



Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 29

Januar 2005

Die Mitteilungen werden von einem **Redaktionsteam** (Prof. Dr. L. Bohatý und Dr. P. Held) der DGK herausgegeben. Sie erscheinen in unregelmäßigen Abständen zweimal pro Jahr. Beiträge, Anregungen und Kritiken etc. sind zu richten an:

Prof. Dr. Ladislav Bohatý
Institut für Kristallographie
Universität zu Köln
Zülpicher Str. 49 b, 50674 Köln
Tel.: 0221/470-3154, Fax: 0221/470-4963
Email: ladislav.bohaty@uni-koeln.de

Vorstand

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

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

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

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

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

Homepage:

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

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

Druck und Verarbeitung: Hundt Druck GmbH, Köln

Dieses Heft enthält je eine bezahlte Anzeigen der Firmen BRUKER AXS GmbH, RÖNTGENLABOR Dr. Ermrich, HUBER Diffraktionstechnik GmbH, MSC Rigaku, Agfa NDT Pantak Seifert GmbH, STOE & CIE GmbH und CRYSTAL IMPACT.

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

Liebe Kolleginnen, liebe Kollegen,

während ich dieses schreibe, ist die Jahreswende nicht mehr fern. Es ist daher geboten, Ihnen allen namens des Vorstands der DGK die besten Wünsche für das Jahr 2005 zu übermitteln, und zwar in jeder Hinsicht, persönlich, beruflich und auch wissenschaftlich. Wie das vergangene und das vorvergangene Jahr, und alle Jahre davor, wird auch das kommende helle und dunkle Seiten haben; es gilt, auf beides vorbereitet zu sein. Die Wissenschaft – zumal unsere Wissenschaft – wird neue Ergebnisse erzielen, denn wir arbeiten hart und da bleiben uns die Früchte unserer Arbeit nicht versagt. Was wir noch nicht wissen können ist, ob die Erfolge lediglich weitere kleine Mosaiksteinchen in einem sich entwickelnden Gesamtbild sind oder ob sie etwa bahnbrechend eine neue Epoche einleiten. Damit Letzteres eintritt, braucht es freilich noch eine gute Portion Glück. Dieses ist nicht planbar, wenn es aber eintrifft, handelt es sich um das verdiente Glück des darauf Vorbereiteten und entsprechend Tätigen. Üben wir uns in Bescheidenheit.

Auf der anderen, der dunklen Seite können wir mit großer Sicherheit annehmen, daß der Spardruck an den Universitäten und sonstigen wissenschaftlichen Einrichtungen nicht nachlassen wird. Es wäre allerdings nicht ratsam, in einer Art Angststarre zu verharren und auf leichtere Zeiten zu hoffen. Diese werden so schnell nicht kommen. Ich nehme daher meinen Aufruf vom vergangenen Jahr wieder auf und ersuche, nein, beschwöre Sie, die Kristallographie aktiv in das Universitätsleben, in den Kanon der Vorlesungen und in die Forschungsaktivitäten einzubringen. Die Kristallographie ist ein wichtiges Querschnittsfach der Naturwissenschaften. Ohne ihre Beiträge hätten es Fächer wie z.B. die Strukturbiologie oder die Materialwissenschaften schwer, zu grundlegenden Aussagen zu kommen, wenn das denn überhaupt möglich wäre. Sollten Sie bei Ihren diesbezüglichen Aktivitäten Unterstützung oder Hilfe brauchen, kann ich Ihnen beides seitens des Vorstands zusagen.

Die nächste Jahrestagung der DGK wird gemeinsam mit der DGKK und den österreichischen Kollegen, vertreten durch das Nationalkomitee für Kristallographie der Österreichischen Akademie der Wissenschaften, veranstaltet. Sie findet vom 28. Februar bis 04. März 2005 in Köln statt. Informationen dazu finden Sie auf der Homepage der DGK. Die Organisatoren haben in dankenswerter Weise die andauernden Diskussionen über eine mögliche inhaltliche Umgestaltung unserer Jahrestagungen aufgegriffen und arbeitskreisübergreifende Themenschwerpunkte für die Gestaltung vom Mikrosymposien definiert. Es wird spannend sein zu sehen, wie diese Neuerung bei den Teilnehmern der Tagung ankommen wird. Im Namen des Vorstands der DGK lade ich Sie zur Teilnahme an der Veranstaltung und besonders auch zur für Dienstag, den 01. März 2005 um 18h30, vorgesehenen Mitgliederversammlung der DGK ein. Bitte kommen Sie und unterstützen dadurch Ihre Gesellschaft.

Noch ein Wort in eigener Sache. Der neue Webmaster unserer Homepage heißt Dr. Silke Rönnebeck. Sie übt diese Tätigkeit neben ihrer normalen Arbeit im Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften in Kiel aus. Naturgemäß hat sie am IPN nur eingeschränkt Zugang zu Informationen aus der kristallographischen Welt. Sie ist deshalb auf Ihre Mithilfe angewiesen. Bitte schicken Sie Frau Rönnebeck alle Informationen, von denen Sie glauben, daß sie auf der Homepage stehen sollten. Der einfachste Weg dazu ist per Email: roennebeck@ipn.uni-kiel.de .

Mit besten Grüßen

Ihr

W. Depmeier

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
Vorwort des Vorsitzenden der DGK	3
Randbemerkungen zu AsCA'04	5
Kristallographie in Kuba	9
Präsentation von anorganische Strukturdaten	10
Berichte aus den Arbeitskreisen	13
Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen	14
NMR-Spektroskopie	20
Mineralogische und Technische Kristallographie	22
Kristallchemie	25
Ankündigungen	27
Personalia	43
Peter Paufler 65: Erinnerungen und Eindrücke eines Zeitgenossen	46
Festkolloquium zum 60. Geburtstag von Prof. Wulf Depmeier	49
Gerhard Becherer	51
Hans-Joachim Bunge	53
Tagungen & Termine	54
Homepage	57
Aufnahmeformular	58

RANDBEMERKUNGEN ZU ASCA'04

Falls Sie nicht wissen, was AsCA'04 ist: AsCA ist die Asian Crystallographic Association, neben der Amerikanischen und Europäischen die dritte kontinentale Unterorganisation der IUCr, die nicht nur die Interessen der asiatischen sondern auch die der im Australisch-Pazifischen Raum angesiedelten Kristallographen vertritt. Sie wurde 1987 am Rande des IUCr-Kongresses in Perth gegründet, hat seitdem regelmäßig internationale Tagungen abgehalten, wobei AsCA'04 die sechste in Serie war, die vom 27.-30. Juni in Hongkong an der HKUST (Hong Kong University of Science and Technology) stattfand.

Auf Einladung des Chairmans der Sitzung über „Structural Chemistry“, Prof. Uekusa (Japan), zu einem Vortrag, habe ich an AsCA'04 teilgenommen und war beeindruckt, nicht nur von der Tagung selbst, sondern auch von vielen Beobachtungen am Rande, so dass ich einigermaßen nachdenklich wieder nach Hause geflogen bin.

Das wissenschaftliche Programm für etwa 320 Teilnehmer umfasste 5 Plenarvorträge, 70 Vorträge in 15 Mikrosymposien und mehr als 200 Poster. Bei einer sonst breiten Themenvielfalt waren doch zwei Schwerpunkte erkennbar, die im weitesten Sinne einmal den Materialwissenschaften und zum anderen der biologischen makromolekularen Strukturforschung zuzuordnen waren, was sich auch in den Themen der Plenarvorträge niederschlug. Zum ersteren Themenkomplex trugen J. Akimitsu (Japan) über die Supraleitung von Boriden und Carbiden und Shie-Ming Peng (Taiwan) über Eigenschaften von Verbindungen mit intermetallischen Mehrfachbindungen vor. Die makromolekulare Strukturforschung war mit Hauptvorträgen von T.P. Singh (Indien) über neue Signalproteine und I. Tanaka (Japan) über High-Throughput-Protein-Kristallographie im Zusammenhang mit dem japanischen Structural Genomics Projekt vertreten. Das Stichwort „High Throughput“ fällt angesichts der technischen Entwicklungen in unserem Fach immer häufiger. Es war in Hongkong noch einmal Gegenstand eines Hauptvortrages. Mike Hursthouse (England) sprach über ein entsprechendes breit angelegtes nationales britisches Projekt über kleine Moleküle.

Provokant schließlich der Titel des verbleibenden Plenarvortrags, bei dem einem altgedienten Kristallographen wie mir der Atem stockte: „Crystallography without crystals“ von Jianwei Miao et al. (USA/Japan). Ich hatte schon gehofft, alle langwierigen und meistens erfolglosen Bemühungen, brauchbare Kristalle zu züchten, vergessen zu können, um stattdessen endlich zu lernen, wie man ohne auskommt, dann war der Vortrag aber doch weitgehend Zukunftsmusik, trotzdem höchst spannend. Es ging um die immer greifbarere Vision, mit kohärenten Beugungsexperimenten, bei denen sich das Phasenproblem nicht mehr stellt, Stichwort „Freier Elektronenlaser“, an einzelnen biologischen Objekten Strukturinformationen direkt sichtbar zu machen.

Um Visionen, teils realisiert, teils mit guten Chancen auf dem Weg, ging es auch in einigen anderen Beiträgen. So wurde ein bereits existierender Kristallisationsroboter vorgestellt (gelegentlich braucht man doch noch Kristalle), der 200 000 Ansätze gleichzeitig bearbeiten kann. Da kein Nutzer mehr diese gigantische Menge überschauen kann, gibt es einen Videoroboter mit integrierter Bildverarbeitung, der meldet, dass im Ansatz „xyz“ etwas vorhanden ist, was ein Kristall sein könnte. Betätigt man die Return-Taste, kommt der nächste Roboter, angelt den vermeintlichen Kristall heraus, setzt ihn aufs Diffraktometer, und das Ganze geht vollautomatisch seinen weiteren Gang. Verschwiegen wurde, und auch durch eine explizite Nachfrage in der Diskussion nicht beantwortet, wie groß die Erfolgsrate ist. Selbst wenn sie nur im Prozent- oder Promillebereich liegt, müssen Datensätze im „High-Throughput“ Modus vermessen werden. Auch hierfür wurden Visionen vorgetragen. S. Wakatsuki von der Photon Factory (Japan) berichtete über die Entwicklung eines neuen superdynamischen und super-

schnellen Detektors in Zusammenarbeit mit einer japanischen Fernsehanstalt! (Können Sie sich vorstellen, dass einer von uns mit SAT1 oder RTL gemeinsame Forschung macht?). Zwar gibt es diesen Wunderdetektor noch nicht, wohl aber wurde eine Computeranimation gezeigt, die das Ziel vorgab: 17 Sekunden pro Datensatz, bis zu 100 Datensätze pro Tag!

Nicht nur diese Spitzenprojekte beeindruckten. In der Posterschau fielen mir mehrere Beiträge junger Doktorandinnen einer kleinen thailändischen Provinzuniversität (was nicht abwertend gemeint ist) auf, die Ergebnisse von supramolekularen und Order/Disorder-Strukturen zeigten. Natürlich waren die Messungen dazu mit modernem CCD-Diffraktometer gemacht worden, Equipment also auf neuestem Stand. Als Angehöriger einer Universitätslandschaft, die nur über Kürzungen redet, war ich sehr überrascht, auch über die Information, dass in Thailand gerade ein neues Synchrotron gebaut wird.

Die Summe der Eindrücke von der Wissenschaft auf dieser Tagung erlaubt eine Schlussfolgerung. Die großen wissenschaftlichen und technischen Entwicklungen werden in Zukunft nicht nur in USA oder Japan gemacht, wo man es ohnehin vermuten würde, sondern auch in China, Thailand und Ländern im asiatisch-pazifischen Raum, die einige von uns noch als Schwellen- oder sogar Entwicklungsländer bezeichnen. Solange in Deutschland eine kristallographische Professur nach der anderen gestrichen wird, werden wir wohl kaum mithalten können.

Eine perfekte Organisation rundete das Bild einer außergewöhnlichen Tagung ab. Angeführt von Ian Williams, dem lokalen Tagungsleiter, der omnipräsent für fast jeden Teilnehmer ein paar verbindliche Worte hatte, stand eine große Zahl junger Leute bereit, die an Freundlichkeit, Hilfsbereitschaft und Kompetenz nicht zu überbieten waren. In allen Vortragsräumen waren ständig zwei bis drei Mitarbeiter verfügbar, die jede sich auch nur andeutende technische Störung in Augenblicken aus der Welt schafften, auch wenn sie nur darin bestand, dass der Vortragende zu dumm war, das Mikro an- oder abzuschalten.

Auch ein paar weniger wissenschaftliche Beobachtungen am Rande waren es wert, registriert zu werden. Bemerkenswert war allein schon der Kongressort. Die HKUST ist eine junge Universität, sie wurde 1991 gegründet, hat zur Zeit ca. 7000 Studenten bei 410 Lehrpersonen. Entsprechend neu und gepflegt waren auch die Räumlichkeiten, keine Graffiti, dafür intaktes Mobiliar in den Hörsälen und saubere Fußböden.

Das Hauptgebäude wurde vom Hongkong-Jockey-Club gesponsert, der mit den beiden Pferderennbahnen in Hongkong großes Geld macht. Eine unübersehbare Aufschrift am Eingang weist auch stolz auf den Geldgeber hin. Können Sie sich vorstellen, dass, sagen wir, Bayern München ein Gebäude der LMU sponsert, oder gar Hertha BSC in Berlin für die Charité etwas Gutes tut, damit nicht eines ihrer Kliniken dem Rotstift der Politik zum Opfer fällt? Wohl kaum, eher kaufen die Herrschaften noch ein paar mehr mittelmäßige Kicker ein, die dann das viele Geld, das sie gekostet haben, nicht wert sind.

Die HKUST liegt weit außerhalb der Stadt. Trotzdem ist sie mit U-Bahn und Bus gut zu erreichen (nur nachts nicht. Wenn die Discos in Wan Chai schließen, hat man schlechte Karten, zu den Campus-Dorms zu kommen!). Apropos U-Bahn: In Berlin ist vor einiger Zeit ein Versuch kläglich gescheitert, das elektronische Ticket bei den öffentlichen Verkehrsmitteln einzuführen. Vollmundig als erstmalig in der Welt angekündigt, obwohl Hongkong es schon lange hatte. Was in Berlin nicht geht, funktioniert in Hongkong natürlich bestens. Man kann in der U-Bahn, die schnell, pünktlich und sauber ist, in allen Bussen, in der Schnellbahn zum neuen Airport und sogar auf der Star Ferry, die den Hafen überquert, die Octopus-Karte (so heißt das elektronische Ticket) bequem verwenden. Die Automaten, an denen das Ticket aufzuwerten ist, funktionieren sogar.

Noch eine Petitesse zum Abschluss. Selbst der Kugelschreiber in den Kongressunterlagen hatte Format. Im Vergleich zu den billigen Plastikdingern, die mir mein Dienstherr zumutet,

weil er meint, das billigste Schreibgerät ist für einen deutschen Universitätsprofessor gerade gut genug, war der Tagungskuli ein formschönes metallisch glänzendes Luxusprodukt, eben asiatisches Design mit Niveau.

Die Lateiner haben schon vor langer Zeit formuliert „ex oriente lux“. Frei übersetzt gilt wohl heute: Im Osten geht die Wissenschaftssonne auf, geht sie bei uns im alten Europa unter?

P. Luger (FU, Berlin)

KRISTALLOGRAPHIE IN KUBA

Kubanische Kristallographen haben mit der ‚Escuela Regional de Cristalografía‘, 01. bis 04.12.2004 an der Universidad de Habana einen weiteren Schritt aus der politisch determinierten Isolierung getan und erstmals einem internationalen Teilnehmerkreis aus dem lateinamerikanischen Raum mit dieser Schule einführende Übersichten zu methodischen Fragen (Schwerpunkte Pulverdiffraktometrie und Kristallsynthese) sowie zu aktuellen Themen der Materialforschung geboten, begleitet von Übungen im Computerlabor zur Rietveld-Methode. Sie wurden dabei von der IUCr finanziell unterstützt. Der Vorstand der DGK hatte seinerseits beschlossen, dem Veranstalter einen kompletten Satz der ‚International Tables for Crystallography‘ zu spendieren.

Die 13 Vorträge und Übungen wurden von folgenden Lektoren aus Europa gehalten: R. Carvajal, H. Fueß, J.M. Garcia, P. Paufler, H.-P. Weber. Bei deren Auswahl haben vermutlich auch bestehende Kooperationen mit der veranstaltenden Gruppe, insbesondere mit dem Vorsitzenden und dem Sekretär des lokalen Komitees, Dr. Ernesto Estevez Rams und Dipl.-Phys. Arbelio Penton Madrigal eine Rolle gespielt.

Träger der Schule vor Ort war das ‚Instituto de Materiales y Reactivos‘, das sich als Aninstitut der Universidad de la Habana angewandten Fragen der Kristallographie widmet und dessen Direktor für Wissenschaft, E. Estevez Rams, zugleich zum Lehrkörper des Instituts für Angewandte Physik der Universität gehört, aus dem auch A. Penton Madrigal kommt. Am Rande der Schule konnten sich die Teilnehmer nicht nur vom Fortschritt der von der UNESCO geförderten Restaurierung der Altstadt von Havanna überzeugen, es wurden auch die schwierigen materiellen Bedingungen deutlich, unter denen Lehre und Forschung realisiert werden müssen. Das betrifft sowohl den Mangel an Geräten für Praktika und Forschung (es befindet sich an Universität z. B. nur ein Pulverdiffraktometer des Typs HZG4 vom VEB Freiburger Präzisionsmechanik in Betrieb) als auch den erschwerten Zugriff zu Fachliteratur. Sollten aus dem Bereich von Lesern dieser Mitteilungen einschlägige Gerätespenden erwogen werden, wird Kontaktaufnahme mit Herrn Arbelio Penton (*arbelio_1999@yahoo.com*) (auch in deutscher Sprache möglich) empfohlen. Die Transportkosten könnten ggf. zu Lasten Dritter gehen.

P. Paufler, Dresden

WIE SOLLEN ANORGANISCHE STRUKTURDATEN PRÄSENTIERT WERDEN, DAMIT SIE FÜR WEITERE STUDIEN VON GRÖßEREM WERT SIND ?

Kurzfassung einer englischen Veröffentlichung von Sheng-Zhi Hu (Xiamen, China) und Erwin Parthé (Wien und Genf) in Chin. J. Struct. Chem. 23 (2004) 1150-1160.

Um die Problematik mit der Präsentation von Strukturdaten zu demonstrieren, werden als Beispiel hier drei unabhängige Strukturbestimmungen von KNaV_2O_5 erwähnt, die 1978, 1996 und 1999 veröffentlicht wurden. Die angegebenen monoklinen Einheitszellen sind zwar ähnlich, aber weder die Raumgruppe noch die Liste der Atomkoordinaten, so dass man annehmen könnte, dass es sich um drei verschiedene Modifikationen von KNaV_2O_5 handelt. Keiner der Autoren erwähnte die vorhergehenden Arbeiten und die Autoren erkannten auch nicht, dass sie alle die gleiche Strukturmodifikation bearbeiteten, die mit der von Diopsid $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ isotyp ist.

Was hätte anders gemacht werden sollen? Ein Symmetrietest hätte gezeigt, dass bei einem Datensatz die Raumgruppe nicht stimmte, da ein Symmetriezentrum übersehen wurde. Eine Standardisierung der korrigierten Datensätze mit **STRUCTURE TIDY** hatte drei praktisch identische Listen von Atomkoordinaten ergeben. Nur die standardisierten Daten hätten veröffentlicht werden sollen, die dann mit den standardisierten Daten von Diopsid übereinstimmen.

Um Daten von anorganischen Kristallstrukturen für weitere Studien nützlicher zu machen, wird folgende Prozedur zur Anwendung empfohlen:

1.) *Die Kristallstruktur soll mit der Raumgruppe beschrieben werden, die der wahren Symmetrie entspricht.*

Das von LePage entwickelte **MISSYM** Programm zur Auffindung fehlender Symmetrieelemente ist in Spek's **PLATON** Programmpaket eingebaut, das für akademische Anwendungen kostenlos vom Internet heruntergeladen werden kann:

(<http://www.cryst.chem.uu.nl/platon>).

2.) *Ein neuer Strukturvorschlag soll überprüft werden, ob er im Prinzip überhaupt möglich und sinnvoll ist.*

Hier gibt es kein allgemein anwendbares Programm, sondern nur viele kleine, logische Denkansätze. Zum Beispiel: Zwei Arten von Atomen, die nahezu zusammenfallen, sind ein Zeichen, dass die Atomkoordinaten falsch sind. Aussagen über die gegenseitige Anordnung von Atomen mit nahezu gleichem Streuvermögen sind immer von zweifelhaftem Wert. Im Falle von ionischen Verbindungen kann eine Berechnung der Bindungswertsummen mit Brown's **VALENCE** Programm helfen, zwischen verschiedenen Strukturvorschlägen eine Entscheidung zu treffen.

- 3.) *Die Aufstellung der Raumgruppe muss mit einer Aufstellung übereinstimmen, die in den "International Tables for Crystallography" aufgeführt ist.*

Eine arbiträre Einheitszelle sowie Strukturaufstellung, die vom automatische Diffraktometer durch Zufall vorgeschlagen wird, ist für einen Vergleich von zwei unabhängigen Bestimmungen der gleichen Struktur ungeeignet.

- 4.) *Für den Vergleich mit anderen Strukturdaten sollen neue Daten mit STRUCTURE TIDY standardisiert werden.*

Selbst wenn eine Aufstellung wie in den Internationalen Tabellen ausgewählt worden ist, kann eine Struktur immer noch auf verschiedenste Art beschrieben werden. Abhängig von der Raumgruppe kann es verschiedene erlaubte Zellursprünge, verschiedene erlaubte Drehungen oder eine Spiegelung des Koordinatensystems geben. Weiter existieren mehrere Möglichkeiten für die Wahl der numerischen Werte der symmetrieäquivalenten Atomkoordinaten eines Atoms. Das Programm **STRUCTURE TIDY** erlaubt es, die Strukturdaten zu standardisieren. Das Programm kann für akademische Anwendungen kostenlos erhalten werden (<http://www.iucr.ac.uk/sincris-top/logiciel/s-z.html>).

- 5.) *"Neue" Strukturen sollen sorgfältig überprüft werden, ob sie wirklich neu sind.*

Einige Autoren bestimmen Kristallstrukturen, ohne sich vorher zu vergewissern, dass die Struktur nicht schon bekannt ist. Sie riskieren Arbeit und Geld für ein Projekt zu verschwenden, das keine neuen Erkenntnisse erbringt. Es ist die Aufgabe des Autors, die relevante Literatur auch nach einer erfolgreichen Strukturbestimmung sorgfältig zu studieren und die Ergebnisse der Literatursuche in der Veröffentlichung zu zitieren. Es ist die Pflicht des Autors - und nicht des Gutachters - den Strukturtyp einer neuen Struktur zu bestimmen und auch im Text anzugeben. Es ist bedauerlich, dass einige Autoren vermutlich bewusst frühere Arbeiten nicht zitieren - im irrigen Glauben, dass dadurch die Wichtigkeit ihrer Arbeit an Wert gewinnt.

Eine Kopie der Originalarbeit kann als PDF-Dokument erhalten werden. Ansuchen sind zu richten an erwin.parthé@chiam.unige.ch. Zum Lesen des PDF-Dokuments ist es notwendig, das kostenlose "Simplified Chinese Font Pack" von der Adobe-Homepage herunterzuladen.

Erwin Parthé

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN:

DIE XXIV. (11.) TAGUNG DES ARBEITSKREISES NICHTKRISTALLINE UND PARTIELLKRISTALLINE STRUKTUREN

Seine XXIV. (11.) Arbeitstagung führte der Arbeitskreis *Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen* vom 08. bis 11. September 2003 wiederum im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf, im schönen und ruhigen Thüringer Holzland gelegen, durch.

Das Hauptthema der diesjährigen Arbeitskreistagung leitet sich aus der langfristigen Zielstellung des Arbeitskreises ab, Beiträge zu erbringen, um *Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien* zu charakterisieren und verstehen zu wollen:

Relaxations- und Alterungsprozesse auf unterschiedlichen Zeitskalen in nichtkristallinen Materialien

An der Arbeitskreistagung nahmen insgesamt fünfunddreißig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten teil. Es wurden achtundzwanzig Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit - auch zu anschließenden, teilweise sehr heftigen Diskussionen - zur Verfügung stand, was mit großem Gewinn rege angenommen und realisiert wurde. Die ausführlichen und fundierten Diskussionen profitierten aus dem breit gefächerten Spektrum der durch die Teilnehmer vertretenen Fachgebiete, d.h., ein großer Vorteil des Arbeitskreises besteht in seiner hohen Interdisziplinarität. Es muss insbesondere hervorgehoben werden, dass durch das übergreifende Thema *Relaxationsprozesse* Vortragende aus verschiedenen Wissenschaftsbereichen zusammengekommen sind, deren Sphären sich sonst nicht berühren. Der strukturelle Aspekt stellt jedoch die Gemeinsamkeit her, d.h., insbesondere wurde auf unserer Arbeitskreistagung - ihrem wissenschaftlichem Zweck entsprechend - der Strukturaspekt, welcher den Relaxations- und Alterungsprozessen zugrunde liegt, herausgestellt, der sowohl explizit aber auch implizit alle Beiträge dieser Tagung durchzog. Der gewünschte Synergieeffekt bezüglich des Anliegens, die Problematik nichtkristalliner Strukturen weitestgehend zu beleuchten und zu befördern, wurde somit offensichtlich. Dieser Synergieeffekt ist schon allein durch das breite Disziplinenpektrum der Vorträge, welches sich zwischen Entwicklungsgeologie über klassische Thermodynamik bis zur molekulardynamischen Modellierung bewegte, gegeben. So überstreichen doch die in den Beiträgen behandelten Relaxations- bzw. Ausgleichszeiten Zeitskalen von Megajahren bis zu Femtosekunden. Ebenso ist hervorzuheben, dass quasi über alle Stoffsysteme nichtkristalliner Materialien vorgetragen wurde.

Im einzelnen lassen sich die Vorträge in folgende Teilkomplexe unterteilen:

- Relaxationsprozesse als Selbststrukturierungsprozesse im Nah- und Intermediär-Strukturbereich,
- Relaxationen und dynamische Prozesse in glasbildenden Flüssigkeiten, Schmelzen und in oxidischen, kovalenten und metallenen Gläsern,
- Modellierungen von Relaxationsprozessen auf verschiedenen Zeitskalen und in unterschiedlichen Strukturen,
- Thermodynamische und strukturelle Untersuchungen zum Glasübergang und zur Keimbildung sowie Kristallisation,
- Relaxations- und Alterungsprozesse in Solen und Gelen.

Als eine wesentliche Bilanz der Arbeitskreistagung ergab sich, dass die Verbindung von dynamischen und strukturellen Untersuchungen und Modellierungen an nichtkristallinen Materialien - bisher meist voneinander getrennt durchgeführt - zu neuen Einsichten in die komplexe Problematik der Selbststrukturierung nichtkristalliner Materialien führt. Organisatorisch bedeutet dies, die verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen, die sich mit diesen Themen beschäftigen, mehr zusammenzubringen. Deshalb wurde beschlossen, die XXV. Arbeitskreistagung zum Thema

Strukturen und Strukturbildungsprozesse im intermediären Strukturbereich nichtkristalliner Materialien

durchzuführen. Sie wird vom 27. bis 29. September 2004 - traditionell im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf - stattfinden.

Der Sammelband der Vortragszusammenfassungen ist beim Sprecher des Arbeitskreises zu einem Selbstkostenbeitrag von 5,- Euro erhältlich bzw. Einzelbeiträge als pdf-File.

Sprecher des AK Nichtkristalline und Partiekristalline Strukturen:
Bernd Müller, Jena

Anmerkung der Redaktion:

Der Bericht von Bernd Müller sollte eigentlich im Heft 27 (Januar 2004) erscheinen, ist aber aus nicht nachvollziehbaren Gründen vergessen worden. Die Redaktion bittet den Autor um Nachsicht!

DIE XXV. (12.) TAGUNG DES ARBEITSKREISES NICHTKRISTALLINE UND PARTIELLKRISTALLINE STRUKTUREN

Seine XXV. (12.) Arbeitstagung führte der Arbeitskreis *Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen* vom 27. bis 29. September 2004 wiederum im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf, im schönen und ruhigen Thüringer Holzland gelegen, durch.

Das Hauptthema der diesjährigen Arbeitskreistagung leitet sich aus der langfristigen Zielstellung des Arbeitskreises ab, Beiträge zu erbringen, um *Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien* zu charakterisieren und verstehen zu wollen:

Strukturen und räumliche sowie zeitliche Strukturbildungsprozesse im intermediären Strukturbereich nichtkristalliner Materialien

An der Arbeitskreistagung nahmen insgesamt siebenundzwanzig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten teil. Es wurden zwanzig Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit - auch zu anschließenden, teilweise sehr heftigen Diskussionen - zur Verfügung stand, was mit großem Gewinn rege angenommen und realisiert wurde.

Es wurde dem Umstand Rechnung getragen, dass der Arbeitskreis Nichtkristalline und PartIELlkristalline Strukturen zum 25. Male zu einer Arbeitskreistagung zusammenkommt, um Wissenschaftlern und Technologen, die sich mit nichtkristallinen Materialien beschäftigen, Gelegenheit zu geben, zu diesem Gegenstand vorzutragen, sich auszutauschen und Kontakte zu knüpfen. Diese fünfundzwanzig Arbeitskreistagungen umspannen einen Zeitraum von fast dreißig Jahren, also auch ungefähr denjenigen eines aktiven Wissenschaftlerlebens. In einer diesem zu würdigenden Anlass gemäßen Retrospektive kann bemerkt werden, dass in dieser Zeit

- sich die Themenkomplexe kaum geändert haben, wohl aber die Inhalte und die Wichtungen derselben: Nach wie vor warten die meisten Probleme der Theorie und der Beschreibung, der Generierung sowohl konkreter Materialien als auch notwendiger und spezifischer Modelle sowie der Analyse der dynamischen und statischen Strukturen nichtkristalliner Materialien noch einer allgemeinen und fundierten Lösung,
- aber andererseits nichtkristalline Materialien aufgrund ihrer besonderen Materialeigenschaften zunehmendes Gewicht in zahlreichen, sehr unterschiedlichen Gebieten, die von grundlegenden wissenschaftlichen Forschungen bis zu vielfältigen innovativen Anwendungen reichen, erlangt haben, wobei die sich vollzogenen technologischen Entwicklungen von metallenen Gläsern, von Sol-Gel-Gläsern sowie von glasigen Oxiden besonders hervorgehoben werden sollen,
- Rechner und Rechenmitteln sowie Strahlungsquellen mit nicht erahnten Qualitäten und Quantitäten bereitgestellt wurden und somit sich ganz neue experimentelle und theoretische Möglichkeiten eröffnen,
- aber trotz erheblicher wissenschaftlicher Fortschritte die wesentlichen Probleme der Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien - bis auf Einzelfälle - weitgehend ungeklärt sind: Dies betrifft insbesondere die gegenseitige Abhängigkeit von Nahbereichstruktur und intermediärer Struktur sowie die experimentelle und theoretische Erfor-

schung der intermediären Struktur selbst, welche wohl grundlegend die Existenz der nichtkristallinen Materialien bedingt.

Beispiele für hochaktuelle wissenschaftliche Fragestellungen auf dem Gebiete nichtkristalliner Materialien sind: Phänomene in der Nähe des Glasübergangs, Biokompatibilität amorpher Stoffe, Magnetismus nanostrukturierter metallischer Gläser, Optoelektronik mit nichtkristallinen Materialien, amorphe Diffusionsbarrieren für mikroelektronische Schaltkreise, Vorordnungen und Polyamorphismen in amorphen Ausgangsstoffen zu gezielten Kristallisationen nano- und monokristalliner Materialien usw. Die effiziente Produktion und Herstellung innovativer nichtkristalliner Materialien erfordert in immer höherem Maße fundierte Kenntnisse zum Zusammenhang von Herstellungsbedingungen - Struktur - Eigenschaften. Es muss dabei hervorgehoben werden, dass diese Strukturen und die jeweiligen Strukturbildungsprozesse ein universelles Problem darstellen.

Es gehörte und gehört zu den grundlegenden Zielen und Aufgaben des Arbeitskreises, diese Strukturbildungsprozesse und ihre Strukturen, aber auch die notwendigen experimentellen Ausrüstungen, Methoden und Algorithmen in den Mittelpunkt der Vorträge und Diskussionen zu stellen, um auf diesem Gebiete der Strukturwissenschaft und -forschung substantielle Fortschritte zu erlangen, weil Erkenntnisse darüber neben dem grundsätzlichen wissenschaftlichen Fortschritt die Möglichkeit der gezielten Entwicklung nichtkristalliner, kristalliner sowie nanostrukturierter Materialien sehr unterschiedlicher Anwendungsbereiche eröffnen - also sowohl Theoretiker als auch Praktiker zusammenzuführen.

Insbesondere nahm und nimmt sich der Arbeitskreis in seinen Schwerpunktsetzungen solcher spezifischen Themen an, die dazu beitragen, die aufzuklärenden Strukturen und Strukturbildungsprozesse auf unterschiedlichen Längenskalen sowohl statisch als auch dynamisch zu studieren, d.h., es werden sowohl Einflüsse von chemischen Bindungen bzw. Elektronendichteverteilungen im Nahbereich und Fluktuationen von Dichtekorrelationsfunktionen der atomaren Bausteine als auch insbesondere Strukturbildungen im intermediären Bereich in Abhängigkeit unterschiedlicher Größen untersucht, um z.B. Aussagen über den strukturellen Glasübergang und zu den jeweiligen Strukturen und Strukturbildungen der Relaxationen und Alterungen von Materialien, der Entmischungsvorgänge und -bereiche mit Ausbildung von Grenzflächen, der Vorordnungsprozesse, der Keimbildung und der Kristallisation u.ä. treffen zu können.

Dabei wurde und wird stets darauf geachtet, dass die zur Verfügung stehenden modernen Methoden der Strukturaufklärung und -modellierung, der Kinetik und Thermodynamik unter Beachtung der atomistischen und dynamischen Aspekte in Verbindung gebracht werden mit den Strukturen des Nah- sowie des intermediären Strukturbereichs.

Vor allem soll im Arbeitskreis - als wesentliches strukturelles Problem nichtkristalliner Materialien - die Problematik der intermediäre Struktur, die sich in einem Korrelationslängenbereich bis etwa 5 nm als kooperatives Phänomen ausbildet, untersucht, diskutiert und zu ihrer Lösung beigetragen werden. Besondere Bedeutung kommt dabei der Frage zu, wie diese intermediäre Struktur selbst, ihre topologische und geometrische Basis, ihr Zusammenhang mit der Struktur im Nahbereich wesentliche Eigenschaften nichtkristalliner Materialien beeinflusst und welche Relationen dabei zu den strukturellen Prozessen von Vorordnungen, Keimbildungen, Nanoentmischungen, Nanokristallisation und strukturellem Glasübergang bestehen.

Dieses Konzept wurde im Arbeitskreis in den letzten fünfzehn Jahren konsequent verfolgt, so dass bis heute ein reges Interesse vieler Wissenschaftler und Technologen besteht, aktiv an den Tagungen teilzunehmen, wodurch seine notwendige hohe Interdisziplinarität gewahrt wird. Auch das diesjährige Vortragsprogramm weist in seinen zwanzig Beiträgen das Grund-

anliegen des Arbeitskreises zur Auf- und Erklärung nichtkristalliner Strukturen aus: Probleme und Resultate ihrer Simulation und Generierungen sowie ihrer Stabilität, zu Überlegungen über ihre geometrischen und topologischen Grundlagen, zu Fragen und Ergebnissen ihrer Strukturanalyse und -Beschreibung an unterschiedlichen Materialien, zu den vielfältigen Einflüssen auf die Keimbildung und Kristallisation usw.

Die Themen der gehaltenen Vorträge - in der Vortragsreihenfolge - bezeugen die Aktualität des Arbeitskreises:

- K. Binder; Mainz: Struktur und Dynamik silicatischer Materialien aus Molekuldynamik-Simulationen: Status und Perspektiven
- Hannemann, J., C. Schön, M. Jansen; Stuttgart: Aspects of the dynamical properties of amorphous $\text{Si}_3\text{B}_3\text{N}_7$
- D. Holland-Moritz; Köln: Modellierung von Strukturbildungsprozessen in Schmelzen
- H. König; Mainz: Local analysis of microstructures and heterogeneous dynamics in a two-dimensional binary colloidal model glass former: Concept of local density-optimized crystallite clusters
- H. Hermann; Dresden: Modellierungen von Strukturbildungsprozessen unter Beachtung des intermediären Bereiches
- Müller; Jena: Der intermediäre Strukturbereich: Strukturbeschreibung und -analyse
- N. Mattern; Dresden: Analyse von Strukturbildungsprozessen in massiven metallischen Gläsern mittels Beugungsmethoden
- W. Hoyer, I. Kaban, P. Jónvári; Chemnitz: Short and medium-range order in $\text{Ge}_{15}\text{Te}_{85}$ melts in dependence on temperature
- U. Hoppe, R. K. Brow, D. Ilieva; Rostock: Struktur von Phosphatgläsern modifiziert mit Seltenerdoxid
- Herbst; Bad Köstritz: Köstrosorb - ein Silicagel mit vielen Gesichtern
- H. Roggendorf, D. Böschel, H. Wolter, J. Trempler; Halle: Charakterisierung von Strukturbildungsprozessen in Wassergläsern
- Unger, H. Jancke, B. Müller, R. Müller, W. Unger, S. Reinsch, M. Nofz; Berlin: Strukturbildungsprozesse in Solen und Gelen
- M. Nofz, B. Unger, J. Pauli, Ch. Jäger, M. Dreßler, R. Sojref, S. Reinsch, D. Schultze, I. Dörfel, G. Scholz; Berlin: Struktur und thermische Eigenschaften von Alumosolen und -xerogelen
- Hohl, H. Fueß, Th. Wieder; Darmstadt: Ramanspektroskopie an Siliciummonoxid zur Untersuchung von Kristallitgrößen und Dynamik
- N. Boucharat, G. Wilde; Karlsruhe: Nanocrystallization of Al-based glassy alloys
- H. Rüscher; Hannover: Temperaturabhängige Infrarot-Experimente zur Bildung kristalliner und nichtkristalliner Festkörper
- R. Keding; Jena: Keimbildung in glasbildenden Schmelzen - ein strukturell dominierter Ansatz
- J. Erdsack, A. Kriltz; Jena: Kristallisation in Kaliumtitanylphosphat-abgeleiteten Gläsern
- F. Kargl, A. Meyer; München: Pikosekunden-Dynamik in schnellen ionenleitenden Natriumboratschmelzen
- H. Eckert; Münster: Network former connectivity and spatial distribution of network modifiers in oxide glasses: New results from solid state NMR

So bleibt dem Arbeitskreis für die nächsten fünfundzwanzig Arbeitskreistagungen zu wünschen, dass viele der heute noch bestehenden Probleme gelöst werden können, dass aber auch neue Fragen und Probleme zu den Strukturen nichtkristalliner Materialien aufgeworfen wer-

den, so dass ein breites interdisziplinäres Interesse erhalten bleibt und der Arbeitskreis sein Weiterbestehen damit rechtfertigen kann.

Um auch weiterhin Interesse zu finden, wurde deshalb beschlossen, die XXVI. Arbeitskreis-tagung zum Thema

**Strukturen und Strukturbildungsprozesse im intermediären Strukturbereich
nichtkristalliner Materialien**

durchzuführen. Sie wird vom 19. bis 21. September 2005 - traditionell im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf - stattfinden.

Der Sammelband der Vortragszusammenfassungen ist beim Sprecher des Arbeitskreises zu einem Selbstkostenbeitrag von 5,- Euro erhältlich bzw. Einzelbeiträge als pdf-File.

Sprecher des AK Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen:
Bernd Müller, Jena

ANWENDUNGSMÖGLICHKEITEN DER NMR-SPEKTROSKOPIE INNERHALB DER TECHNISCHEN MINERALOGIE UND DEN MATERIALWISSENSCHAFTEN

vom 01. bis 02. April 2004 an der Ruhruniversität Bochum

Der 13. Workshop des Arbeitskreises NMR-Spektroskopie, welcher die Thematik „Anwendungsmöglichkeiten der NMR-Spektroskopie innerhalb der technischen Mineralogie und den Materialwissenschaften“ zum Inhalt hatte, fand vom 01.-02. April 2004 am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhruniversität in Bochum statt. Der Workshop wurde ein weiteres Mal von Michael Fechtelkord (Ruhruniversität Bochum) organisiert und kompetent geleitet. Als Gastdozent trat Günter Beuchle vom Forschungszentrum Karlsruhe (ITC/WGT) auf. Die Teilnehmer der Veranstaltung stammten aus Darmstadt, Leipzig und Bochum. Die Vormittage der beiden Workshoptage wurden für die theoretische Einführung in die Grundlagen der NMR-Spektroskopie, spezielle Messtechniken und spezifische Themen der Technischen Mineralogie und Materialwissenschaften genutzt. Michael Fechtelkord gelang es die notwendige Theorie auch dem Laien fachkundig und vor allem sehr gut verständlich zu erläutern. Den Teilnehmern wurden dabei gut aufbereitete Skripte zur Verfügung gestellt. Am Nachmittag fanden die Messungen am Festkörper NMR-Spektrometer statt. Es wurde allen Teilnehmern die Möglichkeit geboten die Probenpräparation sowie die Bedienung des NMR-Spektrometers (BRUKER ASX 400) unter Anleitung des Betreuers durchzuführen. Somit konnte man sich erstmals einen Eindruck über den praktischen Ablauf einer NMR-Messung verschaffen, was sich wiederum sehr fördernd auf das Verständnis der NMR Theorie auswirkte. Die Auswertung der Daten erfolgte rechnergestützt, in Zweiergruppen. Dadurch wurde es jedem Teilnehmer ermöglicht auch in dieser Hinsicht eigene Erfahrungen sammeln zu können.

Der erste Tag des Workshops begann mit einer Einführung in die wichtigsten NMR-Grundlagen und deren Anwendungsmöglichkeiten in den Materialwissenschaften. Dabei wurde im Besonderen auf die Untersuchungsmöglichkeiten von Lithiummanganat mittels NMR-Spektroskopie eingegangen. LiMn_2O_4 findet in Akkumulatorbatterien Verwendung. Es wurden temperaturabhängig ^6Li - und ^7Li -NMR-Spektren dieses Materials aufgenommen. Nachmittags wurde die Auswertung der Messungen mit Hilfe des Programms DMFIT2003 über Spektrenanpassung durchgeführt. Die chemische Verschiebung, die Halbwertsbreiten und die Integralintensitäten der Signalanteile wurden temperaturabhängig ermittelt. Die temperaturabhängige Darstellung der ermittelten Werte erfolgte mittels EXCEL. Im Anschluss an den Workshop ließen die Teilnehmer den Tag in einer geselligen Runde im „Summa Cumma Laude“ ausklingen. Dies bot den geeigneten Rahmen zum gegenseitigen näheren Kennenlernen.

Der zweite Tag begann mit einer Einführung die theoretischen Grundlagen der ^{29}Si - und ^{27}Al -NMR-Spektroskopie ($\text{Q}^n/\text{Q}^n(\text{xAl})$ -Nomenklatur etc.) sowie deren Anwendungspotential bei der Untersuchung amorpher/kristalliner technischer Materialien wie z.B. von Gläsern und Keramiken.

Anschließend wurde durch Günter Beuchle (Forschungszentrum Karlsruhe-ITC/WGT) eine sachkundige Einführung in die Chemie und Struktur der Calcium-Silikat-Hydrat-Phasen

(CSH-Phasen) gegeben. Diese Verbindungen entstehen bei der Reaktion von Calciumsilikatzementen (Calciumsilikatphasen) mit Wasser und sind hauptverantwortlich für die Erhärtung des Betons. Aus diesem Grund sind ihre Untersuchung, das Verständnis ihrer Bildungsmechanismen und ihre Stabilität von enormem wissenschaftlichem und ökonomischem Interesse. Nachmittags wurden „Cross-Polarisations(CP)-MAS-NMR-Messungen an xonolithhaltigen Materialien durchgeführt. Die Auswertung wurde erneut mit Hilfe des Programms DMFIT2003 durchgeführt. Durch Spektrenanpassung erfolgte die Bestimmung der chemischen Verschiebung, der Halbwertsbreite und der Integralintensitäten der Resonanzsignale. Aus der Chemischen Verschiebung der ^{29}Si -Signale wurde der Verknüpfungsgrad der $[\text{SiO}_4]^{4-}$ -Tetraeder im Xonolit ($\text{Ca}_6[(\text{OH})_2/\text{Si}_6\text{O}_{17}]$) ermittelt. Des Weiteren wurde aus dem Verhältnis der Integralintensitäten der verschiedenen Qⁿ-Gruppen die mittlere Länge der $[\text{SiO}_4]$ -Ketten im Xonolit bestimmt. Die gleichen Parameter wurden an ^{29}Si -Spektren von Gyrolit ($\text{Ca}_4\text{Si}_6\text{O}_{15} \times 4\text{H}_2\text{O}$) bestimmt.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass durch die regelmäßig vom Arbeitskreis NMR-Spektroskopie der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. durchgeführten Kurse und Workshops interessierten Studenten, Doktoranden und Wissenschaftlern eine hervorragende Möglichkeit geboten wird, sich in der komplexen Thematik der Festkörper-NMR und deren Anwendungsmöglichkeiten in den Material- und Geowissenschaften weiterzubilden. Der Workshop bot Anfängern einen interessanten Einblick in die vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten der NMR-Spektroskopie in den Materialwissenschaften. Fortgeschrittene konnten das erlernte Wissen mit Erfolg auf ihre eigenen Projekte anwenden. An dieser Stelle soll insbesondere Michael Fechtelkord gedankt werden, der Kurse und Workshops organisiert, stets fachkundig leitet und für ein angenehmes Kursklima sorgt. Die gemeinsamen Aktivitäten im Anschluss an den Workshop boten die Gelegenheit zum gegenseitigen Kennenlernen. In einigen Fällen wurden dadurch Kooperationen zwischen verschiedenen Teilnehmern ermöglicht.

Jan Dudeck, Leipzig

AKTIVITÄTEN DES AK MINERALOGISCHE UND TECHNISCHE KRISTALLOGRAPHIE IM JAHRE 2004

Im letzten Jahr wurde, wie angekündigt, nur eine Veranstaltung im Oktober durchgeführt, bei der insgesamt rund 35 Fachleute zusammentrafen:

4. Diskussions- und Arbeitstagung Mineralogische und Technische Kristallographie

Am 12. und 13. Oktober 2004 veranstaltete der Arbeitskreis Mineralogische und Technische Mineralogie der DGK im neuen geowissenschaftlichen Institut in Halle/Saale seine 4. Diskussions- und Arbeitstagung. Das übergeordnete Thema der Veranstaltung waren Synthese, Eigenschaften und technische Bedeutung von wasserhaltigen Phasen in zementären Systemen.

Unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. H. Pentinghaus und Herrn Prof. Dr. H. Pöllmann wurde unter anderem intensiv über den Stofftransport von Gips aus dem Bausubstanz-Puffer hinsichtlich technischer und rohstoffspezifischer Daten diskutiert. Dabei stellte Herr Prof. Dr. H. Pentinghaus in einer zeitlichen Prognose die Nachfrage an Gips in der Baustoffindustrie dem Rohstoffangebot gegenüber. Er verwies am Beispiel des Chromataustrags durch Gipswässer im Bauschutt auf die Unverträglichkeit einer gemeinsamen Deponie von Altgips und Bauschutt hin und unterstrich eindringlich die Problematik der zu erwartenden Mengen an sulfathaltigem Bauschutt.

Prof. Dr. H. Pöllmann charakterisierte in seinem Vortrag unterschiedliche Puzzolane in Bezug auf eine technische Verwendung in Zementsystemen. Aufgrund der großen Vielfalt natürlicher und künstlicher Puzzolane und deren großen vorrätigen Volumina sind sie ein besonders kostengünstiger Rohstoff. Zwei Schwerpunkte des Vortrages waren die unterschiedlichen, nach Bedarf angepassten, Optimierungsmöglichkeiten der Puzzolane sowie deren Umweltverträglichkeit in Bezug auf den CO₂-Ausstoß.

Die Synthese und Kristallchemie von Calciumaluminaten und alciualuminatferratsilikaten in manganführenden Tonerdezementen wurde von Dr. S. Stöber vorgestellt. Der Vortragende beschrieb neben den Synthesemethoden (Sol-Gel-Synthese) erste Ergebnisse bei der Charakterisierung des Phasenbestandes und der Gitterkonstantenverfeinerung im System:



Zwei Vorträge (U. König und T. Kühn) beschäftigten sich mit der Synthese von Metall-Metall-Hydroxisalzen vom Hydrotalcit-Typ und deren Optimierung als Precursor-Phase mit in die lamellare Struktur eingebauten organischen Anionen. Vor- und Nachteile verschiedener Synthesemethoden wurden in Abhängigkeit von den Synthesebedingungen (Temperatur-Zeit-pH etc.) und den ausgetauschten organischen Anionen vorgestellt und diskutiert. Erste Untersuchungsergebnisse der Hydratstufen der synthetisierten Schichtstrukturen konnten präsentiert werden.

M. Fylak berichtete über die Verwendung von Hochgeschwindigkeitsdiffraktometrie und Kryo-Transfer-Rasterelektronenmikroskopie zur Untersuchung des Hydratationsbeginns bzw. -verlaufs in zementären Systemen. Anhand von Pulverdiffraktogrammen, unterstützt von hochauflösenden Kryo-REM Aufnahmen bzw. -analysen, zeigte er die zeitliche Entwicklung des Mineralbestandes (AFm- und AFt-Phasen) ausgewählter zementärer Systeme.

Die Analyse von Klinkerphasen durch Mikroskopie und Kathodolumineszenz wurde von N. Winkler vorgestellt. Mikroskopische (Point-Counting) und KL-Untersuchungen an Klinkern liefern eine gute Möglichkeit verschiedene Phasen, wie Alit, Belit oder Einbettungsmedium, zu unterscheiden, sind aber limitiert bei der genaueren Differenzierung von Aluminaten und Ferraten. Im Vortrag wurde die Quantifizierung der einzelnen Komponenten im Vergleich mit Ergebnissen der Rietveld-Analyse vorgestellt und diskutiert.

Ein weiterer Beitrag präsentierte Ergebnisse zum Hydratationsverhalten von Mn-haltigen Brownmilleriten (M. Zötzl). Neben Untersuchungen zur Einbaukapazität von Mangan in Brownmillerit wurden anhand von kalorimetrischen und röntgendiffraktometrischen Messungen das Hydratationsverhalten dieser Phase anschaulich vorgestellt und interpretiert.

M. Tewelde berichtete über die Synthese von Metallmonochloroacetaten. Sein Vortrag charakterisierte am Beispiel des Lithiummonochloracetathydrats strukturelle Eigenschaften dieser Verbindungen und mögliche Applikationen als Additiv in zementären Systemen.

Aufgrund der intensiv geführten Diskussionen und dem daraus resultierenden Informationsaustausch ist für 2005 die Fortsetzung dieser Diskussions- und Arbeitstagung geplant.

Vereinbarungsgemäß hat Prof. Dr. H. Pöllmann nach dieser Veranstaltung das Amt des Sprechers des AK 15 übernommen. Herr Prof. Dr. H. Pentinghaus wird auch in Zukunft den Arbeitskreis aktiv unterstützen.

Thomas Kühn, Halle/Saale

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

auf der 12. Jahrestagung der DGK in Jena wurde der neue Arbeitskreis "Kristallchemie" (AK19) gegründet, der all denen ein Forum bietet, die sich mit strukturellen, physikalischen oder chemischen Eigenschaften von kristallinen Festkörpern beschäftigen.

Hervorgegangen ist dieser Arbeitskreis aus der großen Gruppe der Anorganischen Festkörper- bzw. Kristallchemiker, die nun endlich auch offiziell in der DGK beheimatet sind. Gemäß eines Beschlusses der 1. Mitgliederversammlung des Arbeitskreises schließt die wissenschaftliche Ausrichtung des neuen Arbeitskreises jedoch alle Festkörper ein, ganz unabhängig davon, ob diese rein anorganischer, metallorganischer oder organischer Natur sind.

Der Arbeitskreis wird sich bereits offiziell auf der nächsten Jahresversammlung in Köln engagieren, indem er sich an der Organisation und Durchführung der beiden arbeitskreisübergreifenden Mikrosymposien "Kristallchemie und komplexe Überstrukturen" und "Kristallchemie und Hochdruck-Kristallographie" sowie am Mikrosymposium "Anorganische Kristallchemie" beteiligt.

Nun wäre es ein lebloser Arbeitskreis, würde dieser nicht in absehbarer Zeit über eine große Anzahl von Mitgliedern verfügen. Wir bitten Sie daher, sollten Sie Interesse an diesen Themen haben, dem Arbeitskreis "Kristallchemie" beizutreten. Hierzu genügt ein formloses Schreiben, beispielsweise per mail an den Schatzmeister der DGK Herrn Schreuer (schreuer@kristall.uni-frankfurt.de). Darüber hinaus bitten wir Sie, den Arbeitskreissprecher über den Beitritt zu informieren, damit wir eine aktualisierte Mitgliederliste erstellen und auf unserer Homepage (www.ak-kristallchemie.uni-kiel.de) veröffentlichen können.

Natürlich würden wir uns, wie im Übrigen auch die DGK über die Werbung neuer Mitglieder freuen. In diesem Zusammenhang weisen wir darauf hin, dass Studenten, Diplomanden und Doktoranden in der DGK einen reduzierten Mitgliedsbeitrag von nur Euro 5,- bezahlen müssen. Da die Ersparnis bei den Gebühren zur Jahrestagung für Mitglieder der DGK diesen Jahresbeitrag bei weitem übersteigt, lohnt sich dies für alle, die regelmäßig an den Jahrestagungen der DGK teilnehmen.

Mit freundlichen Grüßen

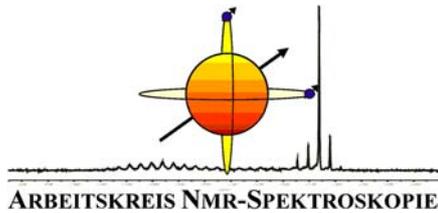
gez. Rainer Pöttgen

6. Dezember 2004

(Sprecher AK 19 – Kristallchemie)

Prof. Dr. Rainer Pöttgen
Institut für Anorganische und Analytische Chemie
Universität Münster
Corrensstrasse 36
48149 Münster, Germany
Tel. (+49)-(0)251-83-36000 (secretary)
Tel. (+49)-(0)251-83-36001 (Pöttgen)
Fax (+49)-(0)251-83-36002
e-mail: pottgen@uni-muenster.de
<http://www.uni-muenster.de/Chemie/AC/poettgen/welcome.html>

ANKÜNDIGUNGEN:



DER
DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR
KRISTALLOGRAPHIE E.V.

Arbeitskreissprecher:

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

D-44801 Bochum

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

Einladung

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

„Charakterisierung von Oktaederumgebungen in Mineralen: Problematik und Lösungsansätze bei Quadrupolkernen (^{23}Na , ^{27}Al , ^{25}Mg) durch Hochauflösungsmethoden (MAS, MQMAS, DAS, DOR, SATRAS)“

vom

07. - 08. April 2005

am

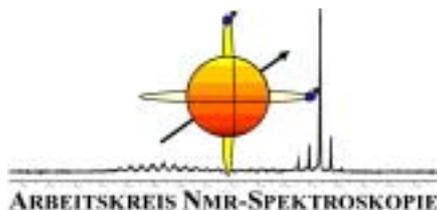
Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum
Universitätsstr. 150, 44801 Bochum

Themen:

- Problematik von Quadrupolkernen wie ^{27}Al , ^{23}Na und ^{25}Mg : Verbreiternde Quadrupolwechselwirkungen 2. Ordnung.
- Unterschiede zwischen Raumausmittlungsverfahren (DOR, DAS, MAS, VAS) und Spinausmittlungsverfahren (MQMAS, Nutation).
- Vergleich und Vor-/Nachteile der MQ MAS mit anderen NMR-Methoden zur Ausmittlung oder Verringerung der Quadrupolwechselwirkung 2. Ordnung (DOR, DAS, VAS, SATRAS).
- Unterscheidung von Sechsfach-, Fünffach und Vierfachkoordination des Aluminiums in alumosilikatischen Mineralen (Sillimanit, Vesuvianit, Muscovit) sowie verschiedener Natriumplätze in Mineralen, wie Roedderit, Albit, etc. durch Ausmittlung der Quadrupolwechselwirkung 2. Ordnung.

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

Infos und Anmeldungen über den AK-Sprecher: Dr. Michael Fechtelkord, Bochum und über das Internet unter: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/indexw.htm> bzw. für nicht framefähige Browser: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/workshops/workshop14an.htm>



Shortcourse 2005 der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft zusammen mit der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie - Arbeitskreis NMR-Spektroskopie

Anwendungen der Festkörper NMR Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung

Leitung: Dr. Michael Fechtelkord, (Arbeitskreis NMR Spektroskopie der DGK)

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

Datum: 17. Mai (Dienstag) - 20. Mai 2005 (4 Tage)

Inhalt: Die Festkörper NMR Spektroskopie ist eine äußerst geeignete Methode zur lokalen Strukturaufklärung. Alle Kerne, die ein magnetisches Moment besitzen ($I > 0$), können als lokale Sonde detaillierte Informationen über ihre nächste Umgebung z. B. über Bindungswinkel, benachbarte Atome (1. und 2. Koordinationssphäre), die lokale Symmetrie, die Koordinationszahl, sowie zu dynamischen Prozessen liefern. Dieses ist darauf zurückzuführen, daß neben dem äußeren statischen Magnetfeld schwache interne lokale Felder, die die eigentliche strukturelle Information liefern, das effektive Magnetfeld am Kernort beeinflussen. Die beiden wichtigsten Wechselwirkungen sind hierbei die chemische Verschiebung für alle Kerne und die elektrische Quadrupolwechselwirkung für Kerne mit einem Kernspin $I > 1/2$. Die NMR Spektroskopie bietet als komplementäre Methode zur Röntgenstrukturanalyse eine effektive Unterstützung zur Strukturaufklärung.

Der Kurs verfolgt das Ziel, Studenten, Diplomanden und Doktoranden des Studienganges Mineralogie und Geowissenschaften eine Einführung in das Gebiet der Festkörper NMR Spektroskopie zu geben. Neben der Vermittlung der notwendigen theoretischen Kenntnisse sollen an einfachen Forschungsbeispielen die Anwendungsmöglichkeiten und Stärken der NMR Spektroskopie in der mineralogischen Forschung aufgezeigt werden. Jeder Kurstag gliedert sich in einen einführenden theoretischen Teil, an den sich auf der Theorie aufbauende Messungen anschließen, die danach von den Teilnehmern ausgewertet werden.

Teilnehmerzahl: max. 20 Teilnehmer

Gebühren: keine

Nicht ortsansässige studentische DMG-Mitglieder und/oder DGK-Mitglieder können einen Zuschuss zu ihren Kosten erhalten.

Sonstiges: Informationen zum Kurs und zu günstigen Quartieren können über Internet abgefragt werden unter <http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/indexdmgshort.htm>

Rückfragen, Anmeldungen: Dr. Michael Fechtelkord, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum.

Tel. 0234-32-24380, Fax 0234-32-14433, **e-mail:** Michael.Fechtelkord@ruhr-uni-bochum.de

COMPUTATIONAL CRYSTALLOGRAPHY

*** CIRCULAR ***

You are cordially invited to attend a workshop organized by the AK 14 of the Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) to be held in the Department of Organic Chemistry of the Rheinisch-Westfaelische Technische Hochschule (Technical University Aachen, RWTH) Aachen from

Sunday 20 to Tuesday 22 February 2005.

The subject of the workshop will be

Molecular Dynamics and Crystallography

The scientific program will consist of 5 main lectures. Each speaker will make a contribution of 90 minutes interrupted and followed by discussion breaks of 15 minutes. Registration will be on Sunday 20 from 16:00 to 18:00 followed by an informal get-together in the seminar room of the Chemistry Department. The lectures will start on Monday morning at 08:30 and the workshop will close on Tuesday at about 17:30. The language of the meeting will be English.

Five invited speakers have agreed to contribute to the workshop. Participants are encouraged to contribute posters and some of them who do so will be asked to present their results in form of a short talk on Tuesday afternoon.

List of main lectures (alphabetical order of speakers):

1) Robert O. Jones (Forschungszentrum Jülich):

Density Functional Calculations and the Parametrization of Force Fields.

(Key words: Density functional theory, density functional calculations, force fields, parametrization)

2) Peter Kroll (Technical University Aachen, RWTH):

Ab initio Molecular Dynamics in Amorphous Solids.

(Key words: Structural modeling, network rearrangement, defect dynamics, phase segregation, vibrational spectra)

3) Dominik Marx (Ruhr-Universität Bochum):

Ab Initio Molecular Dynamics: Foundations and Principles.

(Key words: Molecular Dynamics, electronic structure, density functional theory, hydrogen bonds, Debye-Waller factors)

4) Marc Meunier (Accelrys Ltd. Cambridge):

Classical Simulations in the Crystalline Solid State: Current Tools and Recent Applications.

(Key words: Molecular dynamics, forcefield, crystallography, diffusion, zeolites)

5) Björn Winkler (Universität Frankfurt):

Molecular Dynamics Simulations of Crystals and Nanotubes.

(Key words: Nanotubes, friction, density of states, thermodynamic properties)

The registration fee is EUR 50,- and covers participation in the scientific program, conference materials, coffee break refreshments, and a dinner on Monday evening.

To register please complete the attached registration form and return it preferably by email or fax.

DEUTSCHE BANK, WUERSELEN

Account-No. : 523554403

Bank code (BLZ): 390 700 24

Reference : G.Raabe, DGK-AK14-2005

In case you are looking for hotel accommodation you can call either 02405 802987 or 0172 2588565 and our colleague Dr. Rumin Wang will be pleased to help you.

I look forward to meeting you in Aachen!

Yours sincerely

Gerhard Raabe

REGISTRATION FORM

Prof. Dr. Gerhard Raabe
Institut fuer Organische Chemie
Rheinisch-Westfaelische Technische
Hochschule Aachen,
Professor-Pirlet-Strasse 1
D-52074 Aachen
Germany

Phone: +49 (0)241 80 94709
Fax : +49 (0)241 80 92385
Email: gerd.raabe@thc.rwth-aachen.de

Title (please tick)

Prof. , Dr. , Mrs. , Mr. .

Name

Last name : First name:

Address

Street, No :

City : Zip code :

Country :

Telephone : Fax :

Email :

To facilitate the organization please answer the following questions:

1) I would like to contribute a poster with the title:

.....
.....
.....

2) I am interested to participate in the informal get-together on Sunday evening, February 20

Yes , No .

3) I participate in the dinner on Monday evening.

Yes , No .

I will transfer the registration fee of EUR 50,- to the conference account

DEUTSCHE BANK, WUERSELEN
Account-No. : 523554403
Bank code (BLZ) : 390 700 24
Reference : G.Raabe, DGK-AK14-2005

Date Signature or typed name

EINLADUNG

zum

International workshop on crystalline and amorphous alkaline and alkaline-earths silicate hydrates: Relation between structure and properties

im Forschungszentrum Karlsruhe

vom

07. - 08. Juni 2005

Wir laden alle herzlich ein, die an dem Tagungsthema Interesse haben oder sich hier mit einbringen möchten.

Infos über das detaillierte Programm und Anmeldungen bei den Veranstaltern:

Dr. Peter Stemmermann, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH,
ITC/TAB-Technische Mineralogie, B329,

Herrmann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Postfach 3640,
76021 Karlsruhe, Tel. 07247/82/4391 Fax 07247/82/4476,

peter.stemmermann@itc-wgt.fzk.de

gemeinsam mit dem Arbeitskreis 15 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie

Prof. Dr. H. Pöllmann (Sprecher des Arbeitskreises AK15 Mineralogische und Technische
Kristallographie) Institut für Geologische Wissenschaften/Mineralogie-Geochemie
06108 Halle (Saale)

poellmann@geologie.uni-halle.de

sowie im Netz unter http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG_DGK.htm

EINLADUNG

zur

**5. Diskussions- und Arbeitstagung
Mineralogische und Technische Kristallographie**

**am Instituts für Geologische Wissenschaften/Mineralogie-Geochemie
06108 Halle (Saale)**

gemeinsam mit dem Arbeitskreis 15 der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie

in Halle/Saale

vom

5.- 6. 10. 2005

zum Thema

Wasserhaltige Phasen in Aluminat-Zementsystemen

Infos über das detaillierte Programm und Anmeldungen beim Veranstalter:

Prof Dr. H. Pöllmann (Sprecher des Arbeitskreises AK15 Mineralogische und Technische
Kristallographie) Institut für Geologische Wissenschaften/Mineralogie-Geochemie
06108 Halle (Saale)

poellmann@geologie.uni-halle.de

sowie im Netz unter *<http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG DGK.htm>*

Einladung

zu einem Kurs über

Anwendungen der Gruppentheorie in der Kristallchemie

**4. Oktober 2005 (ab 14 Uhr) bis 7. Oktober 2005 (bis 12 Uhr)
in Hofgeismar (bei Kassel)**

Gemeinsame Veranstaltung des Arbeitskreises Kristallchemie der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie sowie der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialwissenschaften der Gesellschaft Deutscher Chemiker.

Es handelt sich um einen Fortbildungskurs, der sich an Doktoranden, Postdoktoranden und fortgeschrittene Studierende der Kristallographie, Mineralogie, Chemie und Physik sowie an interessierte Wissenschaftler wendet.

Themen: Raumgruppen und ihre Untergruppen; Symmetriebeziehungen zwischen Raumgruppen als Hilfsmittel zum Aufzeigen von Strukturzusammenhängen zwischen Kristallstrukturen; die Bedeutung von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen bei Phasenumwandlungen und Zwillingskristallen. Dazu Beispiele und Übungsaufgaben.

Veranstalter: H. Bärnighausen, Karlsruhe
U. Müller, Marburg
R. Pöttgen, Münster
M. Ruck, Dresden

Die Teilnehmergebühren werden voraussichtlich 240 Euro (Einbettzimmer) bzw. 225 Euro (Zweibettzimmer) betragen. Darin sind die Aufenthaltskosten (Vollpension) und Kursunterlagen enthalten. Gegebenenfalls können Stipendien für Teilnehmer vergeben werden. Die Teilnehmerzahl ist auf 50 beschränkt.

Weitere Informationen werden über
www.chemie.uni-marburg.de/g-u-kurs
bekanntgegeben.

Anmeldung und Anfragen bitte an **g-u-kurs@chemie.uni-marburg.de** oder schriftlich an den Organisator:

Prof. U. Müller, Fachbereich Chemie, Philipps-Universität, 35032 Marburg

10TH EUROPEAN CONFERENCE ON SOLID STATE CHEMISTRY

TUESDAY 30TH AUGUST - FRIDAY 2ND SEPTEMBER 2005

Hosted by

Department of Engineering Materials

Sir Robert Hadfield Building, Mappin Street, Sheffield, S1 3JD

To be held at

The Octagon Centre

University of Sheffield, Western Bank, Sheffield

The 10th biennial European Conference on Solid State Chemistry will be held in Sheffield next year. This conference will encompass all aspects of solid state chemistry, including synthetic methods, structure, new materials, properties and applications.

A welcome reception will be held on Monday 29th August 2005, with the conference running from Tuesday 30th August 2005 until Friday 2nd September 2005.

Contact Details:

Email address: ecssc@sheffield.ac.uk

Website: <http://www.sheffield.ac.uk/materials/ecssc/>

Conference Chairman Tony West
Co-Chairman Derek Sinclair

Local Organizing Committee Neil Hyatt, Gabrielle Miles, Denis Pasero,
Antonio Feteira, Nik Reeves, Lisa Gillie

Conference Secretary Louise Draycott

Workshop:

Zeit- und temperaturlaufgelöste Röntgen-Pulver-Diffraktometrie (VII)

Industrielle Anwendungen in der Werkstofftechnik

20. bis 21. Oktober 2005
Pfinztal/Berghausen bei Karlsruhe

Die in situ - Analyse von Reaktionen, Reaktionsprodukten, Phasen und mechanischen Spannungen spielt in weiten Bereichen der Werkstofftechnik eine zunehmend bedeutende Rolle. Insbesondere bei hohen und bei tiefen Temperaturen können Vorgänge oft erst mit Hilfe von in situ gewonnenen Informationen über Zusammensetzung, Gefüge, Struktur, etc. verstanden werden. Beispielhaft seien hier die Korrosion bei hohen Temperaturen sowie zeit- und temperaturabhängige Phasenumwandlungen genannt. Die zeit- und temperaturlaufgelöste Röntgen-Pulverdiffraktometrie hat sich in den letzten 15 Jahren auf diesem Gebiet als eine sehr effektive und weitreichende Methode erwiesen.

Die Arbeitsgruppe für Angewandte Röntgenbeugung und Hochtemperaturwerkstoffe im ICT veranstaltet daher in Zusammenarbeit mit dem Arbeitskreis Pulverdiffraktometrie der DGK sowie der Gesellschaft für Thermische Analyse GEFTA einen Workshop mit dem Ziel, ein Diskussionsforum für Anwender und Entwickler von Werkstoffen und Messtechnik aus Forschung und Industrie zu bieten. Hierzu werden Vorträge zu ausgesuchten Themen breiteren Interesses geladen und es wird um Einreichen von Beiträgen gebeten, als Vortrag oder Poster.

Themen

- Anwendungen der zeit- und temperaturlaufgelösten Röntgendiffraktometrie in der Werkstofftechnik
- Apparative Entwicklungen (Röntgenquellen, Optiken, Detektoren)
- Auswerte- und Bearbeitungsprozeduren

Den Herstellern und Produktentwicklern wird die Möglichkeit geboten, ihre Produkte während des Workshops auszustellen.

Information: Dr. Paul Bernd Kempa
ke@ict.fraunhofer.de

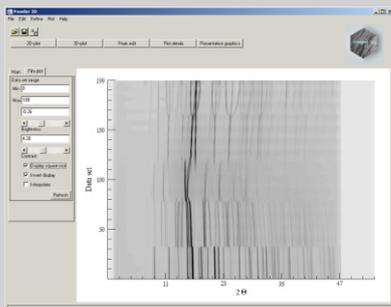
Dr. Vladislav Kolarik
vk@ict.fraunhofer.de

Fraunhofer Institut für Chemische Technologie
Joseph-von-Fraunhofer-Str. 7
76327 Pfinztal
www.ict.fraunhofer.de

Visual Tools

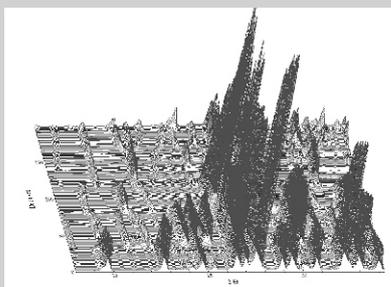
Heating Guinier Film

Phase transitions of $\text{Rb}_2\text{C}_2\text{O}_4$ (Dinnebier et al., 2004) during a heating/cooling cycle.



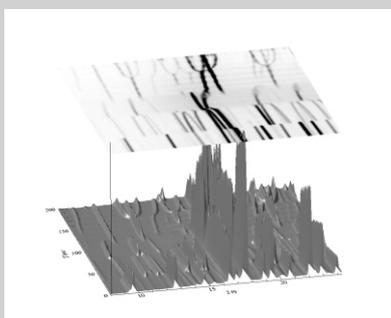
3D-Line Plot

Phase transitions of $\text{Rb}_2\text{C}_2\text{O}_4$ (Dinnebier et al., 2004) during a heating/cooling cycle.



3D-Surface Plot

A 3D surface plot with a hovering heating guinier simulation.



One of the major advantages of powder diffraction compared to other analysing techniques is to (indirectly) measure changes of the entire crystal structure as a function of time, pressure, temperature, chemical composition, magnetic field etc.

Once online image plate readers and high resolution CCD cameras became available, they shall force changes in methods of data analysis and presentation. Typical readout times are now on the order of seconds. Soon, milliseconds will become standard, producing huge amounts of data which need to be processed in a reasonable amount of time.

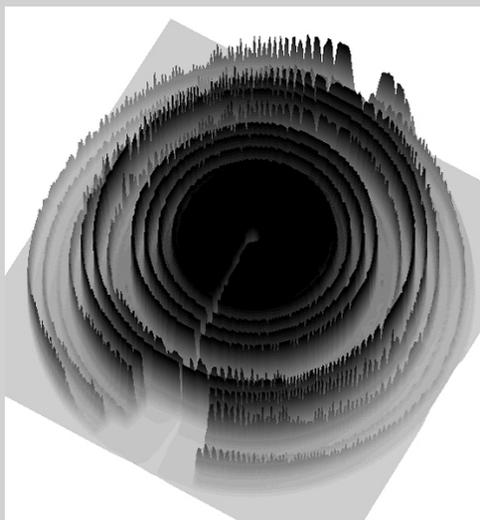
The new software solution presented here aims to provide a tool for just this purpose. At the present time the implemented functionalities include data reduction for Rietveld refinement and powerful graphical representations of 2D and 3D powder diffraction data in presentation quality (see figures showing the phase transformations and decomposition of $\text{Rb}_2\text{C}_2\text{O}_4$). The software design and functionality has been optimised to allow a substantial amount of automation if desired by the user.

References:

1. Dinnebier, R.E., Vensky, S., Jansen, M. and Hanson, J., Chemistry, a European Journal, 2004, in press
2. Rodríguez-Carvajal, J. (2001) Recent Developments of the program FULLPROF. Commission on Powder Diffraction Newsletter, 26, 12-19.
3. Powder3D can be downloaded from <http://www.fkf.mpg.de/xray>

Future Developments

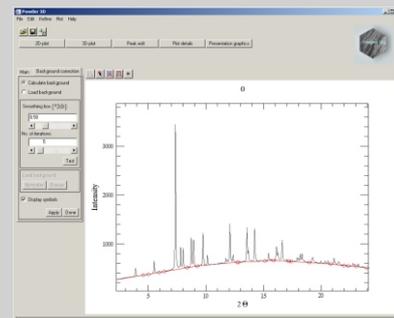
The development of Powder3D is focused on creating a framework for efficient and robust data analysis. Some goals include the automated masking of image plate data and automated Rietveld refinements.



Analysis Tools

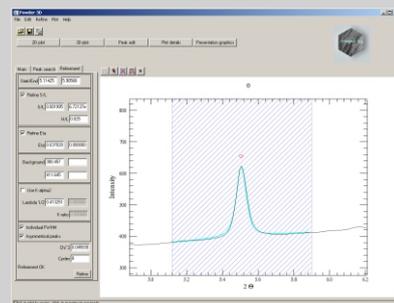
Background Reduction

A robust, iterative background identification algorithm is implemented.



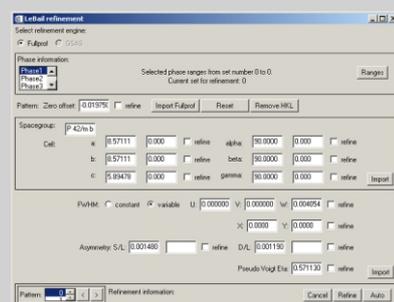
Peak Refinement

A pseudo-Voigt function corrected for asymmetry due to axial divergence can be fit to the peak



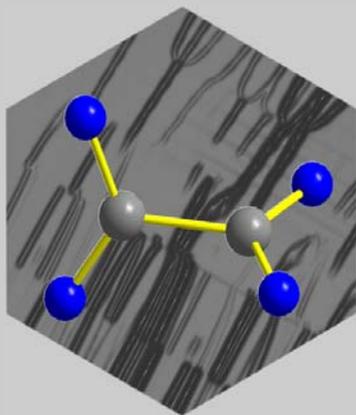
Le Bail Fitting

An assistant for Le Bail fitting creates files and runs Fullprof whole pattern peak fitting refinements.



International Workshop

Watching the Action: Powder Diffraction at non-ambient conditions



R. E. Dinnebier
B. Hinrichsen
M. Jansen

October 6 – 7, 2005

Max-Planck-Institute for Solid State Research
Heisenbergstrasse 1
D-70569 Stuttgart
Germany

<http://www.fkf.mpg.de/xray/>

under the auspices of the DGK, CPD and the MPG

Workshop Description

The workshop is intended for scientists in solid state research, geo-sciences, crystallography, solid state physics and material science which are interested in polymorph detection, crystallography at non-ambient conditions, kinetics and crystal structure determination.

Diplomants and Ph.D students are welcome.

No special knowledge is required for the workshop but it is advantageous to have a basic knowledge on crystallographic methods.

During the workshop, the following topics are addressed:

- Pro-and contra of in-situ measurements in the laboratory and at synchrotron sources.
- Powder diffraction at high/low temperature
- Powder diffraction at high pressure
- Measurement techniques
- Data reduction of large series of powder patterns
- 3D-data presentation
- Image analysis for 2D powder diffraction
- Analysis software
- Crystal structure determination
- Pattern fitting and Rietveld analysis in batch mode
- “Moving” crystal structures

The participants are encouraged to present to present their work as short lectures or posters. Individual problems will be discussed.

Software for the analysis of the sample data sets will be provided. For the practical sessions, a laptop-computer with Windows 2000 or XP is recommended.

Location and Time:

October 6, 2005, 9.00 am – 6.30 pm

October 7, 2005, 9.00 am – 5.00 pm

Meeting point: 8.30 am in the foyer of the Max-Planck-Institute for Solid State Research (Heisenbergstrasse 1)

Tentative Speakers:

Stefan Carlson (Lund)

Robert E. Dinnebier (MPI, Stuttgart)

Bernd Hinrichsen (MPI, Stuttgart)

Manfred Joswig (Uni Stuttgart)

Poul Norby (Uni, Oslo)

Holger Putz (Crystal Impact)

Juan Rodriguez-Carvajal (CEA-CNRS)

Workshop Fees:

none

Travel:

Excellent connection by public transportation. Please check the workshop website.

Language

The official language of the workshop is English.

Information

Additional information will soon be available at:

<http://www.fkf.mpg.de/xray/>

Accommodation

Information about accommodation will be send right after registration. Reservations are in the responsibility of the participants. A limited number of rooms are available in the MPI guest house and will be filled on a first-come-first-served basis

(Tel: +49 (0)711-689-0).

Registration form

Yes, I would like register for the workshop *Watching the Action: Powder Diffraction at non-ambient conditions, October 6-7, 2005 in Stuttgart.*

Name: _____ Position: _____

Organization: _____

Address: _____

City: _____ Country: _____ Zip code: _____

Telephone #: _____ Fax #: _____

E-mail #: _____

I would like to join the workshop dinner on October 6, 2005 at 7:00 pm (approximately 20 Euro *).

I will bring a laptop computer .

I plan to present a poster , a short talk .

Signature: _____

(* to be paid upon arrival)



Please send the form to:

Office of Prof. Dr. Martin Jansen
Max-Planck-Institute for Solid State Research
Heisenbergstrasse 1
D-70569 Stuttgart
Germany

or by Fax/ E-mail:

Fax #: (--49) (0)711-689-1502
E-mail: J.Knapp@fkf.mpg.de

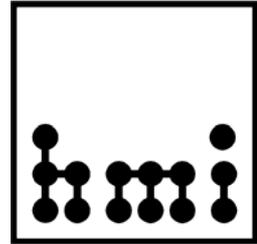
In case of questions:

 #: (--49) (0)711-689-1500

PERSONALIA:



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DRESDEN



Doktorand/-in in der Physik oder Werkstoffwissenschaft

Die **TU Dresden** führt zusammen mit dem **Hahn-Meitner-Institut in Berlin** ein gemeinsames Forschungsvorhaben durch. Sinterprozesse in Metallen sollen mittels hochauflösender Synchrotron-Röntgentomographie untersucht werden, um die dabei ablaufenden Vorgänge besser zu verstehen. Das Sintern von Metallen wird an der TU Dresden untersucht. Der vorhandene Tomographie-Meßplatz in Berlin soll durch einen Ofen für in-situ Untersuchungen ergänzt und zur Untersuchung von Sinterprozessen verwendet werden. Auswertesoftware zur Bestimmung der Teilchenbewegungen beim Sintern ist zu entwickeln und anzuwenden.

Sie sind Physiker/-in und haben Interesse an einer Promotion in diesem interdisziplinären Gebiet. Sie sind bereit, Ihre Arbeitszeit zwischen Berlin und Dresden aufzuteilen und längere Zeiträume an einem der Orte zu verbringen. Sie trauen sich zu, sowohl konstruktive und experimentelle, als auch Fragestellungen der automatischen Bildauswertung zu bewältigen und im Umfeld zweier Forschungsgruppen mitzuarbeiten.

Vergütung auf Basis von 75% BAT IIa für zunächst 2 Jahre.

Es gelten die üblichen Regelungen zur Förderung von Frauen.

Die Bewerbungen werden laufend ausgewertet. Bitte schicken Sie Ihre Bewerbung an:

Prof. B. Kieback
TU Dresden
Institut für Werkstoffwissenschaft
01062 Dresden
bernd.kieback@epw.ifam.fhg.de

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie DGK
Der Vorstand



Verschollene Mitglieder

Nach der Versendung der Mitteilungen Heft 28 im August 2004 waren die Briefe an folgende Mitglieder nicht zustellbar:

Herr Guido Dörsam
Herr Prof. Dr. Emil Eberhard
Herr Carlos Fernandez-Catalan
Herr Dr. Roland Geray
Herr Mariola Gomez-Ortiz
Frau Manja Grosche
Herr Dr. Frank Hartmann
Frau Dr. Kerstin Jurkschat
Frau Sabine Kampermann
Frau Sigrid Kauter
Herr Harald Lehnert
Frau Anzhela Pavlovska
Herr Oliver Pawlig
Herr Dr. Axel Scheidig
Herr Dr. Carsten Schinzer

Wer Informationen über neue Adressen etc. hat, wird herzlichst gebeten, diese dem Schatzmeister (am besten per Email an schreuer@kristall.uni-frankfurt.de) mitzuteilen.

Aufruf !

Beim Versand diverser Circulars für Workshops und Tagungen ist uns aufgefallen, dass viele Emailadressen unserer Mitglieder nicht aktuell sind. Wir bitten alle, die keine Mails zur DGK-Jahrestagung im März 2005 erhalten haben, Ihre aktuelle Emailadresse an den Schriftführer zu mailen!

PETER PAUFLER 65: ERINNERUNGEN UND EINDRÜCKE EINES ZEITGENOSSEN

Am 18. Februar 2005 begeht Professor Dr. rer. nat. Peter Paufler seinen 65. Geburtstag. Wer den Jubilar und die für ihn typische Hintanstellung seiner eigenen Person kennt, wird nicht überrascht sein, daß er für die nun einmal nicht zu vermeidende Geburtstagsfeier weniger den Charakter eines gesellschaftlichen Ereignisses, als vielmehr den einer wissenschaftlichen Veranstaltung gewünscht hat. Darauf hat der Arbeitskreis 5 „Kristallphysik“ der DGK in angemessener Weise reagiert und, die wissenschaftlichen Aktivitäten und Meriten des Jubilars bedenkend, den Geburtstag zum Anlaß genommen, um in Dresden ein Arbeitskreistreffen, besser wohl Kolloquium, zu veranstalten. Bei dieser Veranstaltung werden namhafte Kollegen verschiedene Aspekte der Kristallphysik behandeln, wobei sie sicherlich nicht versäumen, die Bedeutung des Jubilars für das jeweilige Teilgebiet gebührend herauszuheben. Die vielen verschiedenartigen Verdienste Peter Pauflers um die Wissenschaft allgemein und besonders für die Kristallographie werden in Beiträgen einer Autorengruppe für die *Zeitschrift für Kristallographie* und *Crystal Research and Technology* gewürdigt, wo es jeder nachlesen kann, so daß sich eine Wiederholung meinerseits und an dieser Stelle erübrigt. Um Kollegen Paufler dennoch auf gehörige Weise Geburtstagsgrüße zu übermitteln und ihm meinen großen Respekt zu erweisen, möchte ich dieses mit einigen wenigen Erinnerungen an verschiedene Begegnungen zwischen ihm und mir tun.

Es wird wohl im August 1989 auf dem ECM-Kongreß in Moskau gewesen sein, daß Peter Paufler und ich uns zum ersten Mal intensiver unterhalten haben. Begegnungen zwischen Bürgern der damaligen DDR und solchen aus dem Westteil Berlins waren bis dahin ziemlich heikel und schwierig zu bewerkstelligen. Aber wie allgemein erinnerlich, änderte sich die politische Situation in Deutschland zu jener Zeit rasant und bereits auf der Moskauer Konferenz und besonders dann kurz nach der Heimkehr diskutierten P. Paufler und ich über Möglichkeiten einer, wie auch immer gearteten, Zusammenarbeit. Daß eine Änderung der politischen Basislage in der Luft lag, war allenthalben zu spüren, besonders auch in Berlin, an der damaligen Nahtstelle zwischen Ost und West. Bereits im September 1989 schickte ich P. Paufler Themenvorschläge für einen Vortrag von mir an seiner damaligen Wirkungsstätte (Karl-Marx-Universität Leipzig, Sektion Chemie, WB Kristallographie) und Mitte Dezember konnten Thema und Termin verabredet werden. Zur Erinnerung: Am 9. November 1989 wurde die Mauer geöffnet und Anfang Dezember die führende Rolle der SED suspendiert. Als Termin für meinen Vortrag war Mittwoch, der 14. Februar 1990, festgesetzt worden. Auch hier zur Erinnerung wichtige politische Ereignisse um diese Zeit: Anfang 1990 wurde die PDS als Nachfolgepartei der SED gegründet, am 15. Januar wurde die Zentrale der „Stasi“ in Ost-Berlin gestürmt und im Februar fanden Gespräche zwischen Gorbatschow, Kohl und Modrow zur Wiedervereinigung statt, auch unter dem Eindruck der sich rapide ändernden Stimmungslage in der Noch-DDR, wo bei den Montagsdemonstrationen immer stärker der Ruf „Wir sind ein Volk“ ertönte. In dieser Situation fuhr ich also nach Leipzig, um über ein in diesen bewegten Zeiten ziemlich abgehoben anmutendes Thema „Kristallographische Aspekte inkommensurabler Strukturen“ zu sprechen. Der Vortrag fand in relativ großer Runde statt, wobei mir insbesondere die anschließende Diskussionsveranstaltung mit Dozenten und Studenten in intensiver Erinnerung bleibt. Das Informationsbedürfnis war auf beiden Seiten sehr groß und es war deutlich zu merken, wie stark die jeweiligen Lebensumstände das Bewußtsein bestimmen. Man kann, glaube ich, P. Paufler gar nicht genug dafür danken, daß er durch diese Gegenüberstellung dafür sorgte, daß es bei seinen

Studenten und Dozenten, aber auch bei dem seinerzeitigen Gastredner, zu einer relativ realistischen Einschätzung der Situation kam. Als angenehmen Begleiteffekt der Veranstaltung darf ich noch anführen, daß eine ganze Reihe heute noch andauernder, gut-kollegialer Verhältnisse oder gar Freundschaften letztlich auf diese Veranstaltung zurückzuführen ist. Am 8.6.1990 war dann P. Paufler auf Gegenbesuch in meinem damaligen Institut, dem Institut für Mineralogie der TU Berlin, wo er über die „Anwendung des Kossel-Effektes auf kristallographische Probleme“ berichtete. Auch hier zur Erinnerung, was zwischendurch geschah: Am 18. März wurde die Freie Volkskammer der DDR gewählt und am 12. April L. de Mazière Ministerpräsident. Kurz nach dem Vortrag von P. Paufler in Berlin, nämlich am 1. Juli 1990 trat die Wirtschafts- und Währungsunion zwischen BRD und DDR in Kraft.

P. Paufler hat immer die Sorge um seine Studenten umgetrieben. Die damalige politische Situation hatte zu einem starken Abwanderungsdruck unter den Studenten geführt und er fürchtete, wie andere auch, daß die DDR und ihre Universitäten ausbluten könnten. Um diesem etwas entgegenzuwirken, lud er mich ein, an seinem Institut im Wintersemester 1990/91 einen Lehrauftrag zu übernehmen. Dem habe ich entsprochen und in der Zeit vom 22.10.1990 bis Februar 1991 jeweils montags eine Vorlesung über „Aperiodische Strukturen“ gehalten. Die Bahnfahrten waren damals noch ziemlich umständlich und dauerten lang, aber die wöchentlichen Besuche in der sich rapide ändernden Stadt Leipzig waren faszinierend und bleiben fest in meiner Erinnerung. Bei diesen Besuchen habe ich dann auch regelmäßig Peter Paufler getroffen und wir haben u.a. über eine gemeinsame Zukunft der beiden deutschen kristallographischen Vereinigungen gesprochen. Die Geschichte ihres Zusammenschlusses zur Deutschen Gesellschaft für Kristallographie ist bekannt oder kann in dem Bericht von U. Steinicke in den Mitteilungen der DGK, Heft 22, S. 29 – 39 (2001) nachgelesen werden.

Seit diesen Tagen hatte ich oft das Vergnügen, Peter Paufler wiederzutreffen, sei es in der Zeit als wir beide zur gleichen Zeit die Fachgutachter für Kristallographie der DFG waren (1992 – 2000), sei es bei zahlreichen Konferenzen, Kongressen, Workshops oder bei den Vorstandssitzungen der DGK. Stets war ich von seiner absolut integren, unprätentiösen Persönlichkeit beeindruckt, wußte aber auch wohl, daß sein freundlicher Charakter einen festen, unbeugsamen, nur der Sache verpflichteten Kern birgt, wie er es oft in seinem Leben bewiesen hat. Möge er diesen Charakter bewahren.

Lieber Peter Paufler, herzliche Gratulation zum Geburtstag und alles Gute für die Zukunft
Ihr
Wulf Depmeier

FESTKOLLOQUIUM ZUM 60. GEBURTSTAG VON PROF. WULF DEPMEIER

Am 25. November 2004 beging der Vorsitzende unserer Gesellschaft, Prof. Wulf Depmeier, seinen 60. Geburtstag. Aus diesem Anlaß fand am 26. November 2004 ein Festkolloquium an der Christian-Albrechts Universität zu Kiel statt, an dem über 120 Kollegen, frühere Mitarbeiter, Freunde, Verwandte und Bekannte teilnahmen. Neben den Grußworten des Prorektors Prof. Jürgen Bähr, des Dekans Prof. Jürgen Grottemeyer und des geschäftsführenden Direktors des Geoinstituts Prof. Volker Schenk, hielt im Namen unserer Gesellschaft der stellvertretende Vorsitzende, Prof. Peter Paufler, eine Grußansprache, in welcher er den Werdegang von Wulf Depmeier und seine Rolle in der DGK Revue passieren ließ.

Der erste Festvortrag war dem wissenschaftlichen Hauptinteresse des Jubilars, den mikroporösen Substanzen gewidmet. Der Vortrag mit dem Titel *Variationen in Siliciumdioxid—Kristalle mit Freiräumen* wurde von Prof. Peter Behrens von der Universität Hannover gehalten. Der als "kleine Überraschung" angekündigte nachfolgende Programmpunkt entpuppte sich als Darbietung eines Alphontrios in Erinnerung an Wulf Depmeiers Zeit an der ETH Zürich und der Universität Genf. Der zweite Festvortrag wurde in seiner unnachahmlichen Art von Prof. Theo Hahn, begleitet von Frau Dr. Ulrike Werthmann am Klavier, bestritten und trug den Titel *Symmetrie, Kunst, Musik und Kristalle*.

Nach der Überreichung einer, aus Sodalith gefertigten, Skulptur des Kieler Bildhauers Jo Kley an Wulf Depmeier klang der Abend mit einem geselligen Beisammensein im Foyer des mineralogischen Museums aus. Für die musikalische Umrahmung sorgte nochmals das bereits erwähnte Alphontrio, sowie die Vorstellung des eigens für diesen Abend von Prof. Horst Küppers entwickelten neuartigen opto-akustischen Wandlers zur Begleitung eines von ihm vorgetragenen Bänkelgesanges. Interessante optische Eindrücke lieferten die zeitgleich im Museum stattfindende Ausstellung lichtkinematischer Modelle des Kieler Physikers Hans-Martin Ihme, sowie Zeichnungen von Valeria Eliasberg und Natali Schnar, welche bereits vom 12.10. – 14.11.2004 auf der Ausstellung *GEOMETRIE UND andere Ordnungen* in der Mineralogischen Staatssammlung München zu sehen waren.

Karsten Knorr
Kiel, 21. Dezember 2004

GERHARD BECHERER

1915 - 2003

Der Arbeitskreis Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen nimmt von seinem Initiator und langjährigen Leiter, Herrn Professor Dr. Gerhard Becherer, in Würdigung dessen Persönlichkeit und Leistungen mit herzlicher Anteilnahme Abschied.

Gerhard Becherer wurde am 15. Juni 1915 im Vogtland geboren. Nach dem Ablegen des Abiturs im Jahre 1935 nahm er ein Physikstudium an der Universität Halle auf. Als Soldat in den unseligen Krieg eingezogen, wurde er 1942 schwer verwundet. Daraufhin wurde er als Physiker in das Carl-Zeiss-Werk Jena zur Forschungstätigkeit für den *Endsieg* verpflichtet. Im April 1945 löste er eine Volkssturmgruppe auf, welcher er zugeordnet wurde und die die Podelsatzbrücke der Autobahn A4 bei Jena vor den heranrückenden Alliierten *verteidigen* sollte. Dieses Detail soll hier erwähnt werden, weil es die Persönlichkeit Gerhard Becherers und seine Lebenseinstellung beispielhaft charakterisiert.

Nach dem Krieg nahm er eine Assistentenstelle am Physikalischen Institut der Universität Halle an und promovierte sowie habilitierte sich dort. Im Jahre 1958 bekam er den Ruf an das Physikalische Institut der Universität Rostock. Hier strukturierte er die experimentalphysikalische Forschung, in welchem bis dahin P. Kunze vorwiegend kernphysikalische Arbeiten durchführte, auf das Gebiet der Festkörperphysik um. Dabei baute er in den siebziger Jahren eine weltweit anerkannte Röntgenstrukturanalyse auf. Die Arbeitsgruppen, die sich hauptsächlich in der Zeeckschen Villa konzentrierten, spezialisierten sich besonders auf die Strukturaufklärung nichtkristalliner Materialien. Die wissenschaftlichen Arbeiten sind in über 180 Veröffentlichungen sowie über 80 nationalen und internationalen Tagungsbeiträgen belegt.

Gerhard Becherer war ein sehr erfolgreicher Hochschullehrer. Viele seiner Studenten erinnern sich gern seiner großen Experimentalphysikvorlesung, die er im Hörsaal der Veterinärmedizin hielt. Während seiner Zeit als Lehrstuhlinhaber diplomierten sich etwa 400 Studenten der Physik bei Gerhard Becherer, aber auch etwa 70 Kandidaten wurden bei ihm promoviert und 26 habilitierten sich.

Seine wissenschaftsorganisatorischen Leistungen offenbaren sich auch darin, dass er im Jahre 1975 weitsichtig den Arbeitskreis Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen in der Vereinigung für Kristallographie etablierte und ihn auch bis zu seiner Emeritierung im Jahre 1980 leitete. Gerhard Becherer war ebenso langjährig in der Leitung der Vereinigung für Kristallographie tätig.

Nach seiner Emeritierung nahm er noch viele Jahre am wissenschaftlichen Leben teil und bereicherte so auch den Arbeitskreis Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen durch seine kritischen und anregenden Fragestellungen, mit denen er stets seine Mitarbeiter in ihren Arbeiten förderte.

Nach längerer Krankheit verstarb Gerhard Becherer am 14. Juli 2003 in Rostock.

Sprecher des AK Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen: Bernd Müller, Jena

PROF. (EM.) DR. DR. H.C. HANS-JOACHIM BUNGE

Professor (em.) Dr. Dr. h.c. Hans-Joachim Bunge ist tot. Er starb im Alter von 75 Jahren am vergangenen Sonntag, den 28. November. In den letzten Jahren, seit seiner Emeritierung im Jahre 1997, hatte Professor Bunge seine wissenschaftliche Heimat am Institut für Physik und Physikalische Technologien der TU Clausthal gefunden, wo er sich sehr wohl fühlte, und führte überdies am HASYLAB in Hamburg ein von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziertes Projekt durch. So ereilte ihn der Tod mitten in produktiver, wissenschaftlicher Arbeit.

Seinen 75. Geburtstag am 29. Juli hatte Bunge im Kreis von über einhundert befreundeten, fachlich verbundenen Wissenschaftlern an der Universität Metz in Frankreich mit einem Fachkolloquium begangen. Am 10. November wurde im kleineren Kreis im Institut für Physik und Physikalische Technologien der TU Clausthal mit Leibniz-Preisträger Prof. Dr. Dierk Raabe, Jg. 1965, vom Düsseldorfer Max-Planck-Institut für Eisenforschung als Vortragendem das Ereignis nachgefeiert - sichtbarer Ausdruck der Tatsache, dass sein Fachgebiet, die Texturforschung, auch für die heutige Wissenschaftlergeneration - in Anverwandlung neuer Fragen - ein Feld für herausragende, kreative Köpfe ist.

Professor Bunge wurde 1929 in Zerbst bei Dessau geboren. Nach dem Abitur im Jahre 1946 absolvierte er zunächst eine Feinmechanikerlehre. 1947 nahm er das Physikstudium an der Martin-Luther-Universität in Halle auf. Seit der Promotion im Jahr 1955 war die Kristalltextur vielkristalliner Werkstoffe sein Forschungsgebiet.

Zunächst arbeitete Hans-Joachim Bunge am Institut für Kristallstrukturforschung der Deutschen Akademie der Wissenschaften der DDR in Berlin und widmete sich Untersuchungsmethoden zur Bestimmung der Textur, so insbesondere der Beugung von Röntgenstrahlen am Vielkristall (1955 - 1968). 1968 kehrte er an das Zentralinstitut für Festkörperphysik und Werkstoffwissenschaften der Deutschen Akademie der Wissenschaften nach Dresden zurück. Die vielversprechende Karriere als Wissenschaftler in der DDR wurde abrupt beendet, als er mit seiner Frau Helga und dem Sohn Hans-Peter 1974 durch Flucht der staatlichen Indoktrination zu entinnen suchte. Der Versuch scheiterte. Sie wurden über ein Jahr getrennt voneinander inhaftiert. 1975 wurden die Familie Bunge von der Bundesregierung als politische Häftlinge freigekauft. Von 1975 bis 1976 ermöglichte ihm ein Stipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft Forschungsaufenthalte bei Prof. Dr. G. Wassermann in Clausthal und bei Prof. Dr. R. Wenk in Berkeley in Kalifornien. 1976 wurde Dr. Bunge als Nachfolger von Prof. Dr. G. Wassermann als Professor und Institutsdirektor an das Institut für Metallkunde und Metallphysik der TU Clausthal berufen.

1969 veröffentlichte Bunge das grundlegende Werk "Mathematische Methoden der Texturanalyse", das in Fachkreisen noch heute als die "Bibel" dieses Arbeitsgebietes gilt. Bunge war Autor oder Herausgeber von weiteren zehn Büchern über quantitative Texturanalyse und anisotrope Materialeigenschaften. Er hat nahezu 500 Beiträge in wissenschaftlichen Zeitschriften und Tagungsbänden veröffentlicht. Die TU Clausthal trauert um den Menschen und großen Wissenschaftler Hans-Joachim Bunge.

Nachruf der Technische Universität Clausthal,
mit freundlicher Genehmigung von Jochen Brinkmann.

Die nächsten Ausgabe des Mitteilungsheftes soll einen Nachruf, der aus der kristallographischen Gemeinschaft stammt, enthalten. [Anm. d. Redaktion].

TAGUNGEN UND TERMINE

20. - 22.02.2005 **Workshop on ‘Molecular Dynamics and Crystallography’ of the working group ‘Computational Crystallography’ of the DGK in Aachen.**

Kontakt: Prof. Dr. G. Raabe
gerd.raabe@thc.rwth-aachen.de

28.02.-04.03.2005 **Gemeinsame Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie DGK, der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung DGKK und des Nationalkomitees für Kristallographie der Österreichischen Akademie der Wissenschaften an der Universität zu Köln.**

Kontakt: Prof. Dr. L. Bohatý
kristall2005@uni-koeln.de
<http://www.kristall2005.uni-koeln.de/>

07. - 08.04.2005 **14. NMR-Workshop des Arbeitskreises NMR-Spektroskopie über „Charakterisierung von Oktaederumgebungen in Mineralen: Problematik und Lösungsansätze bei Quadrupolkernen (^{23}Na , ^{27}Al , ^{25}Mg) durch Hochauflösungsmethoden (MAS, MQMAS, DAS, DOR, SATRAS)“ in Bochum.**

Kontakt: Dr. M. Fechtelkord
Michael.Fechteltkord@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/indexw.htm>

17. – 20.05.2005 **Shortcourse 2005 der DMG zusammen mit dem Arbeitskreis NMR-Spektroskopie der DGK über „Anwendungen der Festkörper NMR Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ in Bochum.**

Kontakt: Dr. M. Fechtelkord
Michael.Fechteltkord@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/dgk-ak12/indexdmgshort.htm>

02. – 03.06.2005 **Seminar „Röntgendiffraktometrie“ der Technischen Akademie Wuppertal e.V. in Wuppertal**

Kontakt: Technische Akademie Wuppertal e.V.
Herr Nordmann
42097 Wuppertal
Tel.: 0202-7495-251
Fax: 0202-7495-216
taw@taw.de
<http://www.taw.de>

07. – 08.06.2005 **International workshop on crystalline and amorphous alkaline and**

alkaline-earths silicate hydrates:Relation between structure and properties des FZ Karlsruhe zusammen mit dem AK 15 Mineralogische und Technische Kristallographie am FZ Karlsruhe.

Kontakt: Prof. Dr. H. Pöllmann
poellmann@geologie.uni-halle.de
http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG_DGK.htm

23. - 31.08.2005 **XX IUCr Congress in Florenz, Italien**

Kontakt: <http://www.iucr2005.it/>

29. - 30.08.2005 **10th European Conference an Solid State Chemistry hosted by Department of Engineering Materials in Sheffield**

Kontakt: Tony West
ecssc@sheffield.ac.uk
<http://www.sheffield.ac.uk/materials/ecssc/>

19. - 21.09.2005 **XXVI. Arbeitskreistagung des AK „Nichtkristalline und Partiiellkristalline Strukturen“ der DGK zum Thema „Strukturen und Strukturbildungsprozesse im intermediären Strukturbereich nichtkristalliner Materialien“ in Wolfersdorf.**

Kontakt: Prof. Dr. B. Müller
bernd.mueller@uni-jena.de

04. - 07.10.2005 **Fortbildungskurs zur “Anwendung der Gruppentheorie in der Kristallchemie” des AK „Kristallchemie“ der DGK gemeinsam mit der FG „Festkörperchemie und Materialwissenschaften“ der GDCh.**

Kontakt: Prof. Dr. U. Müller
g-u-kurs@chemie.uni-marburg.de
<http://www.chemie.uni-marburg.de/g-u-kurs/>

05. - 06.10.2005 **5. Diskussions- und Arbeitstagung des AK 15 Mineralogische und Technische Kristallographie in Halle/Saale.**

Kontakt: Prof. Dr. H. Pöllmann
poellmann@geologie.uni-halle.de
http://www.geologie.uni-halle.de/igw/mingeo/TAGUNG_DGK.htm

06. - 07.10.2005 **International Workshop on “Watching the Action: Powder Diffraction at non-ambient conditions” of the MPI for Solid State Research in Stuttgart.**

Kontakt: Prof. Dr. M. Jansen
J.Knapp@fkf.mpg.de
<http://www.fkf.mpg.de/xray/>

08. - 09.12.2005 **Seminar „Röntgendiffraktometrie“ der Technischen Akademie Wuppertal e.V. in Altdorf bei Nürnberg**

Kontakt: Technische Akademie Wuppertal e.V.
Herr Nordmann
42097 Wuppertal
Tel.: 0202-7495-251
Fax: 0202-7495-216
taw@taw.de
<http://www.taw.de>

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

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

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

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

Emailadresse:

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

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

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

www.dmg.uni-koeln.de

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

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

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

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

Die Homepage der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung DGKK

www.dgkk.de

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

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

Antrag auf Aufnahme in die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

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

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

Name : Vorname(n) :

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

Dienstanschrift : Geburtsdatum :(fakultativ)

Institut/Firma :

Straße : Ort : Land (falls≠D):

Telefon : Fax :

Privatanschrift : E-mail :

Straße : Telefon :

Ort : Land (falls≠D) :

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

Jahresbeitrag

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

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

Ich möchte Mitglied der nebenseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

Ort, Datum : Unterschrift :

Der Antrag wird befürwortet von folgenden DGK-Mitgliedern :

Name	Ort	Unterschrift
1
2

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

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

Bank : BLZ :

Kto.-Nr. :

Titel, Vorname und Name :

Ort, Datum : Unterschrift :

Arbeitskreise der DGK

- AK 1 [] Biologische Strukturen
- AK 2 [] Hochdruck-Kristallographie
- AK 3 [] Elektronenmikroskopie
- AK 4 [] Nichtkristalline und Partiiellkristalline Strukturen
- AK 5 [] Kristallphysik
- AK 6 [] Molekülverbindungen
- AK 7 [] Neutronenstreuung
- AK 8 [] Hochauflösende Streuung und Synchrotron-Strahlung
- AK 9 [] Theoretische Kristallographie
- AK 10 [] Mikroskopie
- AK 11 [] siehe AK 8
- AK 12 [] NMR-Spektroskopie
- AK 13 [] Pulverdiffraktometrie
- AK 14 [] Computational Crystallography
- AK 15 [] Mineralogische und Technische Kristallographie
- AK 16 [] Aperiodische Kristalle
- AK 17 [] Kristallographie in der Lehre
- AK 18 [] Oberflächen und Grenzflächen
- AK 19 [] Kristallchemie