemeinschaftstagung ÖMG, SMS und DMG in Wien. Musste wegen der Verschiebung der emc² auf 2023 umgelegt werden.

Jürgen Schreuer, Bochum



What if crystals' size **WAS NOT AN ISSUE ANYMORE?**

SHAPING THE FUTURE OF CRYSTALLOGRAPHY

Introducing the Electron Diffractometer. A novel instrument for the analysis of solid compounds. Characterising hitherto unmeasurable nano-crystalline samples.

Produce accurate atom structures from your nano-sized samples in minutes. Easy with ELDICO's electron diffractometer, a smart combination of a 5-axis, 140° rotation, nanometer-precise goniometer and an electron beam. Invented by crystallographers, for crystallographers.

- **As easy-to-use as single-crystal X-ray diffraction**
- **Straightforward to install – no special requirements**
- **Sample size from 10 to 1000 nm**
- **Radically simplified EM design**
- **Improved goniometer**
- **R₁ below 10 %**

**AVAILABLE
NOW!**



ANLAGE ZU PUNKT 6.7:

BERICHT DES VERTRETERS DER DPG IM VORSTAND & BERICHT DES VERTRETERS DER DGK IN DER DPG

In diesem Jahr hat die Deutsche Physikalische Gesellschaft ihre Frühjahrstagung vom 15. bis 19. März in Dortmund organisiert. Den öffentlichen Abendvortrag mit dem Titel „Geschüttelt, nicht gerührt! – James Bond im Visier der Physik“ hat Prof. Dr. Metin Tolan von der Technischen Universität Dortmund gehalten, der vielen Kristallographen bekannt sein dürfte. Corona-bedingt wurde die Frühjahrstagung der DPG als eine virtuelle Veranstaltung in einem kleineren Rahmen als üblich ausgetragen. An der Frühjahrstagung waren die Bereiche der Teilchenphysik, der Strahlen- und Medizinphysik sowie die Arbeitskreise Beschleunigerphysik und Physik, moderne Informationstechnologie und Künstliche Intelligenz vertreten. Weitere Informationen zur Tagung sind auf der Webseite <https://dortmund21.dpg-tagungen.de> zu finden.

Die 84. Jahrestagung der DPG und die DPG-Tagung der Sektion Kondensierte Materie werden von 27.09. bis 01.10.2021 virtuell stattfinden. An dieser gemeinsamen Veranstaltung beteiligen sich die folgenden DPG-Vereinigungen:

- Sektion kondensierte Materie,
- Biologische Physik,
- Chemische Physik und Polymerphysik,
- Dünne Schichten,
- Dynamik und Statistische Physik,
- Halbleiterphysik,
- Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur,
- Magnetismus,
- Metall- und Materialphysik,
- Oberflächenphysik,
- Physik sozio-ökonomischer Systeme,
- Tiefe Temperaturen,
- Vakuumphysik und Vakuumtechnik,
- Arbeitskreis Chancengleichheit,
- Arbeitskreis Energie,
- Arbeitskreis junge DPG,
- Arbeitskreis Physik,
- Moderne Informationstechnologie und Künstliche Intelligenz,
- Arbeitsgruppe Information,
- Arbeitsgruppe Physik und Abrüstung sowie
- die Arbeitsgruppe Young Leaders in Physics.

Der Fachverband „Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur“, in dem die ehemalige Fachgruppe Kristallographie angesiedelt ist, ist der Mitorganisator der Symposien „Hybrid Nanomaterials: From Novel Physics and Multi-Scale Self-Organization to Functional Diversity on the Device Scale“ und „Novel phases and dynamical properties of magnetic skyrmions“. Weitere Informationen zu dieser Tagung gibt es unter <https://skm21.dpg-tagungen.de>.

Die DPG-Frühjahrstagung (2022) der Sektion Kondensierte Materie wird als Präsenztagung an der Universität Regensburg geplant.

David Rafaja, Freiberg

SATZUNG FÜR DEN LIESELOTTE - TEMPLETON - PREIS

§1 – Widmung/Anlass

Der Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie soll dazu beitragen, die Attraktivität der Kristallographie insbesondere bei Studierenden zu erhöhen und wissenschaftlichen Nachwuchs im Bereich der Kristallographie zu fördern. Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) verleiht entsprechend ihrem Zweck einen Preis, der dem Andenken an Lieselotte Templeton gewidmet ist.

§2 – Umfang des Preises

Der Preis wird jedes Jahr an bis zu maximal drei Preisträger*innen vergeben. Der Preis besteht je aus einer Urkunde, einer dreijährigen Mitgliedschaft in der Deutsche Gesellschaft für Kristallographie und der Finanzierung der Teilnahme an der nächsten Jahrestagung durch die DGK. Letzteres umfasst die Tagungsgebühr, das Konferenzdinner und die Übernahme der Reisekosten gemäß Bundesreisekostengesetz bis zu maximal 500 Euro. Die Verleihung selbst findet auf eben dieser Jahrestagung statt. Den Gewinnern steht es frei, einen Vortrag über ihr Abschlusssthema zur Konferenz im Rahmen der Beiträge des AK Junge Kristallographen zu halten.

§3 – Kandidatur, Nominierung & Auswahlkriterien

Prämiert werden Bachelor-, Master- und Diplomarbeiten sowie vergleichbare Abschlussarbeiten, in denen Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden. Es werden hauptsächlich Arbeiten des Vorjahres der Verleihung berücksichtigt. Die Vorschläge müssen die Graduierungsarbeit zusammenfassen, zum einen durch ein Gutachten der Hochschullehrenden und zum anderen durch eine Zusammenfassung der Studierenden; beide Dokumente sollen je maximal eine Seite lang sein. Aufrufe zur Benennung von Preiskandidaturen sollen vom Komitee rechtzeitig in entsprechenden Fachorganen der Kristallographie und angrenzender Wissenschaften publiziert werden. Die Vorschläge sollten dem Vorsitz des Komitees spätestens drei Monate vor der Jahrestagung vorliegen.

§4 – Komitee

Die Auswahl der Preisträger*innen erfolgt durch ein Komitee, das aus dem Vorsitz der DGK (*ex officio*, eine Stimme) und des Arbeitskreises Junge Kristallographen (eine Stimme) sowie drei gewählten DGK-Mitgliedern (je eine Stimme) besteht. Die drei zu wählenden Komitee-Mitglieder werden von der Mitgliederversammlung der DGK auf drei Jahre gewählt; einmalige Wiederwahl ist zulässig. Das Komitee wählt aus seinem Kreis einen Vorsitz, der die Federführung übernimmt, für die Einhaltung von Terminen sorgt und die Beschlussfassung vorbereitet.



WEBINAR SERIES 2021

●
Coming in September

●
Past webinars

Macromolecular crystallography
with guest speakers from
DLS, ORNL, Spring-8

High energy experiments
with guest speakers
from ESRF, STOE & APS



REGISTER HERE!

WATCH HERE!

find out more
www.dectris.com

EINRICHTUNG DES LIESELOTTE-TEMPLETON-PREISES FÜR STUDIERENDE

Dank der beherzten Initiative des Arbeitskreis Junge Kristallographen (AK 21) wurde auf der diesjährigen virtuellen 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie die Einführung eines Preises für Studierende beschlossen. Dieser Preis wird ab dem Jahr 2022 von der DGK jährlich für besondere Leistungen Studierender im Bereich der Kristallographie verliehen. Er ist dem Andenken an Lieselotte Templeton gewidmet, einer warmherzigen Betreuerin und großartigen Kristallographin im Bereich der resonanten Strukturanalyse. Sie war mit großer Leidenschaft in und für die Wissenschaft tätig. Besonders diese Leidenschaft und Begeisterung sind Werte, die wir den jungen Wissenschaftlern nach Beendigung des Studiums gern mit auf den Weg geben, um so einen weiteren wichtigen Grundstein für ihre erfolgreiche wissenschaftliche Karriere zu legen.

Die Idee für einen Studierendenpreis hatte die Vorsitzende des AK 21, Tina Weigel (TU Bergakademie Freiberg), bereits im Juli 2020. Nach ersten positiven Rückmeldungen aus dem AK selbst sowie des Wissenschaftskollegs wurde der Vorschlag beim Vorstandstreffen im November 2020 vorgelegt. Alle Teilnehmenden nahmen den Preisvorschlag mit Begeisterung auf. Der AK 21 erarbeitete anschließend in Absprache mit dem Vorstand der DGK eine Preissatzung. Anschließend wurden alle DGK-Mitglieder dazu aufgerufen, geeignete Namenspatrone vorzuschlagen, über die in der Mitgliederversammlung im März 2021 schließlich abgestimmt wurde, zusammen mit der vorgelegten Preissatzung. Mehrheitlich wurde die Einrichtung des „Lieselotte-Templeton-Preises“ für herausragende Studierende beschlossen. Wir freuen uns, dass die Verwendung des Namens durch Lieselotte Templetons Sohn so freundlich aufgenommen und genehmigt wurde: „Ich unterstütze die Idee eines Lieselotte-Templeton-Preises für junge Kristallographen von ganzem Herzen.“ [1]

Nach nur acht Monaten intensiver Arbeit kann die DGK nun im Jahr 2022 erstmals den Lieselotte-Templeton-Preis an Studierende kristallographischer Fachrichtungen verleihen. Dank gilt vor allem Jan Philipp Wöhrle (Universität Freiburg), Melanie Nentwich (DESY), Ullrich Englert (RWTH Aachen), Manfred Weiss (HZB), Daniel Többens (HZB), und Christian Lehmann (MPI für Kohleforschung) für ihren Fürspruch und die aktive Gestaltung der Preissatzung.

Der Lieselotte Templeton-Preis zeichnet die besten Bachelor-, Master-, Diplom- und ähnliche schriftliche Studienarbeiten aus, in denen kristallographische Fragestellungen untersucht oder Aspekte der Kristallographie maßgeblich mit einbezogen wurden. Mit dem Preis sollen die jungen Wissenschaftler*innen am Anfang ihrer Karriere bestärkt und motiviert werden, sich kristallographischen Themen zu widmen. Außerdem hätten die Studierenden mit dem Lieselotte-Templeton-Preis eine erste Auszeichnung und Referenz im Lebenslauf, auf welche ihre weitere wissenschaftliche Karriere aufgebaut werden kann. Gleichzeitig erhöht die DGK mit diesem Preis die Sichtbarkeit des Fachbereichs Kristallographie und der Gesellschaft selbst an Universitäten und Forschungseinrichtungen, wodurch die öffentliche Wahrnehmung der DGK verstärkt wird. Mit dem Preis kann die DGK aktiv dazu beitragen, wissenschaftlichen Nachwuchs für die Kristallographie und die Gesellschaft zu gewinnen, da den Studierenden so sehr früh die DGK und ihre Arbeitskreise nahegebracht werden. Dies trägt auch zu einer

besseren Vernetzung der DGK bei, vor allem zwischen dem wissenschaftlichen Nachwuchs und deren betreuenden Institutionen.

Der Lieselotte-Templeton-Preis richtet sich an Studierende, die ihr Studium im vorangegangenen Jahr abgeschlossen haben. Damit grenzt sich dieser Preis deutlich von den bereits existierenden Preisen der DGK ab. Die Verleihung des Preises findet im Rahmen des Ehrenabends auf der DGK-Jahrestagung statt. Die Auszeichnung umfasst neben einer Urkunde auch die Finanzierung der Teilnahme an der Jahrestagung (inklusive Konferenzgebühr, Konferenzdinner und einem Reisestipendium bis 500 €). Weiterhin wird den Ausgezeichneten die Möglichkeit eingeräumt, die prämierte Arbeit im Rahmen des Symposiums des AK 21 auf der Jahrestagung zu präsentieren.

Ausgezeichnet werden Studierende aller kristallographischer Fachrichtungen. Die Bewerbung erfolgt durch ein PDF-Dokument (max. 10 MB) mit einer Zusammenfassung der Arbeit (eine A4-Seite) und einem Referenzschreiben eines betreuenden Hochschullehrers (eine A4-Seite). Die Preistragenden werden durch das Preiskomitee bestimmt, welches auf drei Jahre gewählt wird. Das erste Preiskomitee setzt sich aus den drei gewählten Mitgliedern Tobias Beck (Universität Hamburg), Holger Kohlmann (Universität Leipzig) und Tilmann Leisegang (TU Bergakademie Freiberg; Vorsitzender des Komitees), den beiden Vorsitzenden des AK 21 Constantin Buyer und Tina Weigel sowie dem Vorsitzenden der DGK Thomas Schleid (*ex officio*) zusammen.

LIESELOTTE TEMPLETON

Lieselotte Templeton (geborene Kamm), von Freunden und Familie Lilo genannt [1], wurde 1918 in Breslau, damals Deutschland, als Kind einer modernen, säkularen jüdischen Familie geboren. Sie stammte aus einer Akademikerfamilie, ihr Vater war Jurist, ihr Onkel Otto Stern¹ Physiker und Nobelpreisträger und ihr Onkel Kurt Stern Botaniker. 1933 verließ die Familie aufgrund ihrer jüdischen Abstammung Deutschland und flüchtete zunächst nach Frankreich. Dort absolvierte sie das Gymnasium in Versailles. Danach emigrierte die Familie in die USA. Lieselotte studierte in Berkeley und absolvierte ihre Studienabschlüsse B. Sc. 1946 sowie Ph. D. 1950. Dort lernte sie auch ihren späteren Ehemann David Templeton kennen, der an denselben Vorlesungen wie sie teilnahm. Nachdem die Anti-Neopotismus-Regeln² gelockert wurden, startete ihre aktivste Arbeitsperiode, denn Lieselotte Templeton durfte ab dann gemeinsam mit ihrem Mann arbeiten. Ihr Sohn schreibt: „Unsere beiden Eltern liebten es, Forscher zu sein, und ihr Enthusiasmus hat nie nachgelassen. Unsere Mutter war einer dieser Menschen, die kein Nein als Antwort akzeptierten. Sie liebte es, im Labor zu sein und sich mit der Wissenschaft zu beschäftigen. Es gab nichts Anderes, was sie mehr tun wollte.“ [1]

¹ Otto Stern erhielt 1935 den Nobelpreis für Physik für seinen Beitrag zur Entwicklung der Molekularstrahlmethode und seine Entdeckung des magnetischen Moments des Protons [2]. Seine Arbeit über die Erzeugung von Interferenzen durch Strahlen von Wasserstoff und Helium war eine Demonstration der Wellennatur von Atomen und Molekülen.

² Nach diesem Gesetz des Bundesrechts der Vereinigten Staaten zur Vermeidung von Vetternwirtschaft darf ein Amtsträger einer Behörde keine Person, die mit dem Beamten verwandt ist, ernennen, beschäftigen, befördern, bevorteilen oder für die Ernennung, Beschäftigung, Beförderung oder Bevorteilung in oder auf eine zivile Position in der Behörde, in der er dient oder über die er Gerichtsbarkeit oder Kontrolle ausübt, vorschlagen. Diese Bestimmung trat sechs Jahre nachdem John F. Kennedy als amtierender Präsident seinen Bruder Robert F. Kennedy 1961 zum Generalstaatsanwalt der USA ernannt hatte in Kraft [3].

Ihre Doktorarbeit, die sie unter der Aufsicht von Leo Brewer verfasste, trug den Titel „The heats of formation of CN, N₂, and NO“. Mitglied der Promotionskommission war der Chemiker und Kernphysiker Glen T. Seaborg³. Nach ihrer Promotion arbeitete sie in den Bereichen Festkörperchemie, Keramik und Sprengstoffdetektion. Ihre Forschung in der Kristallographie begann mit ihrer Arbeit am Absorptionsprogramm AGNOST/ABSOR. Sie programmierte das analytische Absorptionsprogramm, das ihr half, die Kristallstrukturen mehrerer Verbindungen mit schweren Elementen zu lösen. Außerdem war es besonders wichtig bei der „Untersuchung der anomalen Dispersion an Absorptionskanten mit Synchrotronstrahlung. Unsere Messungen mit Verbindungen von Cäsium und mehreren Seltenerd-Elementen zeigten die außergewöhnlich großen Effekte, die an *L*-Absorptionskanten auftreten.“ [4] Diese Untersuchungen führten zur Entwicklung einer Technik, die anomale Streuung bei mehreren Wellenlängen nutzt und heute eine Standardmethode für die Proteinstrukturanalyse ist [5]. Zusätzlich nutzten Lieselotte und David die polarisierte Natur der Synchrotronstrahlung, um Röntgendiffraktion an anisotropen Molekülen zu zeigen [a, b]. So konnten sie polarisierte, anomale Streuung experimentell nachweisen [6]. Für ihre gemeinsame Arbeit erhielten die Templetons 1987 den *Patterson Award* der *American Crystallographic Association* für die Nutzung, Messung und Analyse der anomalen Röntgenstreuung [5].

Der Chemiker Frederick Hollander von der *University of California*, Berkeley (USA) und damaliger Student ihres Manns erinnert sich folgendermaßen an Lieselotte Templeton [4]: „Was ich bei ihr anfangs und auch danach immer wieder gesehen habe, war, dass ihr ihr Erfolg als Wissenschaftlerin nicht im Weg stand, um ein herzlicher Mensch zu sein. Meine Einschätzung ihres Werts als Kristallographin ist, dass ihre Beiträge nicht nur das waren, was sie in Bezug auf Forschung und Publikationen tat, so wichtig diese auch sind. Genauso wichtig wird auf lange Sicht sein, was sie als Person war, der Inbegriff einer liebenswürdigen wissenschaftlichen Frau.“

Die Physiologin und Biophysikerin Frances Jurnak von der *University of California*, Irvine (USA), ebenfalls Studentin in der Gruppe ihres Manns ergänzt: „Ich erinnere mich an Lilo als eine liebenswürdige Dame, die ihrer Zeit um Jahre voraus war. In einer Welt, in der es für Frauen schwierig war, Berufstätige und Mütter zu sein, fand sie einen Weg, intellektuell engagiert zu sein und weiterhin bedeutende wissenschaftliche Beiträge zu leisten. Obwohl ich sie nicht als meine Art von Vorbild sah, als ich noch Studentin war, lernte ich im Laufe meines Lebens zu schätzen, wie erfolgreich sie sich eine wissenschaftliche Nische geschaffen hat und eine sehr enge, intellektuelle Gefährtin für David war, während sie gleichzeitig Mutter von zwei Kindern war.“

Lieselotte Templeton starb mit 91 Jahren 2009 in Berkeley, Kalifornien (USA), ein Jahr vor ihrem Mann.

Tina Weigel, Freiberg, Melanie Nentwich, Hamburg und Tilmann Leisegang, Freiberg

³ Glen T. Seaborg ist der einzige Wissenschaftler, der sowohl mit dem nach ihm benannten chemischen Element Seaborgium als auch dem Nobelpreis für Chemie 1951 ausgezeichnet wurde.

DIE WICHTIGSTEN VERÖFFENTLICHUNGEN VON LIESELOTTE TEMPLETON,
SORTIERT NACH DEN MEISTEN ZITATIONEN

- [a] D. H. Templeton, L. K. Templeton: Polarized X-ray absorption and double refraction in vanadyl bisacetylacetonate, *Acta Cryst. A* 36 (1980) 237
- [b] D. H. Templeton, L. K. Templeton: X-ray dichroism and polarized anomalous scattering of the uranyl ion, *Acta Cryst. A* 38 (1982) 62
- [c] L. K. Templeton, J. A. Pask: Formation of BaTiO₃ from BaCO₃ and TiO₂ in air and in CO₂, *J. Amer. Ceram. Soc.* 42 (1959) 212
- [d] D. H. Templeton, L. K. Templeton: Tetrahedral anisotropy of x-ray anomalous scattering, *Phys. Rev. B.* 49 (1994) 14850
- [e] D. H. Templeton, L. K. Templeton: X-ray birefringence and forbidden reflections in sodium bromate, *Acta. Cryst. A* 42 (1986) 478

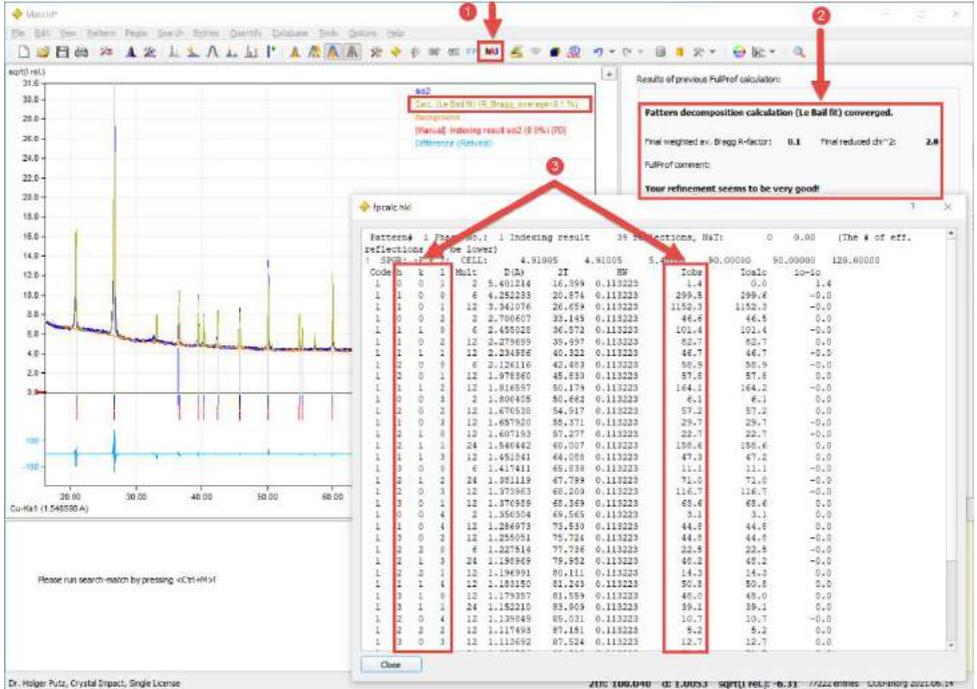
WEITERE REFERENZEN

- [1] Alan Templeton in einem Brief an Daniel Többens vom 23.04.2021
- [2] <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1943/stern/biographical>
- [3] <https://time.com/4574971/donald-trump-transition-jared-kushner-legal-anti-nepotism-law/>
- [4] F. Hollander: ACA RefleXions, American Crystallographic Association 1 (2010), https://chemistry.berkeley.edu/sites/default/files/lieselotte_templeton_obituary_rev.pdf
- [5] Obituary on David Templeton, https://senate.universityofcalifornia.edu/_files/inmemoriam/html/davidhtempleton.html
- [6] G. Kass-Simon, P. Farnes, D. Nash: Women of science: righting the record, Indiana University Press, Bloomington (1989)



MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction



Neu: Bestimmung von Reflexintensitäten I(hkl)

Gerade ist **Version 3.12** von Match!, unserer Software zur Phasenanalyse aus dem Pulverdiffraktogramm, erschienen.

Neu in dieser Version ist vor allem die Möglichkeit, die Intensitäten einzelner Reflexe I(hkl) durch Anwendung des **Le Bail Verfahrens** (in Kombination mit FullProf) zu ermitteln. Die Reflexintensitäten I(hkl) können dann z.B. zur Lösung der Kristallstruktur verwendet werden. Weiterhin kann das Le Bail Verfahren benutzt werden, um die untere Grenze des R-Werts bei der Rietveld-Verfeinerung zu bestimmen oder die Wahl der Raumgruppe zu unterstützen.

Zur Anwendung der neuen Funktion klicken Sie nach dem Import Ihres Pulverdiffraktogramms einfach auf den **hkl** Button in der Toolbar **1**. Match! wird Sie durch den weiteren Ablauf führen und Ihnen nach erfolgreicher Verfeinerung **2** anbieten, die resultierenden I(hkl)-Daten **3** zu exportieren.

Eine kostenlose Testversion sowie weitere Informationen sind auf unserer Webseite verfügbar:

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



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>

RÜCKBLICK AUF DIE 29. JAHRESTAGUNG DER DGK



Für die diesjährige 29. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, die vom 15. bis 18. März 2021 erstmals online stattfand, hatte sich eine sehr hohe Zahl von mehr als 600 Teilnehmerinnen und Teilnehmer, größtenteils aus Deutschland, aber auch aus 20 weiteren Ländern, angemeldet. Ursprünglich war geplant, die Teilnehmer am DESY in Hamburg zu begrüßen und DESYs Photonquellen PETRA III und FLASH vor Ort zu besichtigen. Aufgrund der andauernden Covid-19-Pandemie war jedoch eine Umorganisation der gesamten Veranstaltung in enger Zusammenarbeit mit dem lokalen Organisationsteam unter Vorsitz von Edgar Weckert (DESY) sowie mit den Arbeitskreisen der DGK als Online-Format erforderlich.

Die Online-Tagung der DGK in 2021 ermöglichte dennoch einen regen Austausch in über 25 Sessions mit 80 Vorträgen quer durch die vielen Wissenschaftsbereiche im Forschungsfeld Kristallographie. In der Session für „Junge Kristallographen / Young Crystallographers“ hatten alle die Möglichkeit, ihre neuesten Ergebnisse in einem *Lightning Talk* und in den Postersessions zu präsentieren. Die Konferenz wurde von zwei Postersessions mit insgesamt über 50 Postern begleitet. Die Teilnehmer und Teilnehmerinnen hörten Online-Vorträge und Poster-Präsentationen zu Themen wie Bio-Kristallographie, anorganische Kristallstrukturen und funktionelle Materialien, organische und metallorganische Kristallstrukturen, Energie-Materialien, wie Batterien und Photovoltaik, sowie ungeordnete oder komplexe Kristallmaterialien und verschiedene fortgeschrittene Messverfahren.

In einer Sondersitzung hielten die Preisträger des Max-von-Laue-Preises 2020 im Bereich Kristallographie und Anwendungen, Tobias Beck (Universität Hamburg) für seine Arbeit zum Thema „Selbstorganisation von biomolekularen Bausteinen und anorganischen Nanopartikeln zu biohybriden Nanomaterialien“ und Matthias Zschornak (TU Bergakademie Freiberg und TU Chemnitz) für seine Arbeit zum Thema „Von der Störung der Kristallsymmetrie zur Funktionalität“, ihre Preisvorträge.

Wiebke Laasch, Hamburg

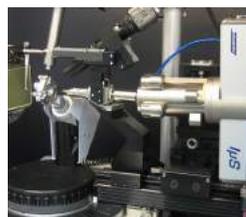
Your Partner for X-ray Optics, X-ray Tubes and Microfocus Sources



$1\mu\text{S}$ - THE MICROFOCUS SOURCE FOR EVERYONE



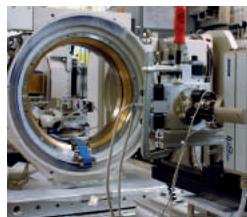
CULTURAL HERITAGE



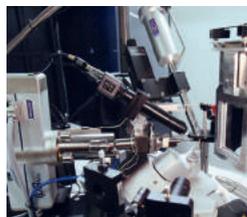
HIGH PRESSURE
CRYSTALLOGRAPHY



IN-SITU GRAZING
INCIDENCE SAXS



SYNCHROTRON BEAMLINES



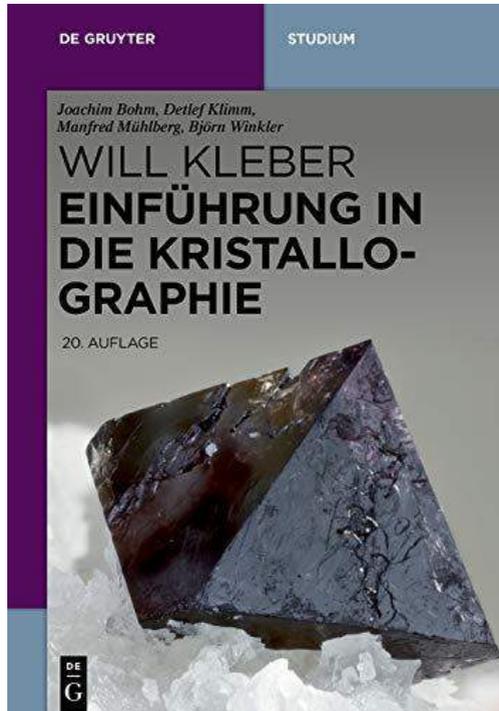
TIME RESOLVED
STUDIES



Solutions made by incoatec!

BUCHREZENSION:
 „WILL KLEBER – EINFÜHRUNG
 IN DIE KRISTALLOGRAPHIE“

20. AUFLAGE 2021, DE GRUYTER



Als Will Kleber 1955 im Vorwort zur ersten Auflage 1956 seiner „Einführung in die Kristallographie“ den notwendigen einheitlichen Blick auf den kristallisierten Zustand annahm, gab er zugleich selbst ein praktisches Beispiel dafür, wie dieses Konzept gestaltet werden kann. Damals hatte es sogar die förmliche Weihe eines ministeriell anerkannten Universitäts- und Hochschullehrbuchs.

Heutzutage bewertet der Leser die Eignung vorwiegend an der Zahl der Nachauflagen. Es darf als Hommage auf das Wirken Will Klebers an der Humboldt-Universität gelten, dass das Werk nach seinem Tode 1970 von seiner Frau Irmgard sowie den Schülern Hans-Joachim Bautsch und Joachim Bohm unter seinem Namen fortgeführt, unter der Ägide von J. Bohm zuletzt mit Detlef Klimm (IKZ Berlin) überarbeitet und schließlich unter weiterer Beteiligung der Hochschullehrer Manfred Mühlberg (Univ. zu Köln) und Björn Winkler (Univ. Frankfurt/M.) als 20. Auflage präsentiert worden ist. Nun stellt sich nach 65 Jahren heraus, das Konzept ist immer noch tragfähig trotz zahlreicher neuer Entdeckungen und Fortschritte im Einzelnen.

Längst haben Strukturanalyse, Festkörperphysik, Festkörperchemie, Werkstoffwissenschaft, Biochemie und Mineralogie eigene spezielle Darstellung erfahren, die meist die Kristallgeometrie wegen der dort zweckmäßigen eigenen Nomenklatur und Symbolik nur beiläufig behandeln. Von Anfang an hat Will Kleber dagegen den Grundlagen der morphologisch-strukturellen Betrachtung breiten Raum gewidmet, was zeitweilig als Verharren in der Anfangszeit der Kristallographie missdeutet worden ist. Inzwischen werden zum Beispiel Wachstumsformen als einfach zugängliche und dennoch ergiebige Informationsträger des inneren Aufbaus von Forschern sehr geschätzt, verlangen aber gerade Vertrautheit mit der Geometrie periodischer und aperiodischer symmetrischer Systeme. Deshalb führt der KLEBER Punkt- und Raumsymmetriegruppen als unverzichtbares Werkzeug für quantitative Betrachtungen physikalischer und struktureller Eigenschaften ein. Mit den Grundlagen dafür erschließt sich dem Leser dann auch die Fülle weiterführender Publikationen der *International Union of Crystallography* (IUCr), insbesondere die der *International Tables for Crystallography*. Das macht den Weg frei zur Einbeziehung auch niedrigsymmetrischer Festkörper in die Arbeit des Materialforschers, denn der Umgang mit nichtkartesischen Koordinatensystemen wird außerhalb kristallographischer Literatur meist umgangen. Mit der IUCr als Referenz bekennen sich die Autoren zu begrifflicher Strenge und zur aktuellen internationalen Nomenklatur, was dem aufmerksamen Nutzer des KLEBER sehr zustatten kommt.

Zum einheitlichen Konzept des KLEBER gehört auch die Darbietung des Stoffes über die erwähnte Geometrie hinaus als Paket aus Kristallchemie, Kristallwachstum/-züchtung, Kristallphysik, Strukturbestimmungsmethoden und Realstrukturen. Im Durchschnitt ist das Buch aller 3 ½ Jahre neu aufgelegt und aktualisiert worden, wobei sich über die vergangenen 65 Jahre hinweg auch Reihenfolge und Bezeichnung der Bestandteile änderten. Zur Popularität dieser Einführung trägt zweifellos die behutsame Verwendung des mathematischen Apparats bei (Grundkenntnisse von Matrix- und Tensor-Algebra), mit dem ausführliche Textpassagen, Grafiken und Tabellen begleitet werden.

Kleber selbst hat in der 1. Auflage darauf bestanden, dass der Lernende sein räumliches Anschauungsvermögen mit geeignetem Übungsmaterial schult. Dazu helfen mehr als 350 Abbildungen. Ohne zusätzliche Inanspruchnahme gegenständlicher dreidimensionaler Modelle, wie sie in begleitenden Übungen zur Kristallographie vorgehalten werden, mochte er sich das aber nicht vorstellen.

Die vorliegende 20. überarbeitete Auflage löst nun die vor 11 Jahren erschienene 19. Auflage mit einem um 46 Seiten erhöhtem Umfang ab, der inhaltlich aber teilweise durch einen verkleinerten Satzspiegel aufgezehrt wird. Kapitel 1 „Kristallstrukturlehre und -morphologie“ (21 % des Buches) übernimmt weitgehend in Text und Bild das bewährte Niveau und den Umfang des relevanten Begriffsapparats, passt sich gleichzeitig mit punktuellen Aktualisierungen der Entwicklung des Fachgebietes an. Beispielsweise werden die Termini „Gitterparameter“ statt „Gitterkonstanten“ und „orthorhombisch“ statt „rhombisch“ verwendet und die neue Definition des Kristalls durch die *International Union of Crystallography* eingeführt (damit auch Quasikristalle eingeschlossen). Als Zusatzinformation sind die Lebensdaten der im Text erwähnten Wissenschaftler als Fußnoten notiert, ein nützlicher Beitrag zur Erinnerungskultur. Der Straffung des Textes dienen einige Kürzungen. Sie betreffen hauptsächlich die gnomonische und die Schmidtsche Projektion (einschließlich eines Schmidtschen Netzes), Anwendungen der stereographischen Projektion und das Kristallzeichnen. Sowohl eine verminderte Nachfrage in der Praxis als auch die Verfügbarkeit von Computerprogrammen sollten das verschmerzen lassen. Hervorgehobene Merksätze, Passagen im Kleindruck und eingestreute Fragen lockern den Text auf. Formeln sind nun

nummeriert, was die Referenz erleichtert. Zur Kontrolle für den Leser sind Antworten auf die Fragen am Schluss des Buches beigefügt. Hilfreich ist wieder ein Wulffsches Netz von 10 cm Radius als lose Beilage.

Die Vision von der Berechnung der Kristallstruktur bei vorgegebenem Mengenanteil von Elementen des Periodensystems und thermodynamischen Parametern, so bekennen die Autoren, ist noch immer nicht so weit verwirklicht, dass auch moderne Materialforschung auf empirische Konzepte verzichten könnte. Das Kapitel 2 „Kristallchemie“ (18 % des Buches) widmet sich deshalb selbst 65 Jahre nach seiner ersten Formulierung derartigen Konzepten, konkret in Gestalt von Kristallbausteineigenschaften (Radien, Elektronegativitäten), Kugelpackungen und Bindungstypen. Der Abschnitt über kovalente Bindung ist überarbeitet und der Computer-Beweis der dichtesten Kugelpackung berücksichtigt worden. Den Kern des Kapitels bildet die systematische Kristallchemie. Hier spielen grafische Strukturdarstellungen und quantitative Daten für das Begreifen von Bauprinzipien eine maßgebliche Rolle. Die Methode der Gruppe-Untergruppe-Beziehung nach H. Bärmighausen kann dabei hilfreich sein, wird indessen nicht angeführt. Die Gliederung der Strukturen nach metallischer sowie ionarer und kovalenter Bindung mit einem Exkurs in die Molekülstrukturen bietet Gelegenheit, die Vielfalt anhand ausgewählter Strukturargumente zu ordnen. Eine repräsentative Auswahl von Strukturen erleichtert dem Leser den Bezug zu konkreten Substanzen seines Interesses und reizt gleichzeitig zur Prognose bisher unbekannter Atomanordnungen. Gegenüber der 19. Auflage ist das Kapitel wenig verändert. Die Zahl der weltweit neu bestimmten oder berechneten Strukturen wächst indessen weiter. Die Autoren verweisen deshalb auf elektronischen Datenbanken wie ICSD und CCD als wesentliche Säule genauerer Vorhersagen.

Das Fachgebiet Kristallographie ist seit dem 20. Jahrhundert durch die Methode der diffraktometrischen Strukturbestimmung mit Photonen- und Teilchenstrahlen gekennzeichnet, die sich inzwischen zum Standardwerkzeug mit hohem Automatisierungsgrad entwickelt hat. Kapitel 3 „Beugungsmethoden und Kristallstrukturbestimmung“ (12 % des Buches) geht am Beispiel der Röntgenstrahlen auf die experimentellen Grundlagen einschließlich der Auswertverfahren mit einem kurzen Blick auf Besonderheiten der Neutronenstrahlen ein. Es ist gegenüber der 19. Auflage stark überarbeitet. Mit Stichworten Röntgenlinsen, Röntgenspiegel, Bildplatte, EXAFS, Synchrotronstrahlungsquellen und Röntgenlaser wird nun von faszinierenden Fortschritten der experimentellen Strukturuntersuchungsmethoden berichtet. Der begrüßenswerten Aktualisierung und Straffung zuliebe werden für diese Neuheiten spezielle ältere Verfahren der Strukturuntersuchung wie Weissenberg-, Drehkristall-, Seemann-Bohlin- und Guinier-Methode ebenso wie die Auswertestrategie der direkten Methoden weggelassen. Neu aufgenommen wurden Experimente mit Diamantstempelzellen und amorphem Proben.

War in der ersten Auflage Kristallwachstum und -auflösung noch der Morphologie zugeordnet, hat das Teilgebiet inzwischen unter dem Kapitel 4 „Kristallisation– Kristallwachstum– Kristallzüchtung“ (11 % des Buches) einen hervorgehobenen Stellenwert erhalten. Phasendiagramme zum Verständnis der Vorgänge bei der Temperaturänderung von Mehrstoffsystemen sind der Erörterung der Kristallisation (Keimbildung und Wachstum) und der Kristallzüchtung vorangestellt, wobei speziellere Wachstumsphänomene auf die Fachliteratur verwiesen werden. Die wichtigsten Verfahren der Kristallzüchtung haben in der neuen Auflage eine übersichtlichere und ausführlichere Neufassung erfahren, die auch der industriellen Bedeutung der Kristallzüchtung Rechnung trägt. Epitaxie und Topotaxie bilden den Abschluss der besonders für die Bauelemente-Fertigung relevanten Züchtungsverfahren. Während der Kristallisation laufen weitere physikalisch-chemische Vorgänge ab, die zum kristallographischen Verständnis unabdingbar sind, für die als eigenständige Themen

(Diffusion, Phasenübergänge, Strahlenwirkung) eine gestraffte Darstellung am Schluss des Kapitels 4 gefunden wurde.

Das umfangreichste Kapitel 5 „Kristallphysik“ (24 % des Buches) ist den physikalischen Eigenschaften gewidmet. Im Unterschied zu Darstellungen für Zwecke der Festkörperphysik wird die Anisotropie der Eigenschaften für alle Symmetriegruppen in den Mittelpunkt gestellt und damit zugleich keine Materialgruppe ausgeschlossen. Mit der Beschreibung durch Tensoren praktizieren die Autoren einen einheitlichen Algorithmus zur quantitativen Handhabung von Materialparametern auf der Ebene der Punktgruppensymmetrien. Der Behandlung konkreter Eigenschaften ist ein Abschnitt über Tensoren vorangestellt, aus dem der Leser die relevanten Grundlagen und verwendeten Bezeichnungsweisen in komprimierter Form entnehmen kann. Eine gewisse Vertrautheit mit der Tensoralgebra wird aber vorausgesetzt. So erschließt sich dem Leser auch die erstaunliche Vielfalt der anisotropen physikalischen Eigenschaften und der Aspekte ihrer technischen Nutzung. Die für spezielle Eigenschaftsbeschreibungen zweckmäßigen kontinuierlichen und die magnetischen Punktgruppen sind als Ergänzung zu Kapitel 1 anschließend dargestellt.

Mit der Ordnung der physikalischen Eigenschaften nach der Stufe des Tensors folgen die Autoren der Systematik, die auch Effekten höherer Ordnung einen Platz zuweist. Hysteresebefahene Erscheinungen ergänzen die jeweiligen hysteresefreien. So folgen auf Massendichte, Pyro- und Ferroelektrizität, thermische Ausdehnung, Wärmeleitung, elektrische Leitung, Dia- und Paramagnetismus, Ferro-, Antiferro- und Ferrimagnetismus. Sehr ausführlich, weil praktisch besonders bedeutsam und an anderer Stelle wenig beachtet, wird anschließend auf die Kristalloptik unter Berücksichtigung der nichtlinearen Suszeptibilität eingegangen. Dazu gehört auch die Einführung in den Gebrauch des Polarisationsmikroskops und der U-Tisch-Methode. Von den Tensoreigenschaften 3. und 4. Stufe werden Piezoelektrizität, Elastizität und Plastizität behandelt. Die letztere komplexe Materialeigenschaft lädt dann wegen Hysteresis und Nichtlinearität zwanglos zum Seitenblick auf Versetzungen und das Härteprüfverfahren ein.

War die Realstruktur in der ersten Auflage noch ein Anhängsel der Kristallstrukturlehre, hat sie nun in Kapitel 6 „Defekte in Kristallen (Realstrukturen)“ (8 % des Buches) die ihr gebührende Eigenständigkeit erreicht. Null- bis zweidimensionale Defekte und deren wichtigste Nachweismethoden mit Röntgen- und Elektronenstrahlen führen den Leser in die Grundbegriffe ein.

Den Abschluss bilden neben den Antworten auf 19 Fragen im Text das Literatur- und das Stichwortverzeichnis, ersteres gegenüber der 19. Auflage deutlich gestrafft und aktualisiert.

Die begrüßenswerte Überarbeitung lässt auch Wünsche für eine weitere offen. Die Verkleinerung der neu gezeichneten Bilder um etwa 20 % hat für den Text Raum geschaffen, erschwert aber zugleich die Lesbarkeit der Beschriftung einiger Abbildungen selbst (z. B. 1.5). Bei Fotos von Instrumenten vermisst man den Bezug zur Bildbeschreibung (z. B. 3.16), und bei Halbtonbildern einiger Polyeder ist der Flächenkontrast unzureichend (z. B. 1.62). Auf Seite 16 sollte als Urheber des Reflexionsgoniometers Victor Mordechai Goldschmidt statt Victor Moritz Goldschmidt genannt werden. Er berichtete schon 1893 darüber.

Das Literaturverzeichnis ist aktualisiert, stark gekürzt und streng alphabetisch geordnet worden. (Durch die versehentliche Einordnung des Autors M. I. Aroyo unter dessen Vornamen wird leider die zugehörige wichtige Datenquelle versteckt.) Tatsächlich nimmt die Nachfrage nach älterer Literatur ab und die nach elektronischen Medien zu. Das gibt dem Rezensenten

Gelegenheit, auf den für alle einschlägig Interessierte sehr ergiebigen „Bilbao Crystallographic Server“ (<https://www.cryst.ehu.es>) als weitere zitierwürdige Quelle mit Aroyo als Erstautor hinzuweisen, der eine Erwähnung in der nächsten Auflage verdient. Damit das anschließende Stichwortverzeichnis dem schnellen Zugriff auf ein behandeltes Thema dienen kann, sollte es im Umfang erweitert werden.

Insgesamt steht nunmehr eine aktualisierte Ausgabe des KLEBER zur Verfügung, die Studierenden der Kristallographie ebenso wie anderen materialwissenschaftlich Orientierten als Einführung sehr empfohlen werden kann. Ihr Vorzug besteht fort, einen Einblick in das Gesamtgebiet zu geben, das die Kristallographie als interdisziplinäres Arbeitsgebiet ausmacht. Mit dem Kapitel über Kristallstrukturlehre und -morphologie wird zugleich der zentrale Begriffsapparat zum quantitativen Umgang mit chemischen und physikalischen Eigenschaften in einem Umfang behandelt, wie er in Lehrbüchern von Nachbardisziplinen nicht geboten wird.

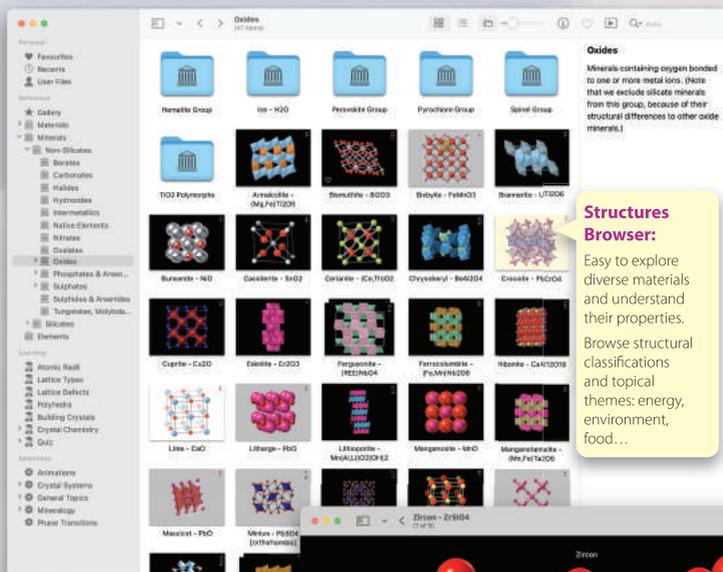
Peter Paufler, Dresden

NEW

ONLY WITH

CrystalViewer[®]

CRYSTAL STRUCTURES MADE EASY AND FUN



All-New Software for Teaching Crystal Structures



- ▶ Elegant interface to explore crystalline materials, their relationships & properties.
- ▶ Instant display of 1400+ structures (600 minerals).
- ▶ Rotatable 3D models, with annotation and keywords.
- ▶ Out-of-screen 3D stereo display: in colour.
- ▶ Tutorials, animations, quiz.

Structures Browser:

Easy to explore diverse materials and understand their properties. Browse structural classifications and topical themes: energy, environment, food...

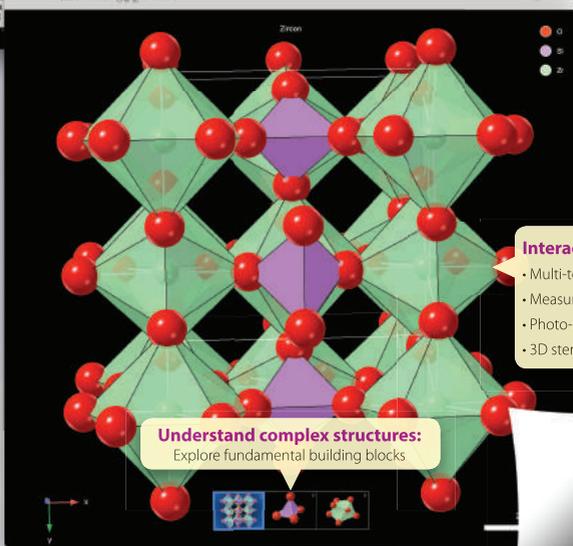
Low-Cost, Flexible Licensing

Visualization of 3D structures is a critical process in crystallography, but also a very personal one.

Our flexible licence lets you share software with all your students, so they can learn through play in their own time, on their own computers (also ideal for distance learning).



Native on Apple M1 and Intel



Interactive 3D viewer:

- Multi-touch rotation, scaling
- Measure distances, angles
- Photo-realistic graphics
- 3D stereo option

Understand complex structures:

Explore fundamental building blocks

Zircon, ZrSiO₄
Zircon is a zirconium silicate mineral, comprising independent silicate (SiO₄) tetrahedra, cross-connected via large ZrO₆ groups (twisted octahedra). The SiO₄ groups share edges to form chains along [100]. Zircon is found as an accessory mineral in igneous rocks and the presence of trace elements can induce a wide range of colours, leading to the mineral's popularity as a gemstone.
(Lithium and Thorium are common trace elements, and their presence can cause radiation damage, leading to a "smoky" colour.)

Explore Crystals in 3D
An Out-of-Screen Experience



DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN

BERICHT DES AK 21

„JUNGE KRISTALLOGRAPHEN“ / „YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS“



Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ ist seit seiner Gründung im Jahr 2013 zu einem der größten und aktivsten Arbeitskreise in der DGK gewachsen. Aktuell zählen 215 Mitglieder aus 15 verschiedenen europäischen und nicht-europäischen Ländern zum Arbeitskreis und vertreten unterschiedliche Gebiete der Kristallographie wie Materialwissenschaften, Chemie, Mineralogie, Biologie und Physik, aber auch die Kristallzüchtung. Erstmals stagnieren die Mitgliederzahlen des Arbeitskreises, was vor allem an der Covid-19-Pandemie-bedingten Absage von Veranstaltungen lag, die immer den größten Mitgliederzuwachs erbrachten. Trotzdem war es ein erfolgreiches Jahr für den Arbeitskreis und viele schöne Projekte zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses konnten auf den Weg gebracht werden.

Um das Netzwerk weiter auszubauen präsentieren sich die Jungen Kristallographen in verschiedenen virtuellen Netzwerken (ResearchGate, LinkedIn und XING), aber auch in den sozialen Medien (Facebook und Twitter) und stehen im Austausch mit europäischen Jungen Kristallographen sowie unserem Pendant in der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung (DGKK). Die DGK-Homepage <http://dgk-home.de/aks/jkyc> des Arbeitskreises bietet eine perfekte Übersicht über vergangene Veranstaltungen aber auch aktuelle Aktivitäten. In regelmäßigen Blog-Beiträgen stellen wir Mitglieder vor und informieren über aktuelle Tätigkeiten oder Themen, z. B. wie Kristallographie bei der Bekämpfung der Pandemie hilft (<https://dgk-home.de/x-ray-crystallography-sars-cov-2>). Weiterhin starteten wir eine Serie von Blog-Beiträgen (<https://dgk-home.de/oyp-research-teaching-studying>) in denen Mitglieder über ihre Erfahrungen und Eindrücke nach einem Jahr Pandemie und den daraus resultierenden Veränderungen für Forschung, Lehre und Studium berichten. Hier werden neben Erfahrungsberichten auch Lösungen und Konzepte für die digitale Forschung und Lehre vorgestellt. Gastbeiträge für diese Blogserie sind herzlich willkommen und können an Melanie Nentwich gesendet werden.

Weiterhin war der Arbeitskreis maßgeblich an der Einrichtung eines neuen Studierendenpreises der DGK, des Lieselotte-Templeton-Preises (<https://dgk-home.de/templeton-prize-for-students>) beteiligt. Mit dem Preis sollen ab 2021 herausragende Bachelor-, Master-, Diplom-, oder vergleichbare Abschlussarbeiten ausgezeichnet werden, die sich mit kristallographischen

Fragestellungen befassen. Nach der Idee der Einrichtung des Preises von Tina Weigel erarbeitete der Arbeitskreis eine Satzung und rief zu Vorschlägen für einen Namenspatron innerhalb der DGK auf. Auf der Mitgliederversammlung im März 2021 wurde die Einführung des Preises offiziell beschlossen. Der Arbeitskreis möchte sich nochmals recht herzlich bei allen Unterstützern für die Befürwortung und Hilfestellung bedanken. Insbesondere gilt der Dank Jan Philipp Wöhrle, Melanie Nentwich, Ullrich Englert, Manfred Weiss und dem Vorstand der DGK.

Als weiteres Projekt plant der Arbeitskreis in Zusammenarbeit mit dem Journal „Zeitschrift für Kristallographie“ eine Sonderausgabe zum Thema „Spotlight on Germany’s Young Crystallographers“ herauszubringen. Wir möchten mit der Sonderausgabe die Vielseitigkeit und Möglichkeiten der kristallographischen Forschung in Deutschland zeigen. Weiterhin soll auch den Nachwuchswissenschaftler*innen die Möglichkeit gegeben werden, Erfahrungen bei der Erstellung und Publikation wissenschaftlicher Ergebnisse zu sammeln. Die eigene und selbständige Arbeit des wissenschaftlichen Nachwuchses soll dabei in den Vordergrund gerückt werden. Pünktlich zum zehnten Treffen der Jungen Kristallographen auf der Jahrestagung der DGK 2022 soll die Sonderausgabe vorgestellt werden.

Persönliche Treffen des Arbeitskreises konnten im letzten Jahr leider nicht stattfinden. Das vom 4. bis 6. Oktober 2020 geplante 2. „Joint Meeting of the Young Crystallographers (DGK) and the Young Crystal Growers (DGKK)“ in Freiberg musste leider aufgrund der Covid-19-Pandemie abgesagt werden. Wir hoffen auf die Durchführung eines Herbsttreffens 2021 des Arbeitskreises, allerdings ist die Planung im Moment durch das Pandemiegeschehen erschwert. Aktuell werden verschiedene Online-Plattformen für die Umsetzung eines virtuellen Meetings ausprobiert.

Die DGK-Frühjahrstagung (<https://dggk-home.de/29th-annual-meeting-of-the-german-society-of-crystallography>) im März 2021 organisiert vom DESY in Hamburg war für uns die erste virtuelle Konferenz, an der wir aktiv bei der Planung und Durchführung mitgewirkt haben. Auch bei dieser Tagung waren die Jungen Kristallographen mit einer *Lightning Talk Session* und einem *Get Together* im Tagungsprogramm vertreten. In der ersten virtuellen Version der *Lightning Talk Session* via Zoom stellten fünf Teilnehmer in fünf Minuten ihre aktuelle Forschung vor. Die *Lightning Talk Sessions* wurden ergänzt durch die zugehörige *Poster Session*, die auf der Plattform REMO stattfand, in denen die Ergebnisse intensiv mit anderen Tagungsteilnehmenden diskutiert werden konnten. Wie auch in den letzten Jahren wurde der Preis für die beste Präsentation von der Firma STOE & Cie GmbH gesponsert. Der Preis wurde in diesem Jahr an Michael Rütten (Universität Hamburg) für seine Arbeiten zum Thema „Encapsulation of inorganic nanoparticles into novel *T. maritima* encapsulin variants“ verliehen (<https://dggk-home.de/mtp-michael-ruetten>).

Neben dem Mikrosymposium fand wie üblich während der Frühjahrstagung auch unser *Get Together* statt, bei dem die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises kurz zusammengefasst sowie kommende Events und Aktivitäten vorgestellt wurden. Hierbei wurde auch der bisherige Sprecher Jan Philipp Wöhrle (Albert-Ludwigs-Universität Freiburg) von Tina Weigel (TU Bergakademie Freiberg) abgelöst. Vielen Dank an Jan Philipp für deine hervorragende Arbeit der letzten Jahre. Als neuer stellvertretender Sprecher der Jungen Kristallographen wurde Constantin Buyer (Universität Stuttgart) gewählt. Constantin Buyer ist im Moment gleichzeitig der Beauftragte für die Sozialen Medien des Arbeitskreises bis ein Nachfolger gefunden wird. Auch unseren langjährigen Sekretär Marius Kremer (RWTH Aachen) verabschiedeten wir auf der DGK 2021 von seinem Posten. Wir möchten uns nochmal bei ihm für seine langjährige Unterstützung und hervorragende Arbeit bedanken und wünschen ihm viel Glück für seine

berufliche Zukunft. Der Posten des Sekretärs wird übergangsmäßig von Jan Philipp Wöhrle übernommen. Wir freuen uns natürlich sehr, dass Jan Philipp unserem Team mit all seiner Erfahrung erhalten bleibt. Außerdem möchten wir uns auch bei den Organisatoren vom DESY für die Umsetzung und Durchführung der ersten virtuellen DGK-Tagung ganz herzlich bedanken. Ein großer Dank gilt auch unserem jahrelangen Sponsor STOE & Cie GmbH.



Lightning Talk Session at the 29th Annual Meeting of the German Crystallographic Society



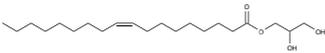
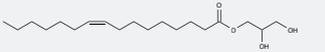
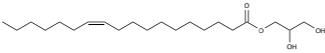
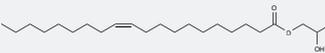
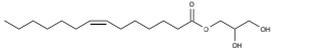
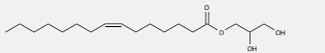
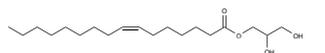
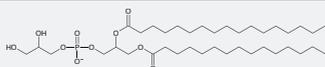
Jury			Poster-Prize Winner		Speaker
					
Martin Etter DESY Hamburg	Michael Teck STOE & CIE GmbH	Alexander Pöthig TU München	Michael Rütten University Hamburg		Marius Kremer RWTH Aachen
Session-Chairs					
				and Hans Gildenast from RTWH Aachen	
Tina Weigel TU Bergakademie Freiberg	Jan Philipp Wöhrle University Freiburg	Steven van Terwingen RTWH Aachen	Krishnayan Basuroy DESY Hamburg		

Nach dem virtuellen Jahr freuen wir uns sehr, uns hoffentlich bald wieder in Person auf einem unserer Meetings oder einer anderen kristallographischen Fachtagung zu treffen, auf welchen wir hoffentlich wieder erfolgreich zum Tagungsprogramm beitragen können. Wir sind auch sehr gespannt auf den Fortschritt unserer anderen Projekte, wie der Veröffentlichung der geplanten Sonderausgabe und der Mitarbeit im Preiskomitee des Lieselotte-Templeton-Preises und hoffen, dass wir die Früchte unserer Arbeit in Form einer Druckausgabe und der Verleihung des ersten Preises an herausragende Studierende auf der DGK-Jahrestagung 2022 in München ernten können.

Tina Weigel, Freiberg und Constantin Buyer, Stuttgart

Membrane protein crystallization using lipidic cubic phase (LCP) is proving to be a successful methodology for obtaining good quality diffracting crystals from membrane proteins due to its membrane native-like environment^[1].

Jena Bioscience offers LCP Lipids and Phospholipids to form a stable lipidic cubic phase.

LCP Lipid / Phospholipid	Lipid structure	Cat.-No.	Amount
Monoolein 9.9 MAG		X-LCP-101	1 g
Monopalmitolein 9.7 MAG		X-LCP-102	1 g
Monovaccenin 11.7 MAG		X-LCP-103	100 mg
Monoeicosenoin 11.9 MAG		X-LCP-104	1 g
7.7 MAG		X-LCP-105	100 mg
7.8 MAG		X-LCP-106	100 mg
7.9 MAG Stable at low temperatures ^[2]		X-LCP-107	100 mg
DSPG		X-LCP-108	1 g

JBScreen LCP is designed for efficient screening of crystallization conditions in LCP with the lipids from the table above.

JBScreen	Cat.-No.	Amount
JBScreen LCP HTS	CS-213L	96 solutions (1,7 ml each)
JBScreen LCP	CS-340	4x24 solutions (10 ml each)

References:

- [1] Landau and Rosenbusch (1996) Lipidic cubic phases: a novel concept for the crystallization of membrane proteins. *PNAS* **93**:14532.
[2] Misquitta *et al.* (2004) Rational design of lipid for membrane protein crystallization. *Journal of Structural Biology* **148**:169.



PERSONALIA

JUBILARE 2021

Name	Ort	Alter
Dr. Kyozaburo Kambe	Berlin	95
Prof. Dr. Rudolf Allmann	Marburg	90
Prof. Dr. Werner Fischer	Marburg	90
Dr. Horst Ködderitzsch	Eckartsberga	90
Dr. Ulrich Sondermann	Marburg	85
Prof. Dr. Horst P. Beck	Saarbrücken	80
Prof. Dr. Michael Czank	Kiel	80
Dr. Joachim Eck	Bleckede	80
Prof. Dr. Hartmut Fueß	Darmstadt	80
Dr. Amaresh Gupta	Swistal-Heimerzheim	80
Dr. Irmela Hähnert	Berlin	80
Prof. Dr. Georg Hinrichsen	Berlin	80
Dr. Rudolf Hundt	Bonn	80
Dr. Dieter Schmitz	Aachen	80
Prof. Dr. Jochen Schneider	Hamburg	80
Dr. Gerd Treffer	Chemnitz	80
Dr. Hans Weitzel	Darmstadt	80
Dr. Rupert Wögerbauer	Mainstockheim	80
Dr. Dieter Zobel	Berlin	80
Dr. Wolfgang Adlhart	Wien	75
Prof. Dr. Klaus Bente	Leipzig	75
Dr. Claus-Dieter Knöchel	Darmstadt	75
Dr. Jörg Trempler	Merseburg	75
Dr. Manfred Zabel	Regensburg	75
Dr. Karl Berroth	Rauenstein	70
Prof. Dr. Götz Eckold	Göttingen	70
Dr. Jürgen Glinnemann	Frankfurt/M.	70
Dr. Hans-Joachim Hoebler	Leipzig	70
Dr. Christian Hohlfeld	Potsdam	70
Prof. Dr. Peter G. Jones	Braunschweig	70
Dr. Hans-Joachim Klein	Kiel	70
Prof. Dr. Peter Klüfers	München	70
Rainer Kryschi	Kaarst	70
Dr. Matthias Schneider	Rostock	70
Dr. Reinhard Uecker	Berlin	70

Prof. Dr. Arnold Adam	Clausthal-Zellerfeld	65
Prof. Dr. Johannes Beck	Bonn	65
Prof. Dr. Christian Betzel	Hamburg	65
Prof. Dr. Hellmut Eckert	Münster	65
Dr. Roland Geray		65
Juliana Grell	Dresden	65
Dr. Helga Hoier	Stuttgart	65
Prof. Dr. Hans-Joachim Kleebe	Darmstadt	65
Prof. Dr. Gert Heino Klöß	Leipzig	65
Dr. Stephan König	Halle	65
Dr. Gabriele Lampert	Berlin	65
Dieter Linke	Berlin	65
Dr. Bernd Marler	Bochum	65
Ellen Nowack	Aachen	65
Prof. Dr. Herbert Pöllmann	Halle	65
Dr. Maximilian Stadler	Burghausen	65
Dr. Andreas Zahn	Osnabrück	65
Dr. Gerhard Zorn	München	65

VERSTORBENE MITGLIEDER

Prof. Dr. Fritz Parak

Fakultät für Physik, Technische Universität München

† 24. Juni 2020

Dr. Ute Baumeister

Institut für Physikalische Chemie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

† 31. Juli 2020

Prof. Dr. Wolfgang Jeitschko

Anorganisch-Chemisches Institut, Westfälische Wilhelms-Universität Münster

† 5. August 2020

Dr. Gerhard Pieper

Schwalbach im Taunus

† 6. August 2020

Prof. Dr. Heinrich Arnold

Institut für Kristallographie, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen

† 19. Oktober 2020

Dr. Burkhard Ziemer

Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

† 6. Dezember 2020

Prof. Dr. Ekkehart Tillmanns

Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien

† 30. Dezember 2020

Dr. Hans Boysen

Department für Geo- & Umweltwissenschaften, Ludwig-Maximilians-Universität München

† 19. März 2021

Prof. Dr. Otto Wilhelm Flörke

Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum

† 28. Juli 2021

MAX-VON-LAUE-PREIS 2021 AN DOROTHEE LIEBSCHNER

IN ANERKENNUNG IHRER ARBEITEN ZU POLDER MAPS FÜR DIE
VERBESSERTE BERECHNUNG UND DARSTELLUNG NIEDRIGER
ELEKTRONDICHTE BEI DER BEHANDLUNG VON SCHWACH GEBUNDENEN
LIGANDEN IN DER MAKROMOLEKULAREN KRISTALLOGRAPHIE,
INSBESONDERE AUCH HINSICHTLICH DER VERBESSERUNG DES
RATIONALEN WIRKSTOFFDESIGNS



Frau Liebschner absolvierte 2002–2007 ein trinationales Physikstudium in Saarbrücken, Luxemburg und Nancy. Sie promovierte 2011 in Nancy über elektrostatische und strukturelle Eigenschaften in Proteinstrukturen bei sehr hoher Auflösung. Daran schlossen sich zwei jeweils ca. zweijährige Postdoc-Aufenthalte an Synchrotrons in den USA (*Advanced Photon Source*, Chicago) und in Japan (*Photon Factory*, Tsukuba) an. Hier bearbeitete sie u. a. Fragestellungen zu Strahlenschäden, Genauigkeit von Beugungsdaten und Phasenbestimmung mittels schwacher anomaler Streuung bei langen Wellenlängen (S-SAD).

Seit 2015 ist Frau Liebschner als Wissenschaftlerin im Bereich Methoden- und Softwareentwicklung für makromolekulare Kristallographie im Umfeld der *Advanced Light Source* in Kalifornien tätig. Dort ist sie Teil des Phenix-Entwicklerteams am *Lawrence Berkeley National Laboratory*. Phenix ist eines der wichtigsten Programmpakete für die makromolekulare Kristallographie und inzwischen auch für die Proteinstrukturbestimmung mittels Elektronenmikroskopie. Frau Liebschner trug in den letzten Jahren wesentlich zur Weiterentwicklung des Programmpakets bei, z. B. im Bereich Validierung von Proteinstrukturen, die mittels Neutronenkristallographie bestimmt wurden. Sie ist Erstautorin eines Artikels in *Acta Cryst. D*, der die neuesten Entwicklungen in Phenix beschreibt und sich schon zu einem Zitationsklassiker entwickelt hat. Aktuell ist er auf der Internetseite von *Acta Cryst. D* als meistgelesen und meistzitiert aufgeführt.

In der Proteinkristallographie weltweit bekannt ist Frau Liebschners Entwicklung der so genannten *Polder Maps*. Dabei handelt es sich um eine neue Art der Behandlung von *Bulk-Lösungsmittel* bei der Berechnung der Elektronendichte in *Omit-Maps*, die eine bessere und klarere Darstellung schwacher Elektronendichte ermöglicht, wie sie z. B. bei niedrigem Besetzungsgrad auftritt. Die Berechnung von *Polder Maps* ist in Phenix implementiert. *Polder Maps* wurden von Proteinkristallographen schnell akzeptiert und werden derzeit umfangreich verwendet, da sie besonders bei der Modellierung von schwach gebundenen Liganden (z. B. Inhibitoren für Enzyme oder Fragmente als Kandidaten für die Entwicklung neuer pharmazeutischer Wirkstoffe) große Vorteile gegenüber den bisherigen Methoden bieten. Der Artikel zu *Polder Maps* (Liebschner *et al.*: Acta Cryst. D 73, 2017, 148–157) wurde schon über 200 Mal zitiert.

Auch im Bereich Wissensvermittlung und Lehre ist Frau Liebschner sehr aktiv. Sie fungierte schon in mehreren nationalen und internationalen Kristallographiekursen wie dem *CCP4 Study Weekend* als Tutorin. Außerdem ist sie verantwortlich für einen YouTube-Kanal mit kurzen Einführungen zu einzelnen Funktionen in Phenix.

Hartmut Niemann, Bielefeld

WILL - KLEBER - GEDENKMÜNZE 2021 AN MANFRED WEISS

IN WÜRDIGUNG SEINER WICHTIGEN METHODISCHEN ENTWICKLUNGEN
IN DER MAKROMOLEKULAREN KRISTALLOGRAPHIE, EINSCHLIEßLICH
SEINER VERDIENSTE UM DIE BEREITSTELLUNG VON MESSPLÄTZEN
FÜR DIE BIOLOGISCHE KRISTALLOGRAPHIE AM
BERLINER ELEKTRONENSYNCHROTRON

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie zeichnet Herrn Dr. Manfred S. Weiss vom Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (HZB) mit der Will-Kleber-Gedenkmünze 2021 aus. Manfred Weiss erhält den Preis in Würdigung seiner wichtigen methodischen Entwicklungen in der makromolekularen Kristallographie einschließlich seiner Verdienste um die Bereitstellung von Messplätzen für die biologische Kristallographie am Berliner Elektronensynchrotron BESSY des Helmholtz-Zentrums Berlin. Seine bahnbrechenden Analysen von Kristallstrukturen biologischer Makromoleküle, seine richtungsweisenden Beiträge zur Theorie der Proteinstruktur, seine beeindruckende Produktivität als Wissenschaftler sowie seine vielfältigen Verdienste um die Organisation der Kristallographie im internationalen Kontext verdienen ebenfalls erwähnt zu werden.

Manfred Weiss studierte Chemie an der Universität Freiburg, wo er auch sein Diplom erwarb und zum Dr. rer. nat. promoviert wurde (*summa cum laude*). Seine Doktorarbeit fertigte er unter Prof. Georg E. Schulz an, einem Pionier der Proteinkristallographie in Deutschland, der 2019 mit der Carl-Hermann-Medaille der DGK ausgezeichnet wurde. Nach dreijähriger Postdoktorandenzeit im Labor von Prof. David Eisenberg an der *University of California at Los Angeles* (UCLA) schloss Manfred Weiss sich dem Labor von Prof. Rolf Hilgenfeld am Institut für Molekulare Biotechnologie (IMB) in Jena an. Seit 2001 ist Manfred Weiss in leitender Funktion an Synchrotron-Einrichtungen tätig, zunächst an der *EMBL Outstation* am Deutschen Elektronensynchrotron (DESY) in Hamburg und seit 2009 bei BESSY am Helmholtz-Zentrum Berlin, dessen Messplätze für Makromolekulare Kristallographie er seit Anfang 2016 eigenständig leitet.

Besondere Verdienste konnte Manfred Weiss sich bei der Entwicklung kristallographischer Methoden für die Analyse von Proteinstrukturen erwerben. Ein wichtiger Aspekt dabei ist die Entwicklung von Qualitätsindikatoren (*R*-Werten) für Röntgendiffraktionsdaten von makromolekularen Kristallen. Seine wichtigste Publikation zu diesem Thema wurde mehr als fünfhundertmal zitiert, was die Akzeptanz der Analysemethode in der kristallographischen Gemeinschaft eindrücklich dokumentiert. Ebenfalls weit genutzt und vielfältig zitiert sind von Manfred Weiss initiierte Verfahren zur Indizierung und Reduzierung biomolekularer Röntgenbeugungsdaten in einem Expertensystem mit graphischer Nutzeroberfläche, sowie zur halbautomatischen Prozessierung von Diffraktionsdaten einschließlich der Phasierung über verschiedene komplementäre Ansätze. Seinen methodischen Beiträgen zur makromolekularen Kristallographie ist gemein, dass sie immer auf Qualitätssicherung und breite Anwendbarkeit in einer sich erweiternden und diversifizierenden strukturbioologischen Nutzergemeinschaft abzielen. *Crystallography for the people!*

Sowohl in seiner Zeit bei DESY als auch heute bei BESSY war es sein zentrales Anliegen, Nutzern Synchrotronstrahlung für kristallographische Experimente in bestmöglicher Weise zur Verfügung zu stellen. Besonders bei BESSY hat Manfred Weiss wesentlich dazu beigetragen,

die Messplätze so nutzerfreundlich und produktiv zu gestalten, dass sie mit vergleichbaren Einrichtungen an deutlich brillanteren Quellen konkurrieren können. Eine Suche am heutigen Tag mit den Stichworten „Synchrotron Site“ und „BESSY“ in der Proteindatenbank (PDB) förderte 3612 Einträge zutage, entsprechend der Zahl von Proteinstrukturen, die auf Messungen an dieser Quelle zurückgehen. Viele dieser Strukturen führten zu herausragenden Publikationen in Fachzeitschriften wie *Nature*, *Science*, *Cell*, usw., an denen Manfred Weiss und seine Kollegen in der Regel nicht als Autoren beteiligt sind, die ohne das BESSY-Team aber nicht möglich gewesen wären. Auch die oben beschriebenen kristallographischen Methoden wurden in der Regel mit Blick auf die Erfordernisse diverser Synchrotron-Nutzer entwickelt.

Seine Beiträge zur Kristallographie erschöpfen sich nicht in methodischen Arbeiten, sondern schließen auch wichtige und wegweisende Proteinstrukturanalysen ein. Eine herausragende Arbeit auf diesem Gebiet gelang Manfred Weiss bereits mit seiner Dissertation, in der er erstmalig ein Protein aus der bakteriellen Außenmembran strukturell beschreiben konnte. Dieses Protein, Porin, besitzt einen seinerzeit noch völlig unbekanntem Faltungstyp als β -Fasstruktur, der ein bleibendes Paradigma für Membranproteine etablierte. In jüngster Zeit interessiert Manfred Weiss sich zunehmend für die Nutzung von Synchrotronstrahlung und kristallographischer Methoden in der pharmakologischen Ligandenentwicklung. Dies ist eine wichtige Anwendung der makromolekularen Kristallographie, für die noch ein weites Forschungsfeld offensteht.

Auch abseits des engeren Gebiets der Kristallstrukturanalyse konnte Manfred Weiss mit Beiträgen zur Theorie der Proteinstruktur deutlich sichtbare Spuren hinterlassen. Gemeinsam mit Kollegen aus Jena publizierte er wichtige Arbeiten zu Vorkommen und Bedeutung von CH- π -Interaktionen und *cis*-Peptidbindungen in Proteinen. Auf beiden Themenfeldern konnte er damit biophysikalische Prinzipien aufklären, die für Strukturbildung, Stabilität und Funktion von Proteinen essentiell sind.

Wenn auch bibliometrische Indikatoren bei der Würdigung wissenschaftlicher Leistung nicht im Vordergrund stehen dürfen, lohnt doch eine Gesamtschau auf seine Publikationen. Sowohl deren Zahl, insbesondere der Anteil seiner Erst- und Letztautor-Publikationen, als auch der Umfang der Zitierungen lassen den Schluss zu, dass seine wissenschaftliche Produktivität über alle Arbeitsgebiete hinweg von sehr hoher Qualität ist und seine Publikationen von einem breiten internationalen Publikum wahrgenommen werden.

Eine Würdigung als Wissenschaftler bliebe unvollständig, wenn nicht sein vielfältiges Engagement für die nationale und internationale Gemeinschaft der Kristallographen Erwähnung fände. Seine vielfältigen Funktionen in der DGK, der IUCr und anderen Organisationen weisen ihn als vielfältig interessierten und engagierten Kristallographen aus. Besonders hinzuweisen ist auf seine langjährige Tätigkeit als *Co-Editor* und *Section Editor* für Zeitschriften der *Acta Crystallographica*-Reihe, seinen Einsatz für die kristallographische Aus- und Weiterbildung in der *IUCr Commission on Crystallographic Teaching* und als Organisator vielfältiger Workshops.

Seine innovativen Beiträge zur Methodik und Anwendung biokristallographischer Strukturanalyse im breiten Kontext seiner wissenschaftlichen Tätigkeiten weisen Herrn Dr. Manfred S. Weiss als hervorragenden Träger der Will-Kleber-Gedenkmünze 2021 aus.

Udo Heinemann, Berlin

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2021 AN KARL FISCHER

IN ANERKENNUNG SEINES WISSENSCHAFTLICHEN LEBENSWERKES,
NAMENTLICH SEINER BEITRÄGE ZUR ENTWICKELUNG DER
KRISTALLOGRAPHISCHEN ANWENDUNG VON SYNCHROTRONSTRAHLUNG UND
SEINER PIONIERARBEITEN ZUR NUTZUNG ANOMALER DISPERSION FÜR
UNKONVENTIONELLE STRUKTURAUFKLÄRUNG



ERWEITERTE FASSUNG DER LAUDATIO GEHALTEN AM 15. MÄRZ 2021
ANLÄSSLICH DER 29. JAHRESTAGUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR
KRISTALLOGRAPHIE (VIRTUELL) IN HAMBURG. DIE ÜBERGABE DER
CARL-HERMANN-MEDAILLE AN DEN LAUREATEN ERFOLGTE GETRENNT IN
SEINER LANGJÄHRIGEN WIRKUNGSSTÄTTE, DER UNIVERSITÄT DES
SAARLANDES IN SAARBRÜCKEN.

MIT EINER ERINNERUNG AN SEINEN VATER DR. EMIL FISCHER.

Die Satzung für die Carl-Hermann-Medaille will das „wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten auf dem Gebiet der Kristallographie im weitesten Sinne“ gewürdigt wissen. Wir werden gleich sehen, dass unser Laureat diesem Anspruch mit seinem wissenschaftlichen Werk und seiner Persönlichkeit in besonderem Maße gerecht wird.

Dabei verlief sein Start in die Wissenschaft keineswegs geradlinig. Am 4. Juli 1925 in Zwickau/Sachsen geboren gehörte er zu jener Generation junger Männer, die als Achtzehnjährige noch von Juni 1943 bis Mai 1945 in die deutsche Wehrmacht zu den Kämpfen

des 2. Weltkrieges eingezogen wurden. Mit einem Sonderabitur (November 1943) im Anschluss an die militärische Grundausbildung erlangte er zwar noch die Hochschulreife und eine rein formale „Kriegs-Immatrikulation“ für Technische Physik an der TH Dresden, wurde aber dann als Wehrdienstpflichtiger ab Juni 1944 in Kämpfe gegen russische Landstreitkräfte einbezogen.

Die Entbehrungen von Krieg und Nachkrieg haben ihn geprägt, wobei das unmittelbare Erleben des Ost-West-Konfliktes belastend hinzukam. Als Bewerber um einen Studienplatz im Fach Chemie bekam er das 1946 direkt zu spüren. Denn in der Sowjetischen Besatzungszone (SBZ), zu der seine Geburtsstadt Zwickau nach Ende des 2. Weltkrieges gehörte, wurde unter dem Einfluss der Sowjetischen Militäradministration und aus Moskau zurückgekehrter KPD-Mitglieder der grundlegende Umbau der Gesellschaft begonnen. Dazu gehörte auch Kindern aus Kreisen des bisherigen Bildungs- und Wirtschaftsbürgertums den Zugang zum Hochschulstudium zu erschweren oder zu verwehren⁴. Karl Fischers Bewerbung war „aus gesellschaftlichen Gründen unerwünscht“, weil sein promovierter Vater Emil Fischer jenen bürgerlichen Vertretern der Gesellschaft zugerechnet wurde⁵. Und so verließ er (wie zahlreiche Altersgenossen auch⁶) mit Unterstützung seiner Eltern illegal den sowjetischen Einflussbereich (damit auch den der im April 1946 gegründeten SED) und bewarb sich erfolgreich für den Studiengang Chemie ab 1946 an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen im Amerikanischen Sektor Deutschlands.

An dieser Stelle sei noch ein Blick auf seinen Vater geworfen, dessen Wirken gleichermaßen für sich genommen und für den Werdegang seines Sohnes Karl wichtig werden sollte. Emil Fischers (geboren 31.05.1895 im „Musikwinkel“ Markneukirchen) Neigung und Begabung für die Lehrer-Laufbahn äußerte sich früh. Nach der Volksschule absolvierte er von 1909 bis 1914 ein „Lehrer-Seminar“ (mit Internat) in Auerbach/Vogtland, arbeitete anschließend von Ende 1914 bis Frühjahr 1925 als Vikar, Hilfslehrer und Volksschullehrer. Im 1. Weltkrieg wurde er 1917 als Soldat verwundet. Anschließend schloss er das Studium für das „Höhere Lehramt“ (Mathematik, Physik, Chemie) vom Sommersemester 1920 bis Wintersemester 1923/24 in Leipzig ab und wirkte danach von 1925 bis 1945 als Studienassessor/-rat in Zwickau. Durch den Dreiklang dieser Fächer wurde Karl Fischer von Anfang an geprägt. Mit einer externen Promotion an der Universität Gießen bei Prof. Jaffé⁷ im Mai 1929 demonstrierte sein Vater die besondere Neigung und den Willen zu naturwissenschaftlicher Forschung. Dass er zu seinen Hobbies Mineralogie und Kristallographie zählte, sollte sich ebenfalls auf den Sohn übertragen.

Der gesellschaftliche Umbruch 1945 veränderte aber zunächst einmal die Lebensumstände der Familie Emil Fischer schlagartig. Allein die Abschaffung des Beamtenstatus in der SBZ und damit die Entlassung aus dem öffentlichen Dienst bedeutete wirtschaftlichen Abstieg für die Betroffenen. In zwei Privatbetrieben mit chemischem Profil (Zwickau, Werdau) fand

⁴ M. Lienert: Zwischen Widerstand und Repression. Studenten der TU Dresden 1946–1989. Böhlau Verlag, Köln, 2011.

⁵ Die Bewertung von Studienbewerbern nach sozialer Herkunft der Eltern setzte sich in der DDR fort. Die Zuordnung zur privilegierten Kategorie „Arbeiterkind“ trieb dabei merkwürdige Blüten. So galten z. B. auch Kinder von Offizieren der Volksarmee als dazugehörig. Zugleich gewährte man Kindern von Ärzten uneingeschränkt Zugang zum Studium, um einem Argument für Westflucht dieser Berufsgruppe zu begegnen.

⁶ Er berichtet von 20 der 22 überlebenden Klassenkameraden, die den Weg nach dem Westen einschlugen.

⁷ George Jaffé wirkte längere Zeit an der Universität Leipzig mit einem breiten Angebot von Vorlesungen, wo ihn Emil Fischer kennen gelernt haben dürfte. Jaffé war 1916 zunächst zum außerordentlichen Professor und 1923 zum planmäßigen a. o. Professor für Mathematische Physik in Leipzig berufen worden. 1926 nahm er den Ruf auf eine ordentliche Professur für Theoretische Physik der Universität Gießen an, bis er 1933 wegen seiner jüdischen Abstammung entlassen wurde. Nach Beteiligung an privaten Forschungsprojekten in Freiburg/Br. emigrierte Jaffé 1939 in die USA.

Dr. Emil Fischer zunächst Anstellung bis 1953, mit wenigen Fern-Lehraufträgen der Bergakademie Freiberg und der TH Dresden als Nebenbeschäftigung. Auch als ehrenamtlicher Kustos der Mineralogischen Sammlung war er bis 1953 unterwegs. 1954 wurde seine Expertise durch Bestellung zum Kustos der Mineralogischen Sammlungen der Humboldt-Universität honoriert, verbunden mit Lehraufträgen im Institut für Mineralogie und Kristallographie der gleichen Hochschule. Dessen Direktor Will Kleber dankte ihm im Vorwort zur ersten Auflage des Lehrbuchs „Einführung in die Kristallographie“⁸ 1955 ausdrücklich für das Korrekturlesen in dieser Eigenschaft. Und das mit gutem Grund, denn E. Fischer hatte seine eigene Lehrerfahrung zu diesem Zeitpunkt schon zu einem Manuskript zusammengefasst und stand dem Stoff sehr nahe⁹. Zehn Jahre später präsentierte er eine erweiterte Fassung in Form von Lehrbriefen für das Fernstudium¹⁰, die den Bedürfnissen des Selbststudiums besonders gut entsprachen. 1971 erhielt er die Erlaubnis¹¹, zu seiner Tochter nach München auszureisen. Am 11.02.1975 verstarb Emil Fischer im Pflegeheim Schäftlarn bei München.

Wir kommen zurück auf Karl Fischers Immatrikulation für den Diplomstudiengang Chemie im Sommersemester 1946 an der Universität Erlangen. Das ursprüngliche Ziel eines eigenen Chemielabors nach dem Diplom ließ er im Laufe des Studiums auf Empfehlung von Prof. Andreß¹² zugunsten einer Universitätslaufbahn fallen. Diesem Hochschullehrer verdankte Karl Fischer auch die Anstellung als wissenschaftliche Hilfskraft in der wirtschaftlich angespannten Phase des Studiums nach der Währungsreform 1948–1952. K. Andreß betreute nach der Diplomarbeit [1]¹³ noch die anschließende Promotion in Erlangen 1954 [2]¹⁴. Dabei beteiligte sich K. Fischer auch am Gerätebau für die experimentelle Forschung (z. B. [3, 4]).

Mit dem darauffolgenden Wechsel auf eine Assistentenstelle am Institut für Mineralogie und Kristallographie der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt/M. 1955–1960 und 1961–1962 folgte er zugleich dem Rat des Ko-Referenten seiner Dissertation Prof. Ernst¹⁵ zur fachlichen Grenzüberschreitung Chemie → Geowissenschaften. Das Frankfurter Institut unter Leitung von O’Daniel¹⁶ befasste sich schwerpunktmäßig mit Silikatstrukturen und pflegte neben Industriekontakten regen internationalen Austausch. Das spiegelt sich in der Themenwahl der Habilitationsschrift [5] und in seinem Studienaufenthalt¹⁷ bei Prof. Buerger¹⁸ von 1960

⁸ W. Kleber: Einführung in die Kristallographie. VEB Verlag Technik, Berlin, 1956.

⁹ E. Fischer: Einführung in die geometrische Kristallographie, Akademie-Verlag, Berlin, 1956.

¹⁰ E. Fischer: Einführung in die mathematischen Hilfsmittel der Kristallographie: 1/2 Geometrie der Gitter; 3 Gruppentheorie der Kristallformen, der Gitter und Strukturen; 4/5 Fouriertheorie, Herausgegeben von der Hauptabteilung Fernstudium der Bergakademie, Freiberg, 1966.

¹¹ Behördliche Genehmigung wurde nach förmlichem Antrag oft erst Jahre später und vorzugsweise Rentnern erteilt. Familienzusammenführung galt – wie im vorliegenden Fall – als politisch weniger verdächtig. Aber Renten- und Besitzansprüche gegenüber der DDR gingen ebenso wie die von der DDR-Regierung eingeführte eigene Staatsbürgerschaft verloren.

¹² Karl Rudolf Andreß (*1894, †1976), Prof. für Technische Chemie an der FAU Erlangen 1939–1960.

¹³ Aus Elementarzelle und Raumgruppe wurde der wahrscheinliche (Ketten-)Polymerisations-Grad „unendlich“ gefunden. In einem anderen Fall ergab sich der (Ring-) Polymerisierungsgrad 4.

¹⁴ Auch hier spielte die Bestimmung des Polymerisierungsgrades eine zentrale Rolle [49]. Außerdem Entwicklung eines Analog-Rechengeräts für Struktur-Amplituden und eines Schwärzungsmessers für Einkristallreflexe (Prädikat „summa cum laude“).

¹⁵ Theodor Karl Heinrich Ernst (*1904, †1983), Prof. für Mineralogie an der FAU Erlangen 1950–1972.

¹⁶ Herbert O’Daniel (*1903, †1977), Prof. für Mineralogie 1947–1972 an der Goethe-Universität Frankfurt/M.

¹⁷ Wahrnehmung eines Fulbright-Stipendiums als „Invited Fellow“ der „School for Advanced Studies“ am *Massachusetts Institute of Technology* (Cambridge, USA) in der Arbeitsgruppe M. J. Buerger.

¹⁸ Martin Julian Buerger (*1903, †1986), promovierter Mineraloge, Direktor der „School for Advanced Studies“. Von besonderem Einfluss auf US-amerikanische und internationale Gremien der Mineralogie und Kristallographie. Autor von Standardlehrwerken der Kristallographie und originären Untersuchungen zur Polymorphie und Zwillingsbildung.

bis 1961. Die Zeit in den USA beflügelte seine Arbeiten zum Atomformfaktor¹⁹ und damit die Schwerpunktsetzung der folgenden Forschungsprojekte. Nach Rückkehr in das Frankfurter Institut 1961, habilitierte er sich 1962 [5]²⁰ und erhielt den Ruf als Ordentlicher Professor²¹ für Kristallographie am Mineralogischen Institut der Universität des Saarlandes (Direktor F. Rost²²), den er im April 1964 annahm.

Seine Beziehungen zu Forschungseinrichtungen der USA blieben eng und fruchtbar. Darauf verweisen Sabbaticals von zwei Gast-Professoren 1968 und 1973 aus den USA in Saarbrücken und dazwischen 1971 sein Sabbatical als Gast-Professor an der *University of Minnesota* (St. Paul, USA). Auch am für die europäische Strukturforchung wichtigen *Institut Laue-Langevin* (ILL, Grenoble) verbrachte er 1975 ein halbes Sabbatical als Gast.

Mit dieser Berufung begann eine sehr fruchtbare Schaffensperiode als Vertreter des Faches Kristallographie sowohl an der Universität in Saarbrücken als auch in überregionalen Gremien der Forschung und Forschungsförderung. Sie hält über seine Emeritierung als Hochschullehrer im Oktober 1993 hinaus²³ bis heute an, wobei inhaltliche Fokussierung einerseits und Grenzüberschreitung zu Nachbardisziplinen andererseits zwei Säulen seines erfolgreichen Wirkens bilden.

Die Einrichtung des Instituts für Kristallographie²⁴ (nach seinen eigenen Worten „kleinstes der Bundesrepublik“) war mit dem Aufbau von Lehrveranstaltungen für die Studiengänge Geowissenschaften, Chemie²⁵ und Festkörper-Physik²⁶ verbunden, mit denen Grundlagen und moderne Methoden der Strukturforchung vermittelt wurden. Von hier aus erfolgte auch die Koordinierung des Aufbaus und der Nutzung von zwei Großgeräten für Synchrotronstrahlung am DESY in Hamburg²⁷ einschließlich eigener Arbeitsgruppe vor Ort. Zu deren Aufgaben gehörte die Weiterentwicklung der Messinstrumente und der Software.

Die inhaltliche Fokussierung der Forschung auf die Anwendung resonanter anomaler Streuung von Röntgenstrahlen erwies sich als sehr erfolgreich. Karl Fischer hat sehr früh die hervorragenden Möglichkeiten gesehen, die die Synchrotronstrahlung unter Ausnutzung der abstimmbaren Wellenlänge, der Polarisation und ihrer hohen Intensität für die quantitative Bestimmung des Atomformfaktors bot. Als 1981 in Hamburg das „Hamburger Synchrotron-

¹⁹ Dazu gehören ein Basis-Programm zum Verfeinern des Atomstreuvermögens f_j (W. Busing mit Karl Fischer als Gast im *Oak Ridge National Lab*, Tennessee) und die Publikation „Note on the False Symmetry Effect (Templeton Effect)“ [57].

²⁰ Mit den erwähnten Rechentechniken zum Verfeinern von Atomstreuvermögen erstmaliges Ermitteln von Teil- oder Misch-Besetzungen diverser Punktlagen, neue Detailstruktur von zwei Zeolithen, Diskussion anisotroper Debye-Waller-Faktoren (Benitoit) bzw. der Fe-Mg-Verteilung (Cummingtonit).

²¹ Damals bewarb man sich nicht um eine Professur, man wurde empfohlen. Der Status des ordentlichen Professors entspräche jetzt der Besoldungsstufe W3.

²² Franz Rost (*1911, †1988), o. Prof. für Mineralogie und Petrographie an der Univ. d. Saarlandes 1958–1979.

²³ Seit 2001 mit Emeritus-Zimmer in der Fachrichtung Physik/Experimental-Physik (früher Technische Physik).

²⁴ Ab März 1971 mit dem Status des eigenständigen Instituts im damaligen Fachbereich Geologie, Mineralogie. Nach einer weiteren Strukturänderung 1984 dem Fachbereich (später Fakultät für) Physik zugeordnet.

²⁵ Darunter abgestufte Röntgenkurse und Kristallstruktur-Bestimmungen im Rahmen von Forschungs-kooperation. Kontakt zur Pharmazie zwecks Entscheidung über Links/Rechts-Konfiguration eines Medikaments. 11 Service-Strukturanalysen für Chemie und Pharmazie veröffentlicht in *Cryst. Struct. Comm.* 4 bis 9, 1975 bis 1980; K. Fischer meist letzter Autor.

²⁶ Neben Kurslehrveranstaltungen im Zeitraum 1974–89 auch Veranstaltungen und Experimente für den Sonderforschungsbereich „Ferroelektrika“ (Initiator H. Müser).

²⁷ Das Deutsche Elektronen-Synchrotron (DESY) wurde 1964 mit der Beschleunigung von Elektronen in Betrieb genommen, anfänglich primär für die Teilchenphysikforschung genutzt. Die dabei auftretende Synchrotronstrahlung, zunächst als Nebenprodukt betrachtet, stimulierte bald die Konzeption neuartiger Experimente in der Strukturforchung.

strahlungslabor“ (HASYLAB) am DESY eröffnet wurde [6], also vor nunmehr 40 Jahren, konnte er bereits gemeinsam mit Ulrich Bonse über Konzeption, Bau und Betrieb eines hochauflösenden Zwei-Achsen-Diffraktometers mit Polarisationsmessung der „reflektierten“ Synchrotron-Strahlung berichten [7, 8]. Dem folgte 1996 (gemeinsam mit Hans-Georg Krane und Wolfgang Morgenroth) ein Laue-Instrument mit energiedispersiven Detektoren [9]. Damit waren z. B. energieabhängige Polarisationsmessungen möglich. Schon 1989, also sieben Jahre vor der Veröffentlichung über das neue Gerät, berichtete Karl Fischer unter anderem vom Abschluss der Planungsarbeiten für das Laue-Diffraktometer [10]. Daran wird deutlich, welcher Aufwand getrieben werden muss, um maßgeschneiderte Experimente am HASYLAB zu realisieren. Das kam neben den eigenen Projekten dann auch zahlreichen anderen Nutzern zugute.

Unter den Ergebnissen soll hier die präzise Messung von Real- und Imaginärteil des Atomformfaktors hervorgehoben werden, mit der Besonderheit über die Richtungsabhängigkeit dessen Tensor-Charakter zu bestimmen (am Beispiel Nb in LiNbO_3 [11], Kupfer in Cu_2O [12] oder Eisen in Homblende-Vertretern [13]) oder auf dem gleichen Wege den Tensor-Charakter des komplexen Brechungsindex zu ermitteln (am Beispiel LiNbO_3 [14]). Dabei ist auch der Nachweis von Dichroismus und Doppelbrechung für Energien in der Nähe der *K*-Kante des Niob gelungen [14] und den etablierten Formalismus aus der Optik des sichtbaren Lichts auf Röntgenstrahlung zu übertragen, unter teils führender Mitarbeit von A. Kirfel (1988–93). Das hat die eigenen Fragestellungen vorangebracht und der einschlägigen Fachwelt wichtige Daten für diffraktometrische Studien²⁸ geliefert.

Das Spiel mit der Wellenlänge (oder „Lambda-Technik“), zu dem die Synchrotronstrahlungsquelle geradezu einlud, hat ihn auch beflügelt, neue Wege der Strukturanalyse²⁹ zu beschreiten oder alte Ansätze³⁰ mit Unterstützung von Doktorarbeiten weiterzuentwickeln [15, 16³¹, 17, 18]. Gemeinsam mit Armin Kirfel³² und Helmuth Zimmermann³³ hat er in einer Serie von Arbeiten [19–25] nach seiner Emeritierung³⁴ Grundlagen für eine alternative Strukturbestimmungsmethode ohne Fourier-Inversion gelegt und deren Anwendbarkeit schrittweise erweitert. Die weitere Überführung des theoretischen „Parameter-Raum-Konzepts“ [23]³⁵ in anwenderfreundliche Prozeduren ist nun Gegenstand eines neuen DFG-

²⁸ Für quantitative Bestimmungen der anomalen Absorption stehen zwar berechnete Werte von Cromer und Libermann [58] zur Verfügung, experimentelle Werte weichen aber oft davon ab. So ist die Messung des Imaginärteils des Atomformfaktors f'' von Barium durch Schäfer und Fischer [51, 52] ein solcher Beitrag.

²⁹ Wie man aus Intensitätsunterschieden zweier geeignet gewählter Wellenlängen Teile der Elektronendichteverteilung gewinnen kann, hat K. Fischer 1981 gezeigt [29].

³⁰ Speziell die algebraische Methode von Ott [28].

³¹ Katrin Pilz gelang das deduktive Lösen des Vorzeichenproblems für eine zentrosymmetrische Struktur und der Eindeutigkeits-Nachweis bei hoch-pseudosymmetrischer Atomanordnung am Beispiel von Cu_3SbSe_8 .

³² Armin Kirfel (*1943) war von 1986 bis 1991 Angestellter der Universität des Saarlandes am HASYLAB, 1991–1996 Prof. für Kristallographie in Würzburg, 1996–2008 Prof. für Kristallographie und Mineralogie in Bonn.

³³ Helmuth W. Zimmermann (*1945), Lehrstuhl für Kristallographie u. Strukturphysik, Inst. f. Angewandte Physik der Universität Erlangen.

³⁴ In der damaligen Fakultät für Physik und Elektrotechnik.

³⁵ Als Alternative zu etablierten Direkten Methoden und Verfahren der Fourier-Transformation zielt das „Parameter Space Concept“ (PSC) auf die Lösung von „Problemstrukturen“ unter Einsatz moderner IT-Technik und mit hoher Ortsauflösung. Die Kristallstruktur wird geometrisch als Vektor im m -dimensionalen Raum der Ortsparameter beschrieben. Die geometrischen Strukturamplituden bilden darin Isoflächen. Aus deren Schnittpunkten werden die Lösungen abgeleitet. Das Phasenproblem wird umgangen. Der zunächst als Nachteil erscheinende hohe Rechenaufwand sollte angesichts aktueller Entwicklung verfügbarer Rechenleistung künftig weniger limitierend wirken.

Projekts³⁶. Es gibt also genügend zu tun für die nächste Generation, und das zum Glück mit seiner erfahrenen Rückendeckung.

Aus der methodischen Expertise auf dem Gebiet der Strukturbestimmung erwuchs auch die Beteiligung an einem breiten Spektrum von Substanzen. Dominierten bis 1953 Metaphosphate³⁷, bis etwa 1970 Silikate bzw. Zeolithe³⁸, dann wandte er sich später Substanzen zu, die aus Fragestellungen von DFG-geförderten Großprojekten wie dem Sonderforschungsbereich „Ferroelektrika“^{39, 40} oder dem Schwerpunktprogramm „Pseudosymmetrische Kristalle“⁴¹ erwachsen, an deren Konzeption, Organisation und Durchführung er auch maßgeblich beteiligt war. Die Breite seiner Interessen hat ihn auch komplexere Strukturen in Angriff nehmen lassen⁴².

Prof. Fischer hat seine Erfahrungen auf diesem Arbeitsgebiet auch in den Dienst des wissenschaftlichen Gedankenaustauschs gestellt als Initiator und Co-Chairman einer Internationalen Konferenz über anomale Streuung⁴³, als Mitwirkender bei der Tagungsvorbereitung der *International Union of Crystallography* (IUCr) in Deutschland⁴⁴ und als Mitherausgeber einer Monographie über resonante anomale Röntgenstreuung [26]. Methodisch orientierte Übersichten dieser Art sind bewährte Mittel zur Verbreitung neuer Forschungsansätze.

Die Würdigung seiner Verdienste um die Kristallographie als Wissenschaftsdisziplin wäre unvollkommen, ohne seinen selbstlosen und engagierten Einsatz für das Wissenschaftsgebiet als Ganzes hervorzuheben. Dazu gehört einmal sein Einsatz als Gutachter in Gremien der Forschungsförderung für die DFG⁴⁵, für das ILL⁴⁶ und für das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)⁴⁷. Karl Fischer hat durch sachkundige und integre Behandlung von Anträgen zahlreichen Fachkollegen zu wirksamer Unterstützung verholfen und sich u. a. als Fürsprecher der „Kleinen Fächer“ profiliert, ohne seine Person in den Mittelpunkt zu stellen. Für den damit verbundenen hohen Zeitaufwand gebührt ihm der besondere Dank aller Fachkollegen.

³⁶ Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) Projektnummer 442646446, Beginn 2020, Dauer 3 Jahre. Titel „Parameter Space Concept als Strukturlösungsmethodik für die Einkristalldiffraktometrie“, Antragsteller: D. C. Meyer, M. Zschornak, Mitverantwortlicher: K. F. Fischer.

³⁷ In der Chemisch-technischen Abteilung des Chemischen Laboratoriums der Universität [32, 33, 44].

³⁸ Faujasit, Chabasit, Herschelit, Gmelinit, Gismondin, Benitoit, Cummingtonit, Laumontit, Hornblende, Mikroklin, Zunyt [5, 13, 34–41, 56].

³⁹ Gefördert 1974–1988.

⁴⁰ Darunter BaTiO₃ [30, 50], LiNbO₃ [11, 14], PbZrO₃, PbTiO₃ [42, 59, 60], Ba(NO₂)₂·2H₂O [53], Betain-Arsenate, (CH₃)₃NCH₂COO·D₃AsO₄ [31], KTiOPO₄, NaTiOPO₄ [55], Cu₂O [12], (AgNSO₂·H₂O)₃ [43, 54].

⁴¹ Gefördert 1991–1996.

⁴² Norcaradien [45, 46, 54], Hexa(2-ethylimidazole)iron(II) Hydridotetracarbonylferrate(-II) [47].

⁴³ „International Conference on Anomalous Scattering“ (ICAS), Malente und Hamburg, 17.–21.08.1992.

⁴⁴ „Thirteenth General Assembly of the IUCr and Thirteenth International Congress of Crystallography“, Congress Centrum Hamburg, Hamburg, 9.–18. August 1984.

⁴⁵ 1980–95, davon 1984–88 stellvert. Fachgruppen-Sprecher und Endgutachter für Kristallographie und Nachbarfächer. Außerdem Mitglied der Senatskommission Geowissenschaften 1987–93.

⁴⁶ 1982–86; die Neutronenquelle des ILL Grenoble, dort ist College 5a nichtmagnetischen Kristallstrukturanalysen gewidmet.

⁴⁷ 1994–2000 Vorsitz der Kommission „Instrumente und Methoden für Beugung mit Synchrotronstrahlung für Kristallstruktur- und Materialforschung“.

Einen zweiten Aspekt bildet sein Engagement in wissenschaftlichen Gesellschaften, das zugleich seine fachübergreifenden Interessen und Vernetzungen spiegelt⁴⁸. Als Zeichen des Vertrauens ist ihm aus dem Kreise der deutschen Kristallographen die Aufgabe des Mitglieds bzw. Sprechers des „Deutschen Nationalkomitees für Kristallographie“ in der IUCr angetragen worden⁴⁹. Auf dieser Ebene hat er sich auch aktiv am Prozess der Wiedervereinigung von Kristallographen in der BRD und der DDR beteiligt, die bis 1991 in zwei getrennten nationalen Gesellschaften⁵⁰ organisiert und als selbstständige Körperschaften in der IUCr vertreten waren. Die Mehrzahl der Mitglieder in West und Ost trat 1991 der DGK bei und wählten ein gemeinsames Nationalkomitee, dem auch Karl Fischer angehörte.

Der Laureat ist eher ein Befürworter der leisen Töne bei der Konfliktlösung. Dadurch hat er oft weitgehend unbemerkt von der Öffentlichkeit in selbstloser Weise für das Fachgebiet und die Gesellschaft wirksam werden können. Die Mitglieder der DGK haben ihn nicht zuletzt auch deshalb 1997 zu ihrem Ehrenmitglied gewählt. In seiner verstorbenen Frau Sophie fand er eine wirkungsvolle Stütze und regelmäßige Begleiterin zu Tagungen.

Schon vor der staatlichen Wiedervereinigung am 03.10.1990 ist der Unterzeichnete dem Laureaten persönlich begegnet⁵¹ und hat dessen Verständnis für die schwierige Ausgangslage im Osten und seine Hilfsbereitschaft zur Verbesserung der Startbedingungen für Lehre und Forschung noch in dankbarer Erinnerung.

Wenn dann eine Absolventin aus Leipzig (Katrin Pilz [16]) in der Arbeitsgruppe Fischer an den Anfängen der alternativen Strukturbestimmung mitgearbeitet hat und seit verganginem Jahr zwei ehemalige Absolventen aus Dresden (Dirk C. Meyer und Matthias Zschornak, jetzt Freiberg) die von Karl Fischer begonnenen Arbeiten zu diesem Thema fortsetzen, dann hat sein Einsatz für das Zusammenwachsen der Kristallographen in der nächsten Generation Früchte getragen, worüber wir alle froh sein können.

Fazit: Mit der Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2021 an Prof. Karl F. Fischer werden drei Aspekte seines Schaffens besonders gewürdigt:

- Erkenntnisgewinn durch kreative Nutzung anomaler Dispersion von Röntgenstrahlen mit sehr früher wissenschaftlicher und personeller Mitwirkung an der Nutzung von Synchrotronstrahlung im HASYLAB Hamburg,
- selbstloser Einsatz in Gremien der Forschungsförderung zum Wohle des Gesamtgebietes,
- engagierte internationale Interessenvertretung und Mitgestaltung des Zusammenwachsens von Kristallographen aus West und Ost.

⁴⁸ Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) seit ca. 1952; Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG) 1955–1992 (?), Sektion Kristallkunde der DMG seit Gründung (1955–1970 ?); Arbeitsgemeinschaft Kristallographie der DMG, DPG, GDCh (AGKr) seit 1970 (?) bis 1991; Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) seit 1991, Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) seit 1978.

⁴⁹ 1977–82 als Mitglied, 1989–94 als Sprecher des Nationalkomitees. Die DGK ist korporatives Mitglied der IUCr.

⁵⁰ Kristallographen der alten Bundesländer waren in der AGKr organisiert, während DDR-Kristallographen in der „Vereinigung für Kristallographie in der Geologischen Gesellschaft“ (VFK) eine Vertretung fanden. 1991 lösten sich AGKr und VFK absichtsvoll auf. Ihre Mitglieder und andere Interessenten konnten der im gleichen Jahr gegründeten DGK beitreten.

⁵¹ Am 21.04.1988 war Karl Fischer Gast im Kristallographischen Kolloquium der Universität Leipzig und trug Ergebnisse zum Thema „Umgehung des Phasenproblems der Kristallstruktur-Analyse mit Synchrotron-Strahlung: direkte Abbildung der Elektronendichte mittels Intensitäts-Differenzen (Lambda-Methode)“ vor. Auf dem Weg zwischen Saarbrücken und Leipzig musste damals der Eiserne Vorhang überschritten werden.

Gern schließt sich der Unterzeichnete mit herzlichem Glückwunsch zur Anerkennung des wissenschaftlichen Lebenswerkes von Professor Karl Fischer⁵² an und fügt die besten Wünsche für dessen weiteres Wirken in pandemischer Zeit hinzu.

Peter Paufler, Dresden und Dirk Meyer, Freiberg

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] K. Fischer: Chemische und röntgenographische Untersuchung von Metaphosphaten: Teil A: Das Bleimetaphosphat, Teil B: Das Ammoniumtetrametaphosphat, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen, Diplomarbeit (1952)
- [2] K. Fischer: Untersuchungen über die Kristallstruktur des Silbersulfimids mit einigen Beiträgen zur Methodik der Röntgenstrukturanalyse, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen, Diss. Dr. phil. (1954)
- [3] K. Fischer: Ein einfaches Gerät zur Berechnung von Strukturamplituden, Neues Jahrbuch für Mineralogie, Monatshefte (1954) 65–69
- [4] K. Fischer, F. Michel, H. Güttelbauer: Ein einfaches mechanisches Zeitschaltgerät hoher Genauigkeit, Zeitschrift für Instrumentenkunde 67 (1959) 41–42
- [5] K. F. Fischer: Verfeinerung von Atomstreu曲ven sowie Bestimmung beziehungsweise Verfeinerung einiger Silikatstrukturen: Gmelinit, Gismondin, Benitoit, Cummingtonit, Habilitationsschrift, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt/M. (1962)
- [6] O. Beimgraben, W. Graeff, U. Hahn, J. Knabe, E. E. Koch, C. Kunz, G. Materlik, V. Saile, W. Schmidt, B. F. Sonntag, G. Sprussel, E. W. Weiner, R. Zietz: Das neue Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, Physikalische Blätter 37 (1981) 2–10
- [7] U. Bonse, K. Fischer: The new multi-purpose two-axis diffractometer for synchrotron X-rays at DORIS, Nuclear Instruments and Methods 190 (1981) 593–603
- [8] U. Bonse, K. Fischer: Unconventional multi-purpose diffractometer for synchrotron X-rays at DORIS, Nuclear Instruments and Methods 195 (1982) 363–366
- [9] K. F. Fischer, H.-G. Krane, W. H. W. Morgenroth: A single-crystal X-ray diffractometer for white synchrotron radiation with solid state detectors: Energy dispersive Laue (EDL) instrument at HASYLAB, Hamburg/Germany, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 369 (1996) 306–311
- [10] K. Fischer: Persönliche Mitteilung, Saarbrücken, 25.12.1989
- [11] A. Petcov, A. Kirfel, K. Fischer: Tensorial Representation of f' for Nb in Lithiumniobate, LiNbO₃, Zeitschrift für Naturforschung 43a (1988) 388–390
- [12] K. Eichhorn, A. H. Kirfel, K. F. Fischer: Anisotropic Anomalous Dispersion in Cuprite, Cu₂O, Zeitschrift für Naturforschung 43a (1988) 391–392

⁵² Herrn Professor Fischer danke ich für die Bereitstellung von Daten seiner Vita.

- [13] T. Lippmann, K. Fischer, A. Kirfel: Polarized X-ray absorption. Evidence of orientational dispersion in hornblende minerals, *Journal of Applied Crystallography* 31 (1998) 94–97
- [14] A. Petcov, A. Kirfel, K. Fischer: X-ray birefringence and dichroism in lithium niobate, LiNbO_3 , *Zeitschrift für Naturforschung* 46 (1990) 754–763
- [15] W. Knof: Analytische Methode zur Strukturbestimmung bei energiedispersiven Laue-messungen, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Dissertation (1989)
- [16] K. Pilz: Weiterentwicklung und Anwendung einer algebraischen Methode zur Teilstrukturbestimmung, ein Beitrag zur Eindeutigkeit von Strukturanalysen, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Dissertation (1996) 136
- [17] K. F. Fischer, K. Pilz: A Method for Obtaining a Possibly Unique (Unambiguous) Crystal Structure Solution using Multiple Resonant Scattering Data, *Acta Crystallographica A* 53 (1997) 475–483
- [18] K. Pilz, K. F. Fischer: Solving Crystal Structures without Fourier Mapping. I. Centrosymmetric Case, *Acta Crystallographica A* 54 (1998) 273–282
- [19] K. F. Fischer, A. Kirfel, H. Zimmermann: Structure determination without Fourier inversion. Part I. Unique results for centrosymmetric examples, *Zeitschrift für Kristallographie* 220 (2005) 643–656
- [20] A. Kirfel, K. F. Fischer, H. Zimmermann: Structure determination without Fourier inversion. Part II: The use of intensity ratios and inequalities, *Zeitschrift für Kristallographie* 221 (2006) 673–680
- [21] K. F. Fischer, A. Kirfel, H. Zimmermann: A concept for crystal structure determination without Fourier inversion: Some steps towards application, *Croatica Chemica Acta* 81 (2008) 381–389
- [22] A. Kirfel, K. F. Fischer: Structure determination without Fourier inversion. Part IV: Using quasi-normalized data, *Zeitschrift für Kristallographie* 224 (2009) 325–339
- [23] H. Zimmermann, K. F. Fischer: Structure determination without Fourier inversion. V. A concept based on parameter space, *Acta Crystallographica A* 65 (2009) 443–455
- [24] A. Kirfel, K. F. Fischer: Structure determination without Fourier inversion. Part VI: High resolution direct space structure information from one-dimensional data obtained with two wavelengths, *Zeitschrift für Kristallographie* 225 (2010) 261–273
- [25] A. Kirfel, K. Fischer: Solving surface and embedded structures without Fourier inversion: A 2-dimensional direct space approach, *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials* 230 (2015) 439–448
- [26] G. Materlik, C. J. Sparks, K. Fischer (Eds.): *Resonant anomalous X-ray scattering: theory and applications*, North-Holland, Amsterdam, New York (1994)
- [27] International Conference on Anomalous Scattering (ICAS), Malente und Hamburg, 17.–21.08.1992
- [28] H. Ott: Zur Methodik der Strukturanalyse, *Zeitschrift für Kristallographie* 66 (1928) 136–153

- [29] K. Fischer: Mapping parts of the electron density distribution from X-ray Bragg scattering intensities (Lambda technique), *Zeitschrift für Naturforschung A* 36 (1981) 1253–1254
- [30] W. Schildkamp, K. Fischer: Rhomboedrisches BaTiO₃: Strukturuntersuchung bei 132 °K und 196 °K, *Zeitschrift für Kristallographie* 155 (1981) 217–226
- [31] S. Kek, M. Grotepaß-Deuter, K. Fischer, K. Eichhorn: Betaine arsenate, (CH₃)₃NCH₂COO·D₃AsO₄: Structure refinement using multiple-wavelength synchrotron radiation data, *Zeitschrift für Kristallographie* 212 (1997) 671–678
- [32] K. R. Andress, W. Gehring, K. Fischer: Beiträge zur Kenntnis der polymeren Metaphosphate. I. Das Natriumtetrametaphosphat Na₄[(PO₃)₄]·4H₂O, *Zeitschrift für anorganische Chemie* 260 (1949) 331–336
- [33] K. R. Andress, K. Fischer: Beiträge zur Kenntnis der polymeren Metaphosphate. III. Röntgenographische Untersuchung von Kurrolischem Kaliummetaphosphat sowie Darstellung und Untersuchung eines Bleimetaphosphates [Pb(PO₃)₂]_∞, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 273 (1953) 193–199
- [34] K. Fischer, H. O'Daniel: Bemerkungen zur Struktur der Würfelzeolithe, *Naturwissenschaften* 43 (1956) 348–349
- [35] K. Fischer: The Crystal Structure Determination of the Zeolite Gismondite, *American Mineralogist* 48 (1963) 654–672
- [36] K. Fischer: A further refinement of the crystal structure of Cummingtonite (Mg,Fe)₇(Si₄O₁₁)₂(OH)₂, *American Mineralogist* 51 (1966) 814–818
- [37] H. Bartl, K. Fischer: Untersuchung der Kristallstruktur des Zeolithes Laumontit, *Neues Jahrbuch für Mineralogie, Monatshefte* (1967) 33–42
- [38] K. Fischer, Hiltrud Zehme: Röntgenographische Untersuchung der Si-Al-Verteilung in einem Mikroklin durch Verfeinerung des atomaren Streuvermögens, *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen* 47 (1967) 163–167
- [39] V. Schramm, K. Fischer: Refinement of the Crystal Structure of Laumontite, *Advances in Chemistry, Series No. 101, Molecular Sieve Zeolites – I* (1971) 259–265
- [40] V. Schramm, K. Fischer: Röntgenbeugungsuntersuchung der anisotropen Temperaturschwingungen und der Punktlagen-Mischbesetzungsdichten in ZUNYIT, *Fortschritte der Mineralogie* 49 (1971) 45–47
- [41] K. Fischer: Zeolite Structure Refinement (plenary lecture, Int. Conf. on Molecular Sieve Zeolites, Zürich 1973, *Advances in Chemistry, Series No. 121, Molecular Sieves* (1973) 31–38
- [42] H. Bock, K. Fischer: Untersuchungen im Phasendiagramm PbZrO₃–PbTiO₃ durch Pulverdiffraktometrie mit höherer Auflösung, *Zeitschrift für Kristallographie* 162 (1983) 23–25
- [43] K. Fischer, K. R. Andress: Untersuchung über die Kristallstruktur des Silbertrisulfimid-Hydrates (AgNSO₂·H₂O)₃, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 281 (1955) 169–182

- [44] K. R. Andress, K. Fischer: Bemerkungen zur Struktur des Ammoniumtetrametaphosphates, *Acta Crystallographica* 3 (1950) 399–400
- [45] G. Maas, K. Fischer, M. Regitz: The Structure of PO-substituted Norcaradiens. I. The Crystal and Molecular Structure of 7-Dimethoxyphosphoryl-7-phenylnorcaradiene, *Acta Crystallographica B* 30 (1974) 1140–1145
- [46] G. Maas, K. Fischer, M. Regitz: The Structure of PO-substituted Norcaradiens. II. The Crystal and Molecular Structures of Dimethyl 2,5-Dichloro-7-phenylnorcaradiene-7-phosphonate and Dimethyl 2,5-Dibromo-7-phenylnorcaradiene-7-phosphonate, *Acta Crystallographica B* 30 (1974) 2853–2860
- [47] E. Bill, N. Blaes, K. F. Fischer, U. Gonser, K. H. Pauly, R. Preston, F. Seel, R. Staab, A. X. Trautwein: Crystal Structure and Mössbauer Spectroscopic Investigation of the Low Temperature Molecular Dynamics of Hexa (2-ethylimidazole) iron(II) Hydrido-tetracarbonyl ferrate(-II), *Zeitschrift für Naturforschung B* 39 (1984) 333–340
- [48] K. Fischer: Rechenprogramme für die Kristallstrukturanalyse, *Neues Jahrbuch für Mineralogie, Monatshefte* (1959) 165–167
- [49] K. Andress, K. Fischer: Notiz über die Möglichkeit, den Polymerisationsgrad kristallisierter Stoffe auf röntgenographischem Wege zu ermitteln, *Naturwissenschaften* 42 (1955) 13
- [50] K. H. Ehses, H. Bock, K. Fischer: The Temperature Dependence of the Debye-Waller-Factor in Barium Titanate, *Ferroelectrics* 37 (1981) 507–510
- [51] G. F. Schäfer, K. F. Fischer: Bestimmung der Wellenlängen- und Streuwinkelabhängigkeit des Imaginärteils des Atomformfaktors von Barium. I. Absorptionsmessungen, *Zeitschrift für Kristallographie* 159 (1982) 303–309
- [52] G. F. Schäfer, K. F. Fischer: Bestimmung der Wellenlängen- und Streuwinkelabhängigkeit des Imaginärteils des Atomformfaktors von Barium. II. Beugungsexperimente, *Zeitschrift für Kristallographie* 162 (1983) 273–283
- [53] G. Schäfer, K. F. Fischer: Die Struktur von Bariumnitrit-Monohydrat $\text{Ba}(\text{NO}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, *Zeitschrift für Kristallographie* 155 (1981) 75–79
- [54] H. Dürr, K.-H. Pauly, K. Fischer: Ein Beitrag zum Bisnorcaradien-Problem. Synthese, Eigenschaften und Strukturparameter von Bicyclo[5.4.0]undecapentaen, dem Valenzisomer des Bisnorcaradiens, *Chemische Berichte* 116 (1983) 2855–2871
- [55] S. Dahaoui, N. K. Hansen, J. Protas, H.-G. Krane, K. Fischer, G. Marnier: Electric properties of KTiOPO_4 and NaTiOPO_4 from temperature-dependent X-ray diffraction, *Journal of Applied Crystallography* 32 (1999) 1–10
- [56] K. F. Fischer, W. M. Meier: Kristallchemie der Zeolithe, *Fortschritte der Mineralogie* 42 (1965) 50–86
- [57] K. F. Fischer: Note on the false symmetry effect (Templeton effect), *Zeitschrift für Kristallographie* 115 (1961) 310–313
- [58] D. T. Cromer, D. Liberman: Relativistic calculations of anomalous scattering factors for X-rays, *Journal of Chemical Physics* 53 (1970) 1891–1898

- [59] K. Yamasaki, Y. Soejima, K. F. Fischer: Superstructure Determination of PbZrO_3 , *Acta Crystallographica B* 54 (1998) 524–530
- [60] Y. Soejima, K. Yamasaki, K. F. Fischer: Use of X-ray Anomalous Dispersion: The Superstructure of PbZrO_3 , *Acta Crystallographica B* 53 (1997) 415–419

WALTRUDE-UND-FRIEDRICH-LIEBAU-
PREIS ZUR FÖRDERUNG DER
INTERDISZIPLINARITÄT DER
KRISTALLOGRAPHIE 2021
AN GILBERTO ARTIOLI

FÜR SEIN BEDEUTENDES WERK, DAS AUF HERAUSRAGENDE WEISE
METHODEN UND ERKENNTNISSE DER EXAKTEN NATURWISSENSCHAFTEN,
INSBESONDERE DER KRISTALLOGRAPHIE, MIT WICHTIGEN
FRAGESTELLUNGEN SOWOHL DER KULTURWISSENSCHAFTEN, ETWA DER
ERFORSCHUNG DES MATERIELLEN KULTURERBES DER MENSCHHEIT WIE
DER ARCHÄOMETRIE, ALS AUCH ANGEWANDTER
MATERIALWISSENSCHAFTEN WIE DER ZEMENTFORSCHUNG VERBINDET,
WOBEI ES IHM IN BEEINDRUCKENDER WEISE GELINGT, SEINE ERGEBNISSE
UND DEREN BEDEUTUNG EINEM BREITEN PUBLIKUM VERSTÄNDLICH ZU
VERMITTELN UND DADURCH DIE BEDEUTUNG DER KRISTALLOGRAPHIE WEIT
ÜBER IHRE FACHGRENZEN HINAUS SICHTBAR ZU MACHEN



Hier findet sich eine kurze schriftliche Zusammenfassung der Laudatio, wie sie unter günstigeren Bedingungen vor den Teilnehmern der 29. Jahrestagung der DGK (15.–18. März 2021, DESY, Hamburg) und in Gegenwart des Preisträgers Prof. Gilberto Artioli von der Universität Padua, Italien mündlich vorgetragen werden können, nachdem ihm vom Vorsitzenden die Urkunde übergeben worden wäre. Stattdessen erhielt Prof. Artioli diese vor Ort aus den Händen seines auch in Deutschland gut bekannten Kollegen Prof. Fabrizio Nestola. Ein kurzes Video von der Übergabe findet sich unter folgender Adresse:

https://mediaspace.unipd.it/media/To+prof.+Gilberto+Artioli+the+%22Liebau+Prize+for+the+Promotion+of+Interdisciplinarity+in+Crystallography%22/1_juct6uag/65767081

Gilberto Artioli, geboren 1957, studierte an der Universität Modena (Italien) Geowissenschaften und schloss das Studium 1980 mit dem Titel Laurea ab, was dem deutschen Diplom entspricht. Daran anschließend verließ er Italien in Richtung USA, wo er von 1981 bis 1985 Forschungsassistent bei Prof. J. V. Smith an der Universität Chicago war und 1985 mit Arbeiten unter anderem über Zeolithe promovierte. Während dieser Zeit war er auch als Gastwissenschaftler am *Brookhaven National Laboratory* tätig, wo er an der *National Synchrotron Light Source* intensiv Synchrotronstrahlung für seine Strukturuntersuchungen nutzte. Dies wurden später durch Neutronenbeugung am *High Flux Beam Reactor* ergänzt. Er hielt aber in der ganzen Zeit seine Verbindung mit Italien aufrecht (1983–1992 Res. Ass., U. Modena). 1992 fanden seine erfolgreichen Forschungen ihre verdiente Anerkennung durch Berufung auf die Stelle eines *Assistant Professors (Geoscience)* an der Universität Mailand; 1999 wurde er dort zum *Full Professor* berufen. Seit 2006 ist er *Full Professor* am *Dipartimento di Geoscienze, Università di Padova*, der alten Stadt in Venetien, die auf Deutsch Padua genannt wird.

Professor Artioli hat zahlreiche nationale und internationale Auszeichnungen erhalten, wurde zu mehr als 125 Vorträgen und Seminaren eingeladen und hat deutlich mehr als 370 Publikationen aufzuweisen. Er ist ein gesuchter Experte für die Mitarbeit in verschiedenen nationalen und internationalen Gremien und Ausschüssen oder als Organisator von Konferenzen, Sommerschulen, Workshops und Meetings. In dem Zusammenhang freuen wir uns auf das für 2024 geplante ECM-34 in Padova, dessen Organisation Prof. Artioli übernommen hat. Für diese Aufgabe ist er durch seine vielfältigen Aktivitäten und internationalen Verbindungen im eigentlichen Kernbereich der Kristallographie hervorragend geeignet, wie seine Ko-Autorenschaft z. B. in dem von C. Giacovazzo herausgegebenen Standardwerk „*Fundamentals of Crystallography*, 3rd Edition“ oder in den *International Tables for Crystallography*, Vol. H „*Powder Diffraction*“ belegt. Umfangreiche Informationen über den Preisträger, einschließlich seiner beeindruckenden Publikationsliste und geschmückt mit attraktiven Fotografien von seinem Hobby, der Vogelbeobachtung, sind unter geo.geoscienze.unipd.it/personal/artioli-gilberto im Internet zu finden. Seit 2014 leitet er mit großem Erfolg die „*Commission on Crystallography in Art and Cultural Heritage*“ der *International Union of Crystallography*.

Dieses alles bezeugt, dass Prof. Artioli in bester Weise mit der kristallographischen Gemeinschaft und ihren Aktivitäten verbunden ist, würde aber für sich allein noch nicht rechtfertigen, ihm den „*Interdisziplinaritäts-Preis*“ mit seinen besonderen Anforderungen zu verleihen. Die Preisordnung fordert nämlich, dass „...der [Preis] dazu beitragen soll, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen“. Dieses Kriterium ist bei Herrn Artioli besonders ausgeprägt erfüllt, wie an einigen wenigen Beispielen verdeutlicht werden soll.

Seit den frühen Anfängen seiner Karriere gilt Prof. Artiolis Interesse zementartigen Phasen, ihren Eigenschaften, Strukturen, Verhalten und Nutzung. Zur Zeit leitet er an der Universität Padua CIRCe, ein mehrere Arbeitsgruppen umfassendes „*Forschungszentrum für die Untersuchung von Zementmaterialien und hydraulischen Bindemitteln*“. In diesem Rahmen werden nicht nur rein materialwissenschaftliche Untersuchungen durchgeführt, sondern die Erkenntnisse werden auch genutzt, um durch fundierte Altersdatierung von Mörtel mit Hilfe der ¹⁴C-Radiokarbonmethode, angewandt auf die beim Abbinden entstehenden carbonat-

haltigen Phasen, Aussagen über die Entstehungsgeschichte archäologisch interessierender Bauten machen zu können. Für Interessierte sei in diesem Zusammenhang auf ein Buchkapitel von G. Artioli als Erstautor zum Buch „Cementitious Materials – Composition, Properties, Application“ (H. Pöllmann, Ed., de Gruyter, 2017) verwiesen. Bereits an diesem Beispiel erkennt man, dass die Interessen des Preisträgers neben dem eigentlichen Bereich der Kristallographie in benachbarte Disziplinen wie z. B. Materialwissenschaften, Mineralogie, Architektur und auf dem Weg über die Altersdatierung auch in Archäologie und Kulturwissenschaften hinein wirken und damit eine weit gestreute Öffentlichkeit erreichen. In diesem Zusammenhang soll unbedingt sein 2010 bei *Oxford University Press* erschienenes, 536 Seiten umfassendes, zum Standardwerk gewordenes Buch mit dem Titel „Scientific Methods and Cultural Heritage – An introduction to the application of materials science to archaeometry and conservation science“ erwähnt werden.

Herr Artioli ist ein sehr guter und polyglotter Redner, der die Öffentlichkeit keineswegs scheut, sondern sich ihr öffnet. Über Kreise der hauptsächlich an Kristallographie, Mineralogie oder Materialwissenschaft Interessierten hinaus sind es vor allem seine Beiträge zur Forschung an der Gletschermumie vom Tisenjoch, vulgo Ötzi, die ihn einer breiteren Öffentlichkeit bekannt gemacht haben. Dabei ging es vor allem um die Aufklärung der Herkunft des für Ötzi's Axt benutzten Kupfers. Ein Großteil der einschlägigen Untersuchungen wurden durch das von ihm koordinierte *AacP – Alpine Archaeocopper Project* durchgeführt. Ein überraschendes Ergebnis war es, dass das benötigte Kupfererz nicht wie zunächst naheliegend vermutet aus dem Alpenraum stammte, sondern von viel weiter südlich – in der Toskana – gelegenen Vorkommen. Das wiederum zeigt, dass es bereits vor über 5000 Jahren weitreichende Verkehrswege und Handelsbeziehungen gegeben haben muss.

Zum Abschluss sei ein Beispiel zitiert, in dem sich das ganzheitliche, interdisziplinäre Denken des Preisträgers deutlich zeigt und das nebenbei eine unerwartete Beziehung zu Deutschland aufweist. Es handelt sich um die in *Archeometry* 51 (2009) 197–213 erschienene Arbeit von G. Artioli, C. Nicola, G. Montana, I. Angelini, L. Nodari und U. Russo mit dem Titel: „The Blue Enamels in the Baroque Decorations of the Churches of Palermo, Sicily: Fe²⁺-Coloured Glasses from Lime Kilns“. Kurz gesagt, geht es dabei um blaugefärbte Emailverzierungen, deren Farbe überraschenderweise auf das Vorhandensein von Fe²⁺ in verzerrt oktaedrischer Koordination zurückzuführen ist. Die Herkunft der notwendigen Ausgangsstoffe und die komplexen Bildungsbedingungen wurden mit geradezu forensischer Akribie untersucht. Ausgangspunkt der Untersuchungen waren historische Berichte, hier insbesondere eine Passage aus Goethes „Italienischer Reise“, die in der zitierten Arbeit auf Deutsch – aber mit Übersetzung ins Englische – zitiert wird. Goethe hat sich sehr für das Material und seine Entstehungsgeschichte interessiert und ein Belegstück davon mit sich nach Weimar gebracht, wo es noch heute Teil der Sammlung ist.

Die wenigen angeführten Beispiele mögen genügen um zu zeigen, dass Prof. Gilberto Artioli ein würdiger Träger des Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie ist und zu dessen Verleihung ihm an dieser Stelle herzlich gratuliert sei.

Wulf Depmeier, Kiel

HEINRICH ARNOLD

21.10.1930 – 09.10.2020



Die Gemeinschaft der Kristallographen betrauert den Tod von Prof. Dr. rer. nat. Heinrich Arnold. Er starb am 9. Oktober 2020, nur wenige Tage vor seinem 90. Geburtstag.

Prof. Arnold wurde am 21.10.1930 in Budapest/Ungarn geboren. Er studierte an der Universität Marburg, wo er sein Studium 1958 als Diplom-Physiker mit einer Diplomarbeit über „Die Kristallisation von Terylen im Kleinwinkeldiagramm“ bei Prof. Dr. Carl Hermann abschloss. Danach arbeitete er am Max-Planck-Institut für Silikatforschung bei Prof. Dr. Heinz Jagodzinski. Er promovierte 1964 an der Universität Würzburg mit einer Arbeit über „Struktur und Fehlordnung bei der α - β -Umwandlung von Quarz“. Ab 1964 arbeitete er am neu gegründeten Institut für Kristallographie an der RWTH Aachen bei Prof. Dr. Theo Hahn, zunächst als wissenschaftlicher Assistent und später als Oberingenieur. Nach einer Zeit als *Postdoctoral Fellow* 1967/68 am *Georgia Institute of Technology* in Atlanta, USA hat er sich 1976 an der RWTH Aachen mit einer Arbeit über „Displazive Phasenumwandlung, Gitterdynamik und Röntgenbeugung“ habilitiert und wurde 1979 zum Dozent für das Lehrgebiet Kristallographie ernannt. Ab 1982 bis zu seiner Pensionierung 1995 war er als Apl. Professor am Institut für Kristallographie der RWTH tätig.

Prof. Arnold war ein überzeugter Wissenschaftler und Hochschullehrer. Er hat maßgeblich an dem Aufbau des 1963 neu gegründeten Instituts für Kristallographie an der RWTH mitgewirkt, insbesondere bei der Einrichtung der Röntgenlabors und der damit verbundenen Lehrveranstaltungen, die auch von zahlreichen auswärtigen Teilnehmern besucht wurden. Aufgrund seines Interesses für die Streumethoden mit Röntgen- und Neutronenstrahlen hat er am DESY in Hamburg ein Hochtemperatur-Pulverdiffraktometer für Synchrotronstrahlung aufgebaut und an der Einrichtung des Neutronen-3-Achsen-Spektrometers UNIDAS am FZ Jülich mitgewirkt.

Das wissenschaftliche Interesse von Prof. Arnold galt in erster Linie den strukturellen Phasenübergängen. Besonders hervorzuheben sind dabei seine Arbeiten über die Hoch-Tief-Umwandlung des Quarzes, u. a. seine Dissertations- und Habilitationsschrift. Aufgrund seiner Expertise im Bereich der Symmetriellehre hat er ab 1972 im Auftrag der *International Union of Crystallography* als Co-Editor an der Neuauflage der *International Tables for Crystallography* zusammen mit Prof. Theo Hahn maßgeblich mitgewirkt.

Mit seinem Tod verliert die Gemeinschaft der Kristallographen einen hochgeschätzten Kollegen, aktiven Wissenschaftler und beliebten Lehrer. Unser tiefes Mitgefühl gilt seinen Angehörigen. Wir werden Prof. Arnold stets ein ehrendes Andenken bewahren.

Gernot Heger und Helmut Klapper, Aachen

EKKEHART TILLMANN S

29.01.1941 – 30.12.2020



Kurz vor Vollendung seines 80. Lebensjahres verstarb unser Mitglied Ekkehart Tillmanns unerwartet am Jahresende 2020 im Kreise seiner Familie in Wien.

Im gleichen Jahre war ihm als jüngste bedeutende Anerkennung seines international sichtbaren Lebenswerkes auf dem Gebiet der Mineralogischen Wissenschaft von der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft die Abraham-Gottlob-Werner-Medaille in Gold verliehen worden. Sein Wirken hatte zuvor weitere besondere Würdigung erfahren. Hervorgehoben sei die Verleihung des „Distinguished Grantee Award 1998“ des *International Centre for Diffraction Data* (ICDD, USA) und des Erwin-Schrödinger-Preises der Österreichischen Akademie der Wissenschaften 2002, die Wahl zum Auswärtigen Mitglied der Russischen Akademie der Naturwissenschaften (Moskau) 1999 sowie die Wahl zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina 2000.

In Münster geboren, wählte er mit der Mineralogie ein Studien- und Arbeitsgebiet, an dem er bis zu seinem Lebensende im Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien aktiv Anteil nahm. Sein Weg führte ihn 1961 zunächst an die Universität Tübingen, wo er 1964 das Vordiplom in Mineralogie erwarb, und anschließend an die Universität Göttingen. Dort traf er auf den Wiener Mineralogen und Geologen Josef Zemann, der das Institut für Mineralogie und Kristallographie leitete und seine Diplomarbeit bis zum Abschluss 1966 betreute. Die enge Verknüpfung der Mineralogie mit der Kristallographie hat seine wissenschaftlichen Arbeiten von da an charakterisiert. Er konnte damals allerdings nicht voraussehen, seinem Diplombetreuer 25 Jahre später auf dem Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien nachzufolgen und mit seiner Zuwahl zur Leopoldina diese geowissenschaftliche Forschungsrichtung auch in dieser Akademie mit ihm gemeinsam vertreten zu können.

Von prägendem Einfluss waren darüber hinaus die folgenden zwei Jahre im Mineralogischen Institut der erst kurz zuvor 1963 gegründeten Ruhr-Universität Bochum, wo er 1966 seine Doktorarbeit begann und 1968 zum Dr. rer. nat. promoviert wurde. Im Arbeitskreis seines Doktorvaters Otto Wilhelm Flörke, nachdem er später ein von ihm und seinen Mitarbeitern gefundenes neues Mineral aus der Gruppe der Zeolithe „Flörkeit“ benannte, konnte er sich 1973 mit einer Arbeit „Zur Kristallchemie der Verbindungen im System Bariumoxid-Titandioxid“ habilitieren und damit die Weichen für eine erfolgreiche Hochschullehrerlaufbahn stellen. In den Jahren 1968–1970 hatte er zuvor als „Visiting Assistant Professor“ am *Department of Geological Sciences* der *University of Illinois*, Chicago, Zugang zu modernen Methoden der Röntgenkristallstrukturbestimmung und der Kristallchemie gefunden. Die exzellente Anwendung beider in seinen Arbeiten hat ihm bald hohe Anerkennung in der Fachwelt eingetragen.

Mit dem wirkungsvollen Werkzeug der Röntgenkristallstrukturanalyse hat er für eine breite Palette anorganischer und organischer Feststoffe erstmals umfangreiche und präzise Daten über deren Atomanordnung experimentell ermittelt und diese nicht nur in seinen wissenschaftlichen Publikationen zum Verständnis der Stoffeigenschaften herangezogen, sondern bis heute über einschlägige internationale Datenbanken auch allen interdisziplinären Forschungsvorhaben zur quantitativen Verwertung nutzbar gemacht.

Sein Weg führte ihn dann über eine Professur für Mineralogie und Kristallographie am Institut für Geowissenschaften der Universität Mainz (1974–1985) und über eine weitere Professur für Allgemeine Mineralogie/Kristallographie am Mineralogischen Institut der Universität Würzburg (1985–1991) auf den Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallographie an der Universität Wien (1991–2009). Betrachtet man die in seinen mehr als 185 Originalarbeiten in wissenschaftlichen Zeitschriften präsentierten Ergebnisse, dann lassen sich folgende Schwerpunkte seines Werkes erkennen, mit denen er das Wissenschaftsgebiet der Geowissenschaften in besonderem Maße bereichert hat: die Kristallchemie von Mineralen und anorganischen Verbindungen, die methodische Weiterentwicklung der Nutzung von Röntgenstrahlinterferenzen und die Züchtung azentrischer Kristalle aus wässriger Lösung einschließlich der Vermessung ihrer physikalischen Eigenschaften.

Unter den von ihm studierten Substanzen hat er sich besondere Verdienste um die Gruppe der Zeolithe erworben, deren Anwendungsfelder von Katalysatoren über Abwasserreiniger, Ionenaustauscher zur Wasserenthärtung, Trockenmittel in Geschirrspülern bis zu Futtermittelzusätzen reichen. Weil die atomaren Gerüste sehr flexibel sind, bieten sich vielfältige Möglichkeiten mit dem Wissen des Strukturforschers gezielt Einfluss auf die Eigenschaften der Zeolithe zu nehmen, d. h. zur Materialentwicklung nach Maß.

Über seine erfolgreiche Arbeit als Forscher und Hochschullehrer hinaus hat er sich engagiert für die Förderung des wissenschaftlichen Gedankenaustauschs auf seinem Fachgebiet eingesetzt, namentlich in verantwortlicher Stellung für die inhaltliche Qualität der „Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials“ (Mitherausgeber bis 2000), des „European Journal of Mineralogy“ (Associate Editor bis 2002, Chief Editor 2002–2010) sowie der Zeitschriften „Mineralogy & Petrology“ (Mitherausgeber bis 2003) und „Physics and Chemistry of Minerals“ (Advisory Board).

Außerdem hat sich Ekkehart Tillmanns als aktives Mitglied nationaler und internationaler mineralogischer Gesellschaften gestaltet an deren Leben beteiligt. Erwähnt seien hier vor allem die Deutsche Mineralogische Gesellschaft (DMG), in der er als Mitglied des Beirats (1985–1987) und später als Vertreter der DMG im Vorstand der Arbeitsgemeinschaft

Kristallographie (1988–1991) mitwirkte. Im Rahmen der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft (ÖMG), wo er Mitglied des Vorstands (1992–1997) war, hat er sich besonders um den Fortbestand der engen Verbindungen zwischen DMG und ÖMG verdient gemacht. In Anerkennung dieser Verdienste ist er von der ÖMG zu ihrem Ehrenmitglied (2011) gewählt worden.

Seiner wissenschaftlichen Kompetenz und Bereitschaft zur konstruktiven Mitarbeit an der Weiterentwicklung des Fachgebietes wegen hat man ihm wiederholt Aufgaben von internationalem Rang übertragen. Genannt sei hier der Vorsitz im Österreichischen Nationalkomitee für Kristallographie und – von besonderer Bedeutung – seine Arbeit in der *International Mineralogical Association* (IMA). Als deren Vizepräsident (2006–2010), Präsident (2010–2012) und als „Retired President“ (2012–2014) konnte er über acht Jahre hinweg gestaltend auf die Arbeit dieser weltumfassenden Organisation einwirken, darunter auch die große IMA-Tagung in Budapest 2010 leiten. Ihm zu Ehren ist 2003 ein Mineral der Zusammensetzung $(\text{Ag}_3\text{Hg})(\text{V,As})\text{O}_4$ aus den französischen Alpen „Tillmannsit“ benannt worden.

Gerade die Übertragung der IMA-Funktionen war einerseits Ausdruck eines außergewöhnlichen Vertrauensbeweises der internationalen Gemeinschaft von Mineralogen und andererseits auch eine anspruchsvolle Möglichkeit, durch eigene Initiativen die Entwicklung der IMA mitzuprägen. Dabei gelang es ihm, zugleich die Interessen der deutschen und österreichischen Fachwelt wirksam zu vertreten. Darüber hinaus hat er einer Vielzahl von Schülern den Weg in die Geowissenschaften geebnet, die nun sein Werk dankbar und erfolgreich fortsetzen. Seiner Frau Uta Tillmanns-Niedereder und der übrigen Familie gehört unsere besondere Anteilnahme am Verlust von Ekkehart Tillmanns, den wir als kenntnisreichen und liebenswürdigen Kollegen nun besonders vermissen.

Peter Paufler, Dresden und Dirk C. Meyer, Freiberg



Prof. Dr. Ekkehart Tillmanns, 1941 in Münster geboren, entwickelte seine Faszination für die Kristallographie bereits im Zuge seines Mineralogiestudiums, welches er in Tübingen begann und 1966 in Göttingen mit einer Diplomarbeit unter Betreuung von Josef Zemann beendete. 1968 folgte die Promotion nach Abschluss seiner Doktorarbeit unter Anleitung von Otto Wilhelm Flörke an der Ruhr-Universität Bochum. Nach einem zweijährigen Aufenthalt im *Department of Geological Sciences* an der *University of Illinois* in Chicago folgte die Rückkehr nach Bochum, wo er sich 1973 mit einer Arbeit „Zur Kristallchemie der Verbindungen im System Bariumoxid-Titanoxid“ habilitierte. Seine wissenschaftliche Karriere setzte er an der Universität Mainz (1974–1985) als Professor (C2) fort, bevor er einen Ruf auf die C3-Professur für Kristallographie an der Universität Würzburg (1985–1991) annahm. Schließlich folgte er 1991 einem Ruf an die Universität Wien auf den Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallographie, wo er Nachfolger seines akademischen Lehrers Josef Zemann wurde und als Leiter des Instituts für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien bis zu seiner Emeritierung im Jahr 2009 tätig war.

Der Schwerpunkt seiner wissenschaftlichen Forschungstätigkeit war die mineralogische Kristallographie, die Strukturkristallographie und Kristallchemie von Mineralen und deren Analogphasen. Der Zeolithgruppe sowie verwandten mikroporösen Gerüststrukturen galt dabei sein besonderes Augenmerk. Neben der eigentlichen Strukturaufklärung und der Anwendung von röntgenkristallographischen Methoden waren es insbesondere auch die Struktur-Eigenschaftsbeziehungen, die ihn begeisterten. Auch bei anderen materialwissenschaftlich wichtigen Materialklassen wie z. B. natürlichen Zementphasen oder Mullit-Präkursoren leistete er bedeutsame Beiträge für die anwendungsorientierte Mineralogie. Technisch relevante Aspekte von Kristallen führten im Weiteren zu Arbeiten im Bereich der physikalischen Kristallographie, wo er sich unter anderem mit azentrischen Solvatkristallen oder auch organischen Salzen und deren kristalloptischen Eigenschaften befasste. Die mineralogische Strukturkristallographie stand jedoch stets im Fokus seines breitgefächerten Engagements, sodass ein 2003 neu entdecktes tetragonales Vanadatmineral (HgAg_3VO_4 , Raumgruppe $I\bar{4}$) ihm zu Ehren als *Tillmannsit* benannt wurde. Das diesem Nachruf beiliegende Foto zeigt Ekkehart Tillmanns vor dem Strukturmodell „seines“ Minerals.

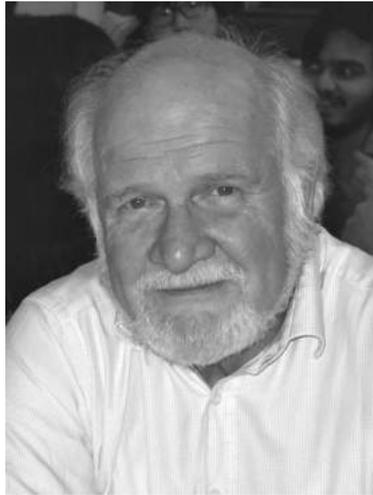
Ekkehart Tillmanns war Mitherausgeber der Zeitschriften „Mineralogy and Petrology“ und „Zeitschrift für Kristallographie“, *Associate* bzw. *Chief Editor* des „European Journals of Mineralogy“, und Mitglied im *Editorial Board* von „Physics and Chemistry of Minerals“. Neben knapp 200 Publikationen ist sein wissenschaftliches Œuvre durch zahlreiche Ehrungen gewürdigt, so z. B. als Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina, als auswärtiges Mitglied der Russischen Akademie der Naturwissenschaften und seit 2012 als Ehrenmitglied der Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft. Einen besonderen Höhepunkt seiner Tätigkeiten für die mineralogisch-kristallographische *Community* stellt die Präsidentschaft der *International Mineralogical Association* von 2010 bis 2012 dar. Ferner war er Träger des *Distinguished Grantee Awards* des ICDD und erhielt 2002 den Erwin Schrödinger-Preis der Österreichischen Akademie der Wissenschaften. Noch im Juni 2020 wurde ihm die Abraham-Gottlob-Werner-Medaille in Gold als einer der höchsten Auszeichnungen der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft verliehen.

In der Nacht vom 29. auf den 30. Dezember 2020, vier Wochen vor seinem 80. Geburtstag, verstarb Ekkehart Tillmanns im Kreis seiner Familie in Wien. Mit Ekkehart Tillmanns hat die Kristallographie nicht nur einen engagierten und bedeutenden Forscher, sondern auch einen herzengütigen Kollegen, Wegbegleiter und Freund verloren.

Volker Kahlenberg, Innsbruck und Ronald Miletich, Wien

HANS BOYSEN

23.05.1944 – 19.03.2021



Am 19.03.2021, wenige Wochen vor seinem 77. Geburtstag, verstarb Dr. Hans Boysen. Er war ein wichtiger Wegbereiter der kristallographischen Forschung mit Neutronen in Deutschland und erforschte insbesondere die Eigenschaften fehlgeordneter Kristalle mit Röntgen- und Neutronenbeugung.

Geboren 1944 in Karlsbad, besuchte Dr. Hans Boysen die Schule in Flintbek und Kiel, wo er auch sein Physik-Studium begann. Nach dem Vordiplom wechselte er an die Ludwig-Maximilians-Universität in München (LMU), wo er mit dem Diplom in Physik abschloss. Anschließend promovierte er am Institut für Kristallographie und Mineralogie der LMU bei Prof. Heinz Jagodzinski und blieb dort als wissenschaftlicher Mitarbeiter bis zum verdienten Ruhestand.

Ein Schwerpunkt seiner wissenschaftlichen Arbeit war die kristallographische Strukturfor- schung mit Neutronen. Schon am ersten Forschungsreaktor München (FRM), dem sogenannten Garching Atom-Ei, engagierte er sich bei Entwicklung und Betrieb von Neutronen-Diffraktometern. Später, an der Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) prägte Hans Boysen die kristallographische Forschung nachhaltig. Besonders engagierte er sich in der Planung, dem Aufbau und der Nutzung des Pulver-Diffraktometers SPODI am FRM II. Auch bei der Konzeption des Einkristall-Diffraktometers RESI flossen seine Ratschläge ein. Seine grundsätzlichen methodischen Beiträge hierbei waren unter anderem die Umsetzung fokussierender Techniken in Bezug auf Monochromatoren und die effiziente, hochaufgelöste Nutzung der Debye-Scherrer-Kegel. Auch bei der Entwicklung spezieller Probenumgebungen, zum Beispiel für Messungen bei sehr hohen Temperaturen bis mehr als 2000 °C, war Dr. Hans Boysen erfolgreich.

Schwerpunkt der Beiträge Dr. Hans Boysens zur Strukturforschung in Geo- und Materialwissenschaften war die Analyse der thermischen Entwicklung von Ordnungs-Unordnungsphänomenen und strukturellen Phasentransformationen mit Hilfe von Röntgen- und Neutronenbeugung. Hierzu gehörten zum Beispiel die Charakterisierung von fehlgeordneten Mineralen, Ferroelektrika, Sauerstoff- und Lithium-Ionenleitern. Seine Arbeiten zusammen mit den dabei entwickelten Auswertemethoden sind von hohem aktuellem Interesse.

Hans Boysens Engagement ging weit über die unmittelbare Forschung hinaus. Wegen seiner breiten Expertise war er in nationalen und internationalen Gremien tätig. Intensiv und engagiert brachte er sich auch in die Aus- und Weiterbildung junger Menschen ein und betreute zahlreiche Studien-, Diplom- und Doktorarbeiten.

Für seine herausragenden Leistungen bei der Entwicklung von Streumethoden zur Strukturforschung und im Bereich der Fehlordnungskristallographie erhielt Hans Boysen zusammen mit seinem langjährigen Kollegen Prof. Dr. Friedrich Frey im Jahr 2010 die Will-Kleber-Gedenkmünze der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.

Dr. Hans Boysen war wegen seiner tiefgründigen und sympathischen Art unter Kollegen und Kolleginnen und allen seinen Schülern und Schülerinnen besonders geschätzt. Seine Werke sind ein bleibendes Fundament, auf dem wir stehen, aber wir vermissen ihn schmerzlich.

Wolfgang Schmahl, So Hyun Park, Anatoliy Senyshyn, Markus Hölzel, Martin Meven,
Peter Gille, Guntram Jordan, Friedrich Frey, Wolfgang Moritz, Natalija van Well, München

TIBOR KORITSANSZKY

02.09.1954 – 02.06.2021



Tibor Koritsanszky, Professor an der *Middle Tennessee State University* in Murfreesboro, USA, ist am 2. Juni 2021 bei einem Autounfall ums Leben gekommen. Er wurde 66 Jahre alt.

Tibor hat neben vielen Stationen mehrere Jahre in Berlin an der Freien Universität gearbeitet, an unserem Institut für Chemie promoviert und während dieser Zeit federführend an der Entwicklung des Programmsystems XD zur Elektronendichtebestimmung gearbeitet, das eine weltweite Verbreitung fand und noch findet.

Tibor war ein herausragender international geschätzter Wissenschaftler, der während seiner Berliner Zeit in unserer Gruppe nicht nur hohe Anerkennung genoss, sondern auch viele persönliche Freundschaften geschlossen hat.

Tibor war ein unruhiger Geist im positiven Sinne, der immer neue Kontakte in der akademischen Welt gesucht hat. Er war gebürtiger Ungar und hat zunächst seine erste akademische Ausbildung in Budapest genossen. Alajos Kalman war zu dieser Zeit Lehrer und Förderer. Er ging anschließend zu Philip Coppens nach Buffalo und hat dort seine Kenntnisse über die Elektronendichte an einer ersten Adresse erweitert. Eine weitere wichtige Station war ein Gastaufenthalt bei Hans-Beat Bürgi in Bern. Von dort ist er nach Berlin gekommen, wo man ihn dezent darauf hinweisen musste, dass er noch nicht einmal promoviert hatte, obwohl er wissenschaftliche Ergebnisse vorweisen konnte, die für mehrere Doktorarbeiten gereicht hätten. Mit sanftem Druck konnte man ihn überreden, dies nachzuholen, obwohl er aus seiner Meinung keinen Hehl machte, dass ihm akademische Grade wenig bedeuteten.

Als die Promotion und die Arbeiten an XD abgeschlossen waren, folgte er einer Einladung von Jan Boeyens an die Witwatersrand University in Johannesburg, Südafrika. Er erlebte dort relativ unruhige Übergangszeiten, so dass er bald nach einem neuen Arbeitsfeld suchte. Er ging wieder in die USA, zunächst noch einmal zu Phil Coppens nach Buffalo, dann wurde er auf eine Professur in Tennessee berufen, wo er schließlich zu einer gewissen Ruhe kam. Er hat noch lange Zeit mit unserer Berliner Gruppe und anderen Kollegen aus früheren akademischen Stationen zusammengearbeitet. Wir haben uns auch noch mehrmals auf internationalen Tagungen getroffen.

Die Nachricht von seinem plötzlichen Unfalltod hat uns sehr betroffen gemacht, die „Charge Density Community“ hat einen bedeutenden Kollegen verloren. Wir werden ihn in dankbarer Erinnerung behalten. Mindestens mit XD hat er sich selbst ein bleibendes Denkmal gesetzt.

Unsere Gedanken sind bei seiner Frau Maria und seinen drei Kindern.

Peter Luger, Berlin

OTTO WILHELM FLÖRKE

02.08.1926 – 28.07.2021



Mit Otto Flörke verstarb im Juli 2021 einer der mineralogischen Kristallographen aus der Aufbauphase nach dem 2. Weltkrieg, der maßgeblich an der Ausgestaltung des Faches Kristallographie mitgewirkt hat und immer für seine Verankerung in den Geowissenschaften gekämpft hat. Sein wissenschaftliches Erbe ist mit der Strukturfamilie der SiO_2 -Varietäten eng verknüpft, die bis heute in der Kristallographie eine herausragende Rolle spielt.

Typisch für seine Generation führte das (Not-)Abitur nicht an die Universität sondern in den Krieg. Die Hochschulreife musste er sich in einem „Reifekurs“ nach dem Krieg bestätigen lassen, bevor er in Marburg Chemie, Physik und Mineralogie studieren konnte. Die Ausbildung schloss er 1951 mit einer Dissertation bei F. H. Laves ab, zu jener Zeit an der Uni in Chicago. Über ein Stipendien-finanziertes Jahr bei O’Daniels in der Mineralogie an der Göthe-Universität Frankfurt, kam er an das Würzburger Max-Planck-Institut für Silicatforschung, wo er als wissenschaftlicher Mitarbeiter bei A. Dietzel seine Arbeiten über Silicate und ihren atomaren Aufbau fortsetzen konnte. Sein wissenschaftliches Interesse führte ihn in der Folge zu Kristalldefekten, Fehlordnung von Schichten im Festkörper, Ordnung in Gläsern und, über die Silicate hinaus, zu TiO_2 und Farbzentren. Nach einem Wechsel an die ETH Zürich zu seinem alten Lehrer Laves im Jahr 1959, habilitierte sich Flörke für das Fachgebiet Kristallchemie mit einer Arbeit über Titanweiß-Emails (1960). An der ETH im Institut für Kristallographie und Petrographie übernahm er daraufhin als Privatdozent und Oberassistent Lehraufträge und Forschungsprojekte.

Mit dem Ruf auf eine ordentliche Professur an der Ruhr-Universität als Gründungsdekan der geowissenschaftlichen Fakultät im Jahr 1963 begann ein neuer Lebensabschnitt von Otto Flörke. Als neunter Professor an der Universität, die nichts als eine Großbaustelle war, und ihre Fakultäten in Behelfsgebäuden untergebracht hatte, waren in erster Linie Visionen und Tatkraft gefragt. Die Struktur und die Zukunftsfähigkeit der geowissenschaftlichen Fakultät der Ruhr-Universität basieren auf den Ideen von Otto Flörke. Geographie und Geowissenschaften mit breit aufgestellten Fachdisziplinen in den Abteilungen zeichneten das Konzept für die Fakultät aus. In der Mineralogie verankert, leitete er im mineralogischen Institut bis 1989 die Abteilung Kristallographie, die neben der Petrologie den Studiengang ausmachte. Es sollte hier auch erwähnt werden, dass Otto Flörke zeitweise die Lehrstühle in Münster und Bochum vertrat, sich dann aber für Bochum entschieden hat.

Der rote Faden seiner Forschungstätigkeit in Bochum war die Beschäftigung mit der Polytypie und den Defekten der Strukturfamilie der SiO_2 -Varietäten, die er um das Mineral Moganit erweiterte. Darüber hinaus waren Quarz, die Tridymite, Silica-X, poröse Silicas, Opale, mikrokristalline, amorphe und glasartige SiO_2 -Phasen, displazive und rekonstruktive Phasenumwandlungen lange Zeit im Fokus seines Interesses. Eine Übersicht über seine Aktivität und den Einfluss auf das Forschungsgebiet hat Otto Flörke im Ullman federführend zusammengestellt (https://doi.org/10.1002/14356007.a23_583.pub3). In der Lehre konzipierte Otto Flörke den Vertiefungsstudiengang Kristallographie innerhalb der mineralogischen Ausbildung. Seine Skripte waren begehrte und lehrreiche Handbücher, die bis in die heutige Zeit hinein ausstrahlen. Ein besonderes Augenmerk richtete er auf technische und angewandte Themen, die er durch eine umfangreiche Sammlung von Werkstücken anschaulich gemacht hatte.

Über Mineralogie in Bochum hinaus hat Otto Flörke vielfältig in Wissenschaftsorganisationen gewirkt. Sein Engagement für die DFG über viele Jahrzehnte ist beispielhaft, wo er als Fachgutachter, als berufenes Mitglied des Senatsausschusses, als Mitglied des Bewilligungsausschusses für SFBs, als Mitglied der Senatskommission für geowissenschaftliche Gemeinschaftsforschung und als Koordinator für Schwerpunktprogramme tätig war.

Anerkennung über die Zeit hinweg fand Otto Flörkes Wirken in der Verleihung des V. M. Goldschmidt Preises (DMG) in jungen Jahren, in der Ernennung zum *Fellow* der *American Mineralogical Society* und in der Georg-Agricola-Medaille der DMG im reifen Alter. Seine Wertschätzung national und international kommt auch in drei Rufen auf Lehrstühle, die er zu Gunsten der RUB ausgeschlagen hatte, und Gastprofessuren an verschiedene Universitäten zum Ausdruck. Zu Ehren von Otto Flörke wurde von der *International Mineralogical Association* ein Mineral nach ihm benannt, der Flörkeit.

Es war Otto Flörkes Charakterzug, die Person hinter die Sache zu stellen. Laudationen und Ehrungen waren ihm nicht wichtig. Er war immer präsent und suchte den persönlichen Kontakt mit Kollegen und jungen Nachwuchswissenschaftlern, der ihm in seiner warmherzigen Art nicht schwerfiel. Wir sind uns sicher, dass er den Nachruf umarbeiten und kürzen würde. So haben wir ihn kennengelernt und werden in diesem Sinne seiner gedenken.

Hermann Gies, Heribert Grätsch, Bernd Marler und Jürgen Schreuer, Bochum

ANKÜNDIGUNGEN



30th Annual Meeting of the German Crystallographic Society March 14–17 2022



Dear Friends and Colleagues,

We cordially invite you to the 30th annual conference of the German Crystallographic Society (30. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, DGK), which will be held in Munich from March 14 to 17, 2022. The conference will be jointly organized by scientists and members of the Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU), the Technische Universität München (TUM), the Munich Geocenter (MGC), the Heinz-Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ), and the Mineralogische Staatssammlung München (MSM-SNSB). The venue is the historical (1835–1840) building of the LMU, close to the city center of Munich.

We will make sure to provide an exciting meeting with hot scientific topics, 30 years after the founding of the DGK, and 110 years after the discovery of X-ray diffraction by Max von Laue, Walter Friedrich, and Paul Knipping in Munich. The famous basement laboratory, which was reluctantly left by Röntgen and Sommerfeld to Friedrich and Knipping for their pioneering experiments, is only about 50 meters away from the venue. In this crucial period of photon-science and crystallography, and in the same buildings, also Peter Paul Ewald conceived his famous reciprocal space sphere. At the entrance to said basement, sculpted spheres from a 1906–1909 building period remind crystallographers of the progress of their field in this era. Another historic landmark of science is the “atomic egg” building on the MLZ site at the TUM campus in Garching. Completed in 1957, it hosted the first research reactor for experiments with neutrons in Germany. Neutron diffraction as a tool for crystallography was pioneered by Ernest O. Wollan and Clifford Shull in the USA from 1945 onwards. 80 years after Max von Laue, Clifford Shull received the 1994 Nobel Prize in Physics together with Bert Brockhouse, who pioneered triple axis neutron spectroscopy in Canada to investigate lattice dynamics of crystals. These and other techniques form the inventory of the modern research center around the new neutron source FRM II at the MLZ, which launched its user operation in 2005.

Much more could be said, but come to Munich, breathe history, and present your own cutting-edge research at DGK30. For details and announcements, we will keep you updated on:

www.DGK-30-Munich-2022.de

On behalf of the organizing committee:
Wolfgang Schmahl and Martin Meven, Munich



NEVER **WONDER** IF YOU MISSED A CLUE
JUST TRUST **THE CLEANEST DATA**

Please contact us for
more information

BECAUSE WE BEAT THE FLUORESCENCE PROBLEM

Truly exclude unwanted fluorescence interference for dramatic data improvements in crystallography and discover more about your materials with the new 1Der detector. Its unique features allow you to identify the low intensity peaks that often provide the final clues in a Rietveld crystal structure refinement.

When combined with the Empyrean's unique optics, 1Der provides you with trustworthy data quality for X-ray diffraction. The data cleanliness is such as to include the weak but significant signal from low intensity peaks which can be the final proof of the appropriate crystal structure symmetry.



DGK2022 SATELLITE WORKSHOP ANNOUNCEMENT

On the annual conference of the DGK in Munich from March 14–17, 2022, the “Neutron Scattering” working group (AK7) is planning a satellite workshop for the conference. Further details will be announced on the website of the working group as soon as possible:

<http://wiki.mlz-garching.de/dgk-ak7:index>

With this workshop we invite students, young and senior scientists in the various natural and material sciences to an introduction to the fundamentals and in the various applications of neutron scattering for structure research, which often provide additional information on important topics in materials and basic research, for example in crystallography, physics, chemistry, biology and materials science.

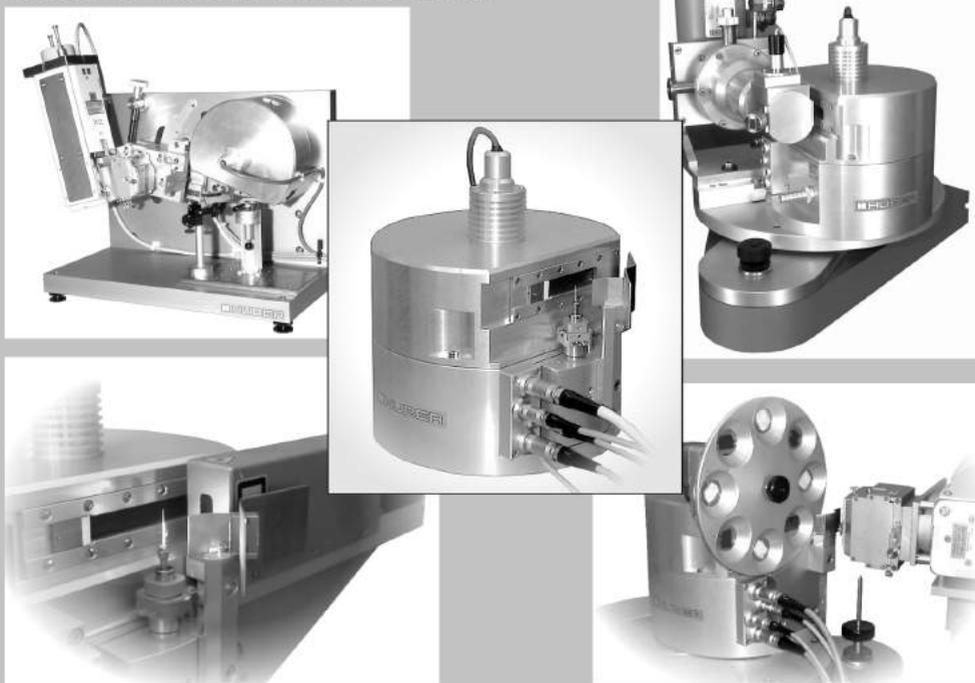
The planned contributions include powder and single crystal diffraction as well as small-angle scattering on complex, partly also magnetic structures, inelastic scattering methods for the determination of structural and magnetic excitations as well as the analysis of diffuse scattering and stress analysis. In addition, the participants will be given the opportunity to discuss their own topics intensively with the various experts and optionally to visit the experimental facilities of the Heinz Maier-Leibnitz Research Neutron Source (FRM II) at the Heinz Maier-Leibnitz Center (MLZ) in Garching nearby. A participation fee is not planned.

Looking forward to see you in Munich.

Martin Meven, München

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

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN MAX-VON-LAUE-PREIS 2022

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

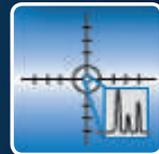
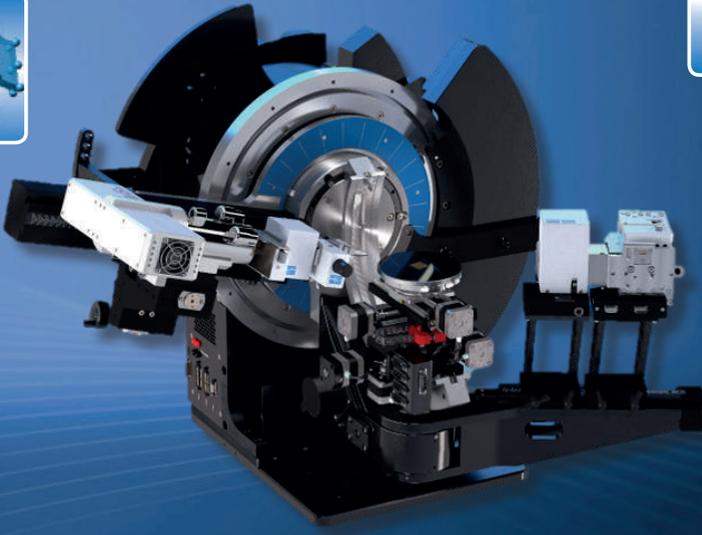
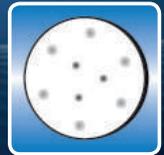
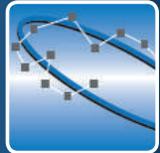
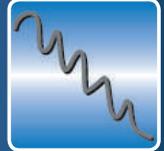
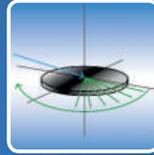
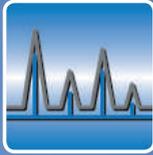
auch in diesem Jahr schreibt die DGK wieder den **Max-von-Laue-Preis** für herausragende Nachwuchswissenschaftler*innen aus. Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie hiermit herzlich einladen, geeignete Kandidatinnen und Kandidaten vorzuschlagen. Bitte leiten Sie diese Ausschreibung auch an Ihre Kolleg*innen weiter. Vorschlagsberechtigt ist jedes DGK-Mitglied sowie Mitglieder fachnaher und assoziierter Gesellschaften und andere interessierte Wissenschaftler*innen!

Wir benötigen eine Stellungnahme der/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“ an den Vorsitzenden des Preiskomitees:

Dr. Manuel Hinterstein
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Institut für Angewandte Materialien
Haid-und-Neu-Straße 7
76131 Karlsruhe
Tel.: 040 8998 4094
E-Mail: manuel.hinterstein@googlemail.com

Preiskomitee für den Max von Laue-Preis:

- Dr. Manuel Hinterstein – Karlsruhe Institut für Technologie
- Prof. Dr. Hermann Schindelin – Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- Prof. Dr. Björn Winkler – Goethe Universität Frankfurt am Main
- Dr. Matthias Zschornak – TU Bergakademie Freiberg
- *Vorsitzender der DGK (ex officio):* Prof. Dr. Thomas Schleid – Universität Stuttgart



**If Intensity, Data Quality,
Accuracy and Versatility Matters:**

**The D8 DISCOVER Plus
*Choose Excellence.***

www.bruker.com/xrd

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL - KLEBER - GEDENKMÜNZE 2022

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 **30.11.2021** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

Prof. Dr. Thomas Schleid
Universität Stuttgart
Institut für Anorganische Chemie
E-Mail: schleid@iac.uni-stuttgart.de

Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze:

- Prof. Dr. Thomas Schleid – Universität Stuttgart
- Prof. Dr. Guntram Jordan – Ludwig-Maximilians-Universität München
- Dr. Leonore Wiehl – Technische Universität Darmstadt
- Prof. Dr. Norbert Sträter – Universität Leipzig

Bisherige Preisträger:

- 2021 Manfred S. Weiss
- 2020 Robert Dinnebier
- 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



AXO DRESDEN: X-ray sources, coatings & multilayer optics

Primux 50 microfocus X-ray sources

high brilliance, water-cooled, easy alignment, low running and maintenance costs

Tailored multilayer X-ray optics

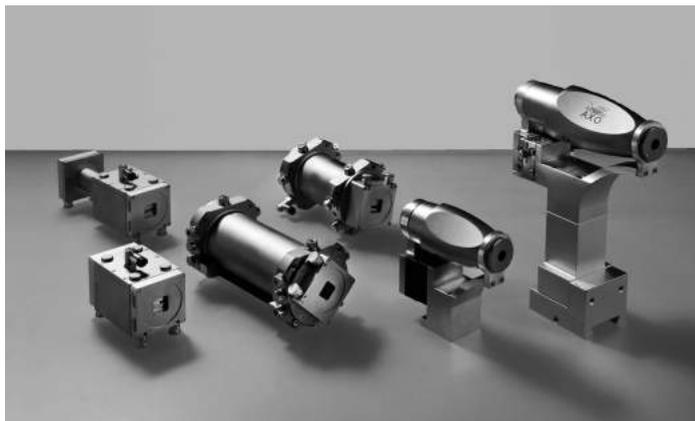
all wavelengths, focusing or collimating, focal length, bandwidth, convergence and other parameters on demand

Multilayer monochromators and coatings

synchrotron mirrors, nm to sub-monolayers, reference and calibration samples, and more

Complete systems and upgrades

for all common instruments, tailored solutions



AUF RUF ZU NOMINIERUNGEN
FÜR DIE
CARL-HERMANN-MEDAILLE 2022

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 **30.11.2021** zuzusenden.

Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Prof. Dr. Robert Dinnebier
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstraße 1
70569 Stuttgart
Tel.: 0711 689 1503
E-Mail: r.dinnebier@fkf.mpg.de

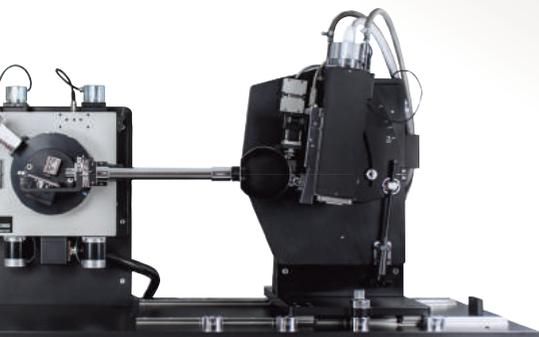
Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille:

- Prof. Dr. Robert Dinnebier – Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
- Dr. Karen Friese – Forschungszentrum Jülich
- Prof. Dr. Oliver Oeckler – Universität Leipzig
- Dr. Manfred Weiss – Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
- *Vorsitzender der DGK (ex officio):* Prof. Dr. Thomas Schleid – Universität Stuttgart



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

AUF RUF 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 der Jahrestagung der DGK in Hamburg überreicht.

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

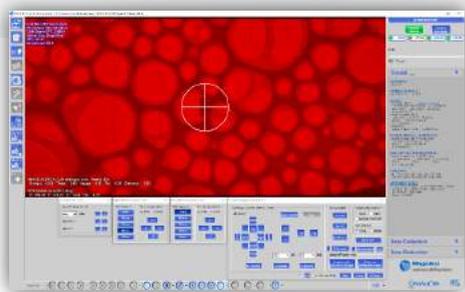
Vorschläge mit kurzer Begründung werden bis Montag, den 30. November 2020, erbeten und sind per E-Mail bei dem Vorsitzenden der Preiskommission (Dr. Ulrich Schwarz, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, schwarz@cpfs.mpg.de) einzureichen.

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.

Ulrich Schwarz, Dresden

INTRODUCING OUR NEW ELECTRON DIFFRACTOMETER: XtaLAB Synergy-ED

- HyPix technology inside
- CrysAlis^{Pro} for easy instrument control and data processing
- Study submicron samples with ease



Fully controllable from CrysAlis^{Pro}: find, center and collect data on samples with our intuitive control and data processing software.



Features a Rigaku HyPix detector for high-quality electron diffraction data.

We wanted to lower the barrier to entry to the emerging field of single-crystal electron diffraction, so we joined forces with JEOL to bring the expertise of both companies to one fantastic product.

With JEOL's expertise in generation and control of electron beams and Rigaku's expertise in HPC detectors and crystallographic software, we bring you our new electron diffractometer, the XtaLAB Synergy-ED.



AUSSCHREIBUNG LIESELOTTE - TEMPLETON - PREIS 2022

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen im Jahr 2022 herausragende Studienleistungen (z. B. Bachelor-, Master-, Diplomarbeiten, Staatsexamen oder vergleichbare Projektarbeiten) gewürdigt werden, in denen Methoden und Aspekte der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden. Der Preis wird erstmalig auf dem Ehrenabend der 30. Jahrestagung der DGK in München verliehen.

Der Preis wird jährlich an bis zu maximal drei Preisträger*innen vergeben und besteht je aus einer Urkunde und der Finanzierung der Teilnahme an der Jahrestagung inklusive Konferenzdinner und der Übernahme der Reisekosten gemäß Bundesreisekostengesetz bis zu maximal 500 Euro sowie einer dreijährigen Mitgliedschaft in der DGK. Der Preis soll dazu beitragen, die Attraktivität der Kristallographie insbesondere bei Studierenden zu erhöhen und wissenschaftlichen Nachwuchs im Bereich der Kristallographie zu fördern.

Wir laden Sie herzlich ein, geeignete Kandidat*innen vorzuschlagen. Bitte geben Sie diese Ausschreibung auch an Kolleg*innen weiter. Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder*innen der DGK, Mitglieder*innen fachnaher und assoziierter Gesellschaften und andere interessierte Wissenschaftler*innen.

Bitte senden Sie Vorschläge (1 PDF-Dokument, max. 10 MB) mit einem Gutachten des Hochschullehrenden, einer Zusammenfassung des Studierenden (jeweils maximal eine A4-Seite, allgemeinverständlich) sowie einem Lebenslauf per E-Mail mit dem Betreff „Lieselotte Templeton-Preis“ an den Vorsitzenden des Preiskomitees:

Dr. Tilmann Leisegang
TU Bergakademie Freiberg
Institut für Experimentelle Physik
E-Mail: tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de

Einsendeschluss: 31. Oktober 2021

TAGUNGEN UND TERMINE

September 2021

- 01.09. – 02.09.2021 **Powder and Single Crystal XRD: Hybrid STOE User Meeting**
Darmstadt (Hybrid)
<https://register.gotowebinar.com/register/7164812906812593163>
- 01.09. – 03.09.2021 **IUCr2021 Computing School**
Virtuell
<https://www.xray.cz/iucr/workshops/nh>
- 01.09. – 03.09.2021 **EuCOMC XXIV Conference on Organometallic Chemistry**
Virtuell
<https://congresosalcala.fgua.es/eucomc2021virtual>
- 06.09. – 16.09.2021 **2021 Birkbeck/EMBO course: Image processing for cryo-electron microscopy**
Virtuell
h.saibil@mail.cryst.bbk.ac.uk
- 16.09. – 17.09.2021 **23rd Heart of Europe Bio-Crystallography Meeting (HEC23)**
Virtuell
<https://www.hec23.uni-bayreuth.de>
- 20.09. – 21.09.2021 **Präsenzkurs: Einsatz der statistischen Software R: Grundlagen, Data-Mining und maschinelles Lernen (643/21)**
Frankfurt am Main
<https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Veranstaltungen/Fortbildungen/flyer/2017/164321.pdf>
- 20.09. – 23.09.2021 **Fall Meeting of the European Materials Research Society (EMRS)**
Virtuell
<https://www.european-mrs.com/>
- 20.09. – 01.10.2021 **8th South American Macromolecular Crystallography School 2021 “Structural Biology to enhance high impact research in health and disease”**
Virtuell
<http://pasteur.uy/novedades/mx2021>
- 20.09.2021 **Austrian Cryo-EM (ACE) Symposium**
Wien (Österreich)
<https://ace.ist.ac.at>

- 23.09. – 24.09.2021 **Präsenzkurs: Moderne Rietveld-Analyse (389/21)**
Frankfurt am Main
<https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Veranstaltungen/Fortbildungen/flyer/2017/138921.pdf>
- 24.09.2021 **„Ich krieg’ den Job“ – Erfolgsstrategien für die erfolgreiche Jobsuche und wie Sie berufliche Netzwerke dabei nutzen können**
Virtuell
karriere@gdch.de
- 27.09. – 01.10.2021 **ICDD Rietveld Refinement & Indexing Clinic**
ICDD Headquarters, Newtown Square, PA (USA)
<https://www.icdd.com/rietveld>
- 30.09.2021 **Präsenzkurs: Forschungsdatenmanagement (NFDI) (452/21)**
Witzenhausen bei Kassel
fb@gdch.de

Oktober 2021

- 04.10. – 19.10.2021 **CSHL X-ray Methods in Structural Biology Course**
Cold Spring Harbor, NY (USA)
<https://meetings.cshl.edu/courses.aspx?course=C-CRYS&year=21>
- 05.10.2021 **JDGKK Jahrestreffen 2021**
Berlin
<https://dkt2021.ikz-berlin.de/jdgkk.html>
- 06.10. – 27.10.2021 **Online-Kurs: NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung (506/21)**
Virtuell
<https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Veranstaltungen/Fortbildungen/flyer/2017/150621.pdf>
- 06.10. – 08.10.2021 **Deutsche Kristallzüchtungskonferenz DKT-2021**
Berlin
<https://dkt2021.ikz-berlin.de>
- 27.10. – 28.10.2021 **Smart Data Collection for CryoEM**
New York (USA)
bnc@nysbc.org

- 30.10. – 31.10.2021 **3DEM Gordon Reach Seminar**
Sunday River, Maine (USA)
<https://www.grc.org/three-dimensional-electron-microscopy-grs-conference/2021>
- 31.10. – 05.11.2021 **Three Dimensional Electron Microscopy Gordon Research Conference**
Sunday River, Maine (USA)
<https://www.grc.org/three-dimensional-electron-microscopy-conference/2021>

November 2021

- 01.11. – 05.11.2021 **ICDD Clinic – Practical X-ray Fluorescence**
ICDD Headquarters, Newtown Square, PA (USA)
<https://www.icdd.com/xrf>
- 25.11. – 26.11.2021 **Online-Kurs: Patent-Know-how für Chemiker (991/21)**
Virtuell
<https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Veranstaltungen/Fortbildungen/flyer/2017/199121.pdf>

Dezember 2021

- 06.12. – 08.12.2021 **Asia-Pacific Cryo-EM Symposium**
Virtuell
<https://www.apac-cryoem.org>
- 09.12. – 10.12.2021 **Workshop on epitaxy of III-V semiconductors 2021**
Bremen
https://www.dgkk.de/images/dgkk/pdf/Ist_Anouncement_DGKK_2021_June_2020.pdf
- 16.12. – 17.12.2021 **Italian Crystal Growth – Crystal growth: from Theory to Application**
Turin (Italien)
<https://www.icg2020.net>

Überblick 2022

- 27.01. – 28.01.2022 **DESY Users' Meeting**
Hamburg
https://photon-science.desy.de/users_area/users%27_meeting

- 07.02. – 09.02.2022 **ESRF User Meeting**
Grenoble (Frankreich)
<https://www.esrf.fr/home/events/conferences/content/area-events/esrf-events-list/user-meeting-2022.html>
- 06.03. – 11.03.2022 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie**
Regensburg
<https://www.dpg-physik.de/aktivitaeten-und-programme/tagungen/fruehjahrstagungen/2022>
- 14.03. – 17.03.2022 **30. DGK-Jahrestagung**
München
<http://www.dgk-30-munich-2022.de>
- 14.03. – 17.03.2022 **Asia-Pacific Cryo-EM Symposium**
Virtuell
<https://www.apac-cryoem.org>
- 30.05. – 03.06.2022 **Spring Meeting of the European Materials Research Society (EMRS)**
Strasbourg (Frankreich)
<https://www.european-mrs.com/meetings/2022-spring-meeting-0>
- 27.06. – 01.07.2022 **Joint ISAF-PFM-ECAPD Symposia**
Tours (Frankreich)
<https://ieee-uffc.org/ferroelectrics/ferroelectrics-symposia>
- 23.08. – 27.08.2022 **European Crystallographic Meeting (ECM 33)**
Versailles (Frankreich)
<https://www.ecm33.fr>
- 11.09. – 15.09.2022 **100. Jahrestagung der DMG**
Köln
<https://www.dmg-home.org>
- 19.09. – 22.09.2022 **Fall Meeting of the European Materials Research Society (EMRS)**
Warschau (Polen)
<https://www.european-mrs.com/meetings/2022-fall-meeting>

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.dmg-home.org>

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

WWW-Redakteur:

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

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

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),
Prof. Dr. Thomas Schleid

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 [] Hochoauflösende Röntgenstreuung und Synchrotronstrahlung
- AK 12 [] Spektroskopie
- AK 13 [] Pulverdiffraktometrie
- AK 14 [] Computational Crystallography
- AK 15 [] Mineralogische und Technische Kristallographie
- AK 16 [] Aperiodische Kristalle
- AK 17 [] Kristallographie in der Lehre
- ~~AK 18~~ [] (seit 3/2016 zusammengelegt mit AK 20)
- AK 19 [] Kristallchemie
- AK 20 [] Materialwissenschaftliche Kristallographie
- AK 21 [] Junge Kristallographen

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

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

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

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

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

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

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

<https://dgg-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 16. März 2021 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.

