Liebe DGK-Mitglieder,

zu Beginn des neuen Jahres übermittle ich Ihnen meine besten Wünsche für einen guten Verlauf desselben!

Vor uns steht die 11. Jahrestagung in Berlin, die nicht nur Neuwahlen des Vorstands bringen und das gewohnte Forum für den Austausch aktueller Forschungsergebnisse bieten wird, sondern auch helfen soll, die Diskussionen um die Zukunft der Kristallographie als Lehr- und Forschungsgebiet an den deutschen Hochschulen fortzuführen. Auf Initiative des DGK-Vorstands haben sich im vergangenen Jahr das Wissenschaftskolleg Kristallographie an die Erarbeitung einer Denkschrift und eine Gruppe Hochschullehrer an die Formulierung der „Berliner Erklärung“ (BE) gemacht (siehe S.5 dieses Heft). Beide Papiere verfolgen die Absicht, der schon längere Zeit beobachtbaren Tendenz entgegenzuwirken, Kristallographie-Professuren an deutschen Hochschulen überproportional zu streichen. Die bisherige Diskussion, an der sich dankenswerterweise auch viele Fachkollegen per E-Mail beteiligt haben, hat es dem Vorstand zweckmäßig erscheinen lassen, die Denkschrift als Mittel eigener Standortbestimmung weiter zu bearbeiten (während der 11. Jahrestagung) und die BE als Aufruf zum politischen Handeln an zuständige Entscheidungsträger in Bund und Ländern zu geben. Da glücklicherweise seit vergangenem Jahr die Broschüre „Kristallographie in Deutschland“ zur Verfügung steht (darüber wurde bereits berichtet), kann die BE kurz gehalten und Fachfremden das Gebiet über eine beigelegte Broschüre erläutert werden.

Eine kürzlich beschlossene wichtige Veränderung in der Begutachtungsprozedur der DFG, nämlich die Einführung von Fachkollegien, empfehle ich Ihrer besonderen Aufmerksamkeit. Für organisatorische Einzelheiten sei auf *http://www.dfg.de/wahlen2003/index.html* verwiesen. Die DGK hat Vorschlagsrecht, nun aber für 5 wählbare Kollegiaten gemeinsam mit fünf anderen Gesellschaften. Die Vertretung des Fachgebiets wird am Ende empfindlich vom Wahlverhalten der am Fach Interessierten abhängen. Zur Berliner Tagung können Sie sich über die Kandidatenvorschläge informieren, die bis zum 28.02.2003 vom Vorstand bei der DFG eingereicht werden müssen.

Im Rückblick auf das Jahr 2002 danke ich allen Mitgliedern des Vorstands, des Beirats, des Wissenschaftskollegs und der Preiskomitees sowie den Redakteuren der Mitteilungen und der Homepage für ihre engagierte Arbeit im vergangenen Jahr, die sie trotz allgemein steigender dienstlicher Belastungen auf sich genommen haben.

Herzliche Grüße und auf Wiedersehen in Berlin!

Ihr Peter Paufler
(Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
Vorwort des Vorsitzenden der DGK	3
Berliner Erklärung	5
Änderungsvorschlag des Statuts der DGK	7
Kristallographie in Deutschland	20
Berichte aus den Arbeitskreisen:	21
- 13. Tagung des AK Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen	22
- 2. Intensivkurs des AK Molekülverbindungen	24
- 6. Diskussionstreffen des AK NMR-Spektroskopie	25
- 3. Rigi-Workshop des AK Kristallphysik	26
Überlegungen zur Kostendämpfung bei wissenschaftlichen Zeitschriften	34
Das hätten sich die Braggs nicht träumen lassen ...	38
Ankündigungen	44
Gruppenreise nach Durban zur ECM 21	55
Personalia	57
Tagungen & Termine	60
Homepage	63
Aufnahmeformular	64

Ohne Kristallographie keine neuen Materialien und Medikamente!

Aufruf zur Förderung dieses interdisziplinären Faches an unseren Hochschulen

Wir Hochschullehrer aus den Fächern Chemie, Biochemie, Geowissenschaften, Materialwissenschaften und Physik

rufen die Verantwortlichen in Politik und Bildung eindringlich dazu auf, das Fach

Kristallographie

an unseren Hochschulen und Forschungsinstituten zu stärken.

Dieses Fach ist interdisziplinär wie kein anderes. In Lehre und Forschung wirken dort Chemiker, Biochemiker, Physiker, Mineralogen, Mathematiker, Metallkundler und Materialwissenschaftler in so großem Maß zusammen, dass an jeder deutschen Hochschule das Fachgebiet Kristallographie in einer der oben genannten Disziplinen vertreten sein muss, damit für alle gemeinsam das Wissen in Lehre, Forschung und Entwicklung präsent ist.

Z. B. beruht der rasante Fortschritt in den Biowissenschaften ganz wesentlich auf Entwicklungen in der Kristallographie: Die fundamental wichtige Aufklärung der Strukturen von Proteinen wäre ohne sie nicht möglich, und es zeichnet sich schon ab, dass man in Zukunft auch Proteine "bei der Arbeit" wird sichtbar machen können. Die gezielte Entwicklung hochwirksamer Medikamente ist Ergebnis solcher Bemühungen.

Die Entwicklung von Materialien für Nanotechnologie, Sensorik, Mikroelektronik, Optoelektronik und Optik, von neuen magnetischen, supraleitenden, keramischen, biomimetischen und anderen Werkstoffen ist ohne kristallographische Kenntnisse und Forschung ebenso undenkbar. Und das gilt entsprechend auch für das grundlegende Verständnis des Stoffverhaltens in vielen anderen Bereichen, z.B. in den Geowissenschaften bis hin zur Erklärung der Entstehung von Erdbeben auf struktureller Basis.

Trotzdem: das Fach Kristallographie, als kleines Fach, wird an einer deutschen Hochschule nach der anderen "wegrationalisiert" (s.Anlage), nicht aber bei unseren europäischen Nachbarn! Wie kann das sein, obschon sich alle Fachleute der Bedeutung des Faches bewusst sind? Auf Grund der geforderten Stellenkürzungen in den genannten Fachbereichen wurde die Kristallographie zum ersten Opfer der Einsparungen, da die Fachbereiche nicht auf ihre Kernfachgebiete verzichten wollten.

Inzwischen besteht die akute Gefahr eines verhängnisvollen Defizits an Hochschullehrern für Kristallographie und als Folge davon des wissenschaftlichen Nachwuchses. Die Entwicklung von Theorie und Methoden in der Kristallographie wird so in Deutschland abgebrochen. Forschung und Entwicklung für zukunftsweisende Hochtechnologien werden infolgedessen in Deutschland zunehmend zurückfallen, falls nicht dieser Prozess des Stellenabbaus in der Kristallographie gestoppt wird.

Für die Initiatoren des Aufrufs:
Berlin, den 10.12.2002

Peter Paufler
Deutsche Gesellschaft für Kristallographie
(Vorsitzender)

Wulf Depmeier
Nationalkomitee für Kristallographie
(Vorsitzender)

Kristallographie-Professoren an deutschen Hochschulen (Planstellen für die Lehre)

Universität	Vorhandene Stellen C4	C3/C2	Gestrichene Stellen (seit 1992)
Aachen	Heger	Roth	Arnold(C2)
Bayreuth	van Smaalen		
TU Berlin			Depmeier(C3), Weber(C3)
FU Berlin	Saenger	[Luger]	Ruban(C3),Bradaczek(C3),Wendling(C2)
HU Berlin	Neumann		
Bochum	Gies	Schmahl	
Bonn	Kirfel		Gebhardt(C3), Klapper(C3)
Braunschweig			Viswanathan(C3)
Bremen		R.X. Fischer	
Clausthal		[Follner], [Otto]	
Darmstadt	Fueß		Göttlicher(C2)
Dresden	Paufler	Skrotzki	Krämer(C2)
Erlangen	Magerl	Zimmermann, Hock	
Frankfurt	Winkler		Bartl(C2), Zigan(C2)
Freiburg	Benz	Krämer	
Gießen			Hinze(C3)
Göttingen	Kuhs	Suesse	
Hamburg	Bismayer	[Pohl], Rossmanith	Jarchow(C2), Eck(A14)
Hannover	Buhl		(Salje)(C3)
Heidelberg		Miletich	
Karlsruhe			Hümmer(C4), Klee(C3)
Kiel	Depmeier		Küppers(C3)
Köln	Bohatý	Mühlberg	
Leipzig	Bente		
Mainz		Böhm	
Marburg		[Buck]	Hafner(C4), Allmann(C3), W.Fischer(C3)
München	(Schulz)	Frey, Gille, Heckl, Moritz	
Münster			Hoffmann(C4)
Regensburg			von Philipsborn(C3)
Saarbrücken			K.Fischer(C4), Ehses(BAT1b)
Stuttgart		P. Keller	
Tübingen			Prandl(C4)
Würzburg		Neder	
Insges:	**C4 : 18**	**C3/2 : 23[-5]**	**C4: 5 C3: 14[+5] C2: 7 A14: 1 BAT1b: 1**
	41 [- 5] = 36		**28 [+ 5] = 33**

[...] mit KW-Vermerk

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie

Schriftführer: Prof. Dr. Reinhard Neder

Mineralogisches Institut der Universität Würzburg email: reinhard.neder@mail.uni-wuerzburg.de
Am Hubland, 97074 Würzburg Tel.: 0931/888 5430 Fax: 0931/888 4620

Sehr geehrte Mitglieder der DGK,

wie auf der Mitgliederversammlung in Kiel angekündigt, finden Sie auf den folgenden Seiten den Vorschlag des Vorstandes für ein überarbeitetes Statut der DGK. Im ersten Vorschlagstext im letzten Mitteilungsheft (Nr. 24) hatten sich einige Tippfehler eingeschlichen. Auch ist übersehen worden, dass die Reihung der Paragraphen bezüglich des Max-von-Laue Preises und der Carl-Hermann Medaille und der Paragraphen zu den Änderungsbestimmungen korrigiert werden muss. Daher haben wir hier noch einmal den kompletten Entwurf des Statuts der DGK abgedruckt. Über diesen Vorschlag soll auf der Mitgliederversammlung in Berlin abgestimmt werden. An den vorgesehenen Anpassungen der Satzungen des Max-von-Laue Preises und der Carl-Hermann Medaille haben sich keine weiteren Änderungswünsche ergeben, so dass diese, wie in Heft 24 abgedruckt, zur Abstimmung kommen werden.

Mit freundlichen Grüßen
Ihr
Reinhard Neder
(Schriftführer)

STATUT DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE (DGK)

(Stand: 14.03.2000, vorgesehene Änderungen sind doppelt unterstrichen)

Präambel

§1 Name, Sitz, Geschäftsjahr

§2 Zweck der Gesellschaft

§3 Mitgliedschaft

§4 Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis

§5 Rechte und Pflichten der Mitglieder

§6 Mitgliedsbeiträge und Finanzierung

§7 Organe der Gesellschaft

§8 Die Mitgliederversammlung

§9 Der Vorstand

§10 Der engere Vorstand

§11 Wahlen zum Vorstand

§12 Nationalkomitee für Kristallographie

§13 Der Beirat

§14 Arbeitskreise und Kommissionen

§15 Assoziierte Gesellschaften

§16 Max-von-Laue-Preis

§17 Carl-Hermann-Medaille

§18 Änderungen des Status und Auflösung der DGK

§19 Haftung

Präambel

Die Gründung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. (DGK) stellt die organisatorische Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Vereinigungen "*Arbeitsgemeinschaft Kristallographie*" (AGKr) und "*Vereinigung für Kristallographie*" (VFK) dar.

§1 Name, Sitz, Geschäftsjahr

(1) Die Gesellschaft trägt den Namen "Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e.V." DGK und ist im Vereinsregister eingetragen.

(2) Die DGK ist eine freiwillige Vereinigung kristallographisch tätiger oder an der Kristallographie interessierter Wissenschaftlerinnen/Wissenschaftler und anderer Personen und Einrichtungen zur Förderung der Kristallographie.

(3) Die DGK ist eine juristische Person und hat ihren Sitz in Berlin.

(4) Das Geschäftsjahr ist das Kalenderjahr.

§2 Zweck der Gesellschaft

(1) Die DGK verfolgt ausschließlich und unmittelbar gemeinnützige Zwecke im Sinne des Abschnitts "*Steuerbegünstigte Zwecke*" der Abgabenordnung. Zweck der DGK ist es, alle auf dem Gebiet der Kristallographie Tätigen zusammenzuführen, um den wissenschaftlichen Erfahrungs- und Gedankenaustausch sowie die Weiterbildung im nationalen und internationalen Rahmen zu pflegen und die Kristallographie in Lehre, Forschung und industrieller Praxis sowie in der Öffentlichkeit zu fördern.

(2) Ihre Zwecke sind dabei insbesondere:

- Die Förderung der kristallographischen Forschung,
- die Weiterentwicklung der Lehre der Kristallographie,
- die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses,
- die Pflege und Förderung wissenschaftlicher Publikationen aus allen Gebieten der Kristallographie,
- die Organisation von Diskussionstagungen, die möglichst jährlich veranstaltet werden sollen,
- die Pflege der Kontakte zu Nachbargesellschaften; dies soll nach Möglichkeit in Form von Assoziierungsvereinbarungen geschehen,
- die Vertretung der Kristallographie in den nationalen wissenschaftlichen Einrichtungen,
- die Vertretung Deutschlands in den internationalen Vereinigungen und Organisationen, soweit Interessen der Kristallographie in Deutschland berührt sind. Insbesondere ist die DGK Mitgliedskörperschaft (Adhering Body) der *International Union of Crystallography* (IUCr) und der *European Crystallographic Association* (ECA).

(3) Der Verein ist selbstlos tätig; er verfolgt nicht in erster Linie eigenwirtschaftliche Zwecke.

(4) Mittel der Gesellschaft dürfen nur für die satzungsmäßigen Zwecke verwendet werden. Die Mitglieder erhalten keine Zuwendungen aus Mitteln der Gesellschaft.

(5) Es darf keine Person oder Institution durch Ausgaben, die dem Zweck der Gesellschaft fremd sind, oder durch unverhältnismäßig hohe Vergütungen begünstigt werden.

§3 Mitgliedschaft

(1) Die DGK umfasst:

- Persönliche Mitglieder (natürliche Personen),
- unpersönliche Mitglieder,
- Ehrenmitglieder.

(1) Die persönliche Mitgliedschaft können erwerben: alle an der Kristallographie interessierten natürlichen Personen des In- und Auslandes ohne Rücksicht auf ihre Staatsangehörigkeit und ihren Wohnsitz.

(2) Die unpersönliche Mitgliedschaft können erwerben: Wissenschaftliche Institute, Einrichtungen an Hochschulen, Firmen, Bibliotheken, Schulen, Behörden, Vereinigungen, usw. mit Sitz im In- und Ausland.

(3) Zur Aufnahme bedarf es für beide Kategorien des Vorschlages oder der Befürwortung durch zwei persönliche Mitglieder der DGK. Aufnahmeanträge sind an die Vorsitzende/den Vorsitzenden der DGK zu richten. Sie müssen schriftlich erfolgen.

(4) Über die Aufnahme entscheidet der Vorstand der DGK. Die Entscheidung wird der Antragstellerin/dem Antragsteller mitgeteilt.

(5) Ehrenmitglieder können Personen werden, die sich um die DGK hervorragende Verdienste erworben haben. Über die Ernennung entscheidet die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit in geheimer Abstimmung.

(6) Die Mitgliedschaft erlischt durch Tod, Austritt, Streichung oder Ausschluss.

(7) Die Austrittserklärung wird zum Ende des Geschäftsjahres wirksam, in dem die schriftliche Erklärung bei der Vorsitzenden/beim Vorsitzenden der DGK eingegangen ist.

(8) Die Mitgliedschaft wird bei versäumter Beitragszahlung ein Jahr nach Fälligkeit gestrichen, sofern in dieser Zeit zweimal schriftlich ergebnislos gemahnt worden ist.

(9) Den Ausschluss eines Mitgliedes kann der Vorstand auf begründeten Antrag beschließen, wenn es schuldhaft in grober Weise die Interessen der DGK verletzt. Vor dem Ausschluss ist dem betreffenden Mitglied Gelegenheit zur Äußerung zu geben. Der Ausschluss wird erst nach Bestätigung durch die Mitgliederversammlung wirksam.

§4 Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis

Die DGK verpflichtet ihre Mitglieder auf die Einhaltung guter wissenschaftlicher Praxis. Hierzu gehört insbesondere, die grundlegenden Werte und Normen wissenschaftlicher Arbeit zu pflegen, im Handeln zu verwirklichen, für sie einzustehen und sie zu vermitteln, unter dem Gebot des wissenschaftlichen Kenntnisstandes zu arbeiten, alle Ergebnisse konsequent selbst

anzuzweifeln und strikte Ehrlichkeit im Hinblick auf die Beiträge von Partnern, Konkurrenten und Vorgängern zu wahren. Mitglieder, die gegen gute wissenschaftliche Praxis verstoßen, handeln den Interessen der DGK entgegen.

§5 Rechte und Pflichten der Mitglieder

(1) Alle persönlichen Mitglieder haben einfaches, gleiches, aktives und passives Wahl- und Stimmrecht. Das Gleiche gilt für Ehrenmitglieder.

(2) Unpersönliche Mitglieder ~~und die Ehrenmitglieder~~ haben nur einfaches aktives Wahl- und Stimmrecht. Sie können dieses durch ein von ihnen benanntes persönliches Mitglied der DGK mit einer zusätzlichen Stimme als Vertreterin/Vertreter wahrnehmen lassen.

(3) Die Mitglieder haben das Recht

- über die Tätigkeit der DGK, ihres Vorstandes sowie über wissenschaftliche Veranstaltungen informiert zu werden,
- an den Veranstaltungen der DGK und der Arbeit ihrer Gremien teilzunehmen und mitzuwirken,
- dem Vorstand Vorschläge zur Arbeit der DGK zu unterbreiten.

(4) Die Mitglieder haben die Pflicht

- das Statut der DGK anzuerkennen,
- ihren Mitgliedsbeitrag termingerecht zu zahlen.

§6 Mitgliedsbeiträge und Finanzierung

(1) Die DGK finanziert ihre Tätigkeit

- durch Beiträge der Mitglieder,
- durch Vermögen und dessen Erträge,
- durch Zuschüsse und Spenden.

(2) Die Höhe des Jahresbeitrages wird von der Mitgliederversammlung festgesetzt.

(3) Ehrenmitglieder sind von der Beitragspflicht befreit.

(4) Mitglieder assoziierter Gesellschaften und studentische Mitglieder zahlen in der Regel einen reduzierten Beitrag.

(5) Der Vorstand kann Beiträge ganz oder teilweise erlassen (z.B. bei Arbeitslosigkeit oder Erwerbsunfähigkeit).

(6) Der Beitrag der unpersönlichen Mitglieder wird zwischen diesen und dem Vorstand frei vereinbart und kann auch nichtfinanzieller Art sein (z.B. Dienstleistungen).

(7) Den Mitgliedern ist jährlich ein Kassenbericht vorzulegen.

§7 Organe der Gesellschaft

(1) Die Organe der DGK sind

- die Mitgliederversammlung,
- der Vorstand,
- der engere Vorstand,
- das Nationalkomitee,
- der Beirat.

§8 Die Mitgliederversammlung

(1) Die Mitgliederversammlung ist das höchste Organ der DGK und regelt alle für die Tätigkeit der DGK wesentlichen Fragen.

(2) Ordentliche Mitgliederversammlungen finden einmal jährlich im Allgemeinen in Verbindung mit der Jahrestagung der DGK statt. Die Einladung erfolgt brieflich durch die Vorsitzende/den Vorsitzenden mindestens vier Wochen vorher unter Bekanntgabe der Tagesordnung.

(3) Außerordentliche Mitgliederversammlungen finden statt

- auf Beschluss der Mitgliederversammlung,
- auf Beschluss des Vorstandes,
- auf schriftlichen Antrag von mindestens 5% der Mitglieder.

Eine außerordentliche Mitgliederversammlung ist nach dem Verfahren von Abs. (2) unter Angabe der Gründe zu einem Termin innerhalb von 3 Monaten nach dem Beschluss oder dem Eingang des Antrages einzuberufen, sofern kein späterer Termin beschlossen oder beantragt wurde.

(4) Die Mitgliederversammlung hat folgende Rechte und Aufgaben:

- Entgegennahme des Tätigkeitsberichtes des Vorstandes und des Kassenberichtes,
- Entlastung des Vorstandes,
- Wahl des Vorstandes und des Nationalkomitees,
- Beschlussfassung über die Höhe der Mitgliedsbeiträge für das kommende Geschäftsjahr,
- Abstimmung über eingebrachte Änderungen des Statutes,
- Entscheidung bei Beschwerden zur Aufnahme von Mitgliedern,
- Bestätigung des Ausschlusses von Mitgliedern,
- Ernennung von Ehrenmitgliedern,
- Bestätigung der Bildung bzw. Auflösung von Arbeitskreisen,
- Abstimmung über weitere Anträge, insbesondere über zukünftige Aufgaben und Aktivitäten der Gesellschaft,

- Festsetzung von Ort und Termin der Tagungen,
- Wahl von zwei Kassenprüferinnen/Kassenprüfern für das folgende Geschäftsjahr.

(5) Die Mitgliederversammlung ist beschlussfähig, wenn mindestens 10% der persönlichen Mitglieder anwesend sind. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so haben ihre Entschließungen einen empfehlenden Charakter.

(6) Die Mitgliederversammlung wird von der Vorsitzenden/vom Vorsitzenden, bei deren/dessen Verhinderung von der stellvertretenden Vorsitzenden/vom stellvertretenden Vorsitzenden, geleitet; sind beide verhindert, wählt die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit eine Versammlungsleiterin/einen Versammlungsleiter. Die Schriftführerin/der Schriftführer führt das Protokoll; bei ihrer/seiner Verhinderung wählt die Mitgliederversammlung mit einfacher Mehrheit eine Protokollführerin/einen Protokollführer.

(7) Durch Beschluss der Mitgliederversammlung kann die vom Vorstand festgelegte Tagesordnung geändert und ergänzt werden.

(8) Während der Behandlung eines Tagesordnungspunktes kann jedes Mitglied Anträge hierzu einbringen.

(9) Abstimmungen erfolgen durch Handaufheben; wenn 10% der erschienenen Mitglieder es verlangen, muss geheim abgestimmt werden. Ein Antrag gilt als angenommen, wenn mehr als 50% der abgegebenen Stimmen dafür sind.

(10) Beschlüsse sind unter Angabe des Ortes und der Zeit der Versammlung sowie der Abstimmungsergebnisse in einem Protokoll festzuhalten; das Protokoll wird von der Protokollführerin/vom Protokollführer und von der Versammlungsleiterin/dem Versammlungsleiter unterschrieben und allen Mitgliedern zugestellt.

§9 Der Vorstand

(1) Der Vorstand der DGK führt die Geschäfte und regelt die Tätigkeit der DGK in der Zeit zwischen den Mitgliederversammlungen. Er ist an die Beschlüsse und Entschließungen der Mitgliederversammlung gebunden und dieser rechenschaftspflichtig.

(2) Dem Vorstand der DGK gehören fünf stimmberechtigte Mitglieder an. Dies sind: die Vorsitzende/der Vorsitzende, die stellvertretende Vorsitzende/der stellvertretende Vorsitzende, die Schriftführerin/der Schriftführer, die Schatzmeisterin/der Schatzmeister und die Vorsitzende/der Vorsitzende des Nationalkomitees. Des Weiteren gehören dem Vorstand je eine Vertreterin/ein Vertreter der assoziierten Gesellschaften als nicht stimmberechtigte Mitglieder mit Rede- und Antragsrecht an.

(3) Die Aufgaben des Vorstandes sind:

- Erarbeitung von allgemeinen Grundsätzen,
- Bestellung von Kommissionen der DGK,
- Beschlüsse über Empfehlungen und Stellungnahmen zu Fragen, die die Kristallographinnen/Kristallographen in fachlicher, beruflicher und gesellschaftlicher Hinsicht betreffen.

- Auswahl von Vertreterinnen/Vertretern der DGK für in- und ausländische sowie internationale Gremien
- Bestellung von Vertreterinnen/Vertretern der DGK bei den assoziierten Gesellschaften,
- Vorschlag zur Beitragsordnung,
- Einberufung des Beirates,
- Vorbereitung der Jahrestagungen,
- Vorbereitung der Mitgliederversammlungen,
- Führung des Mitgliederverzeichnisses.

(4) Der Vorstand kann eine außerordentliche Mitgliederversammlung einberufen.

(5) Der Vorstand hat ein Vorschlagsrecht für die neu zu wählenden Mitglieder des Vorstandes.

(6) Beschlüssen des Vorstandes müssen mindestens drei seiner stimmberechtigten fünf Mitglieder zustimmen.

(7) Die Vorsitzende/der Vorsitzende bearbeitet die folgenden Aufgaben federführend:

- Durchführung der Beschlüsse der Mitgliederversammlung der DGK.
- Einberufung der Mitgliederversammlung unter Angabe der Tagesordnung und Einladung zu den wissenschaftlichen Tagungen im Einvernehmen mit der örtlichen Tagungsleiterin/dem örtlichen Tagungsleiter.
- Die Vorsitzende/der Vorsitzende kann unter Herbeiführung eines Vorstandsbeschlusses den Vorstandsmitgliedern Aufgaben übertragen.

(8) Die Schriftführerin/der Schriftführer führt die Protokolle der Mitgliederversammlung und der Sitzungen des Vorstandes.

(9) Die Schatzmeisterin/der Schatzmeister ist verantwortlich für die Vermögensverwaltung und den ordnungsgemäßen Zahlungsverkehr der DGK. Sie/er kontrolliert den Eingang der Mitgliedsbeiträge und ist zuständig für das Mahnwesen. Sie/er erstellt jährlich einen prüfungsfähigen Kassenbericht.

§10 Der engere Vorstand

(1) Der engere Vorstand ist der Vorstand im Sinne des §26 BGB. Er vertritt die DGK gegenüber Dritten im rechtsgeschäftlichen Verkehr, gegenüber Behörden und vor Gericht.

(2) Der engere Vorstand der DGK besteht aus der Vorsitzenden/dem Vorsitzenden und der stellvertretenden Vorsitzenden/dem stellvertretenden Vorsitzenden.

(3) Die Vorsitzende/der Vorsitzende und die stellvertretende Vorsitzende/der stellvertretende Vorsitzende sind einzelvertretungsberechtigt. Im Falle einer Meinungsverschiedenheit entscheidet die Vorsitzende/der Vorsitzende.

§11 Wahlen zum Vorstand

(1) Die Vorsitzende/der Vorsitzende, die stellvertretende Vorsitzende/der stellvertretende Vorsitzende, die Schriftführerin/der Schriftführer und die Schatzmeisterin/der Schatzmeister werden für eine Periode von 3 Jahren auf einer gemäß §8 Abs. (5) beschlussfähigen Mitgliederversammlung gewählt. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl gemäß Abs. (8) durchgeführt. Die Vorsitzende/der Vorsitzende des Nationalkomitees wird von den Mitgliedern des Nationalkomitees gemäß §12 Abs. (3) gewählt.

(2) Die Wahlen erfolgen geheim und schriftlich für die einzelnen Funktionen gesondert in der in Abs. (1) genannten Reihenfolge und werden von der Leiterin/vom Leiter der Mitgliederversammlung geleitet.

(3) Der Vorschlag des amtierenden Vorstandes für die Wahlen ist spätestens 24 Stunden vor der Wahl bekannt zu geben (z.B. durch Aushang bei der Jahrestagung). Weitere Wahlvorschläge aus dem Kreis der Mitglieder sind gleichfalls bekannt zu geben. Wahlvorschläge können auch noch während der Mitgliederversammlung eingebracht werden. Die Zustimmung der vorgeschlagenen Kandidaten zu ihrer Kandidatur muss vor der Wahlhandlung gesichert sein.

(4) Eine unmittelbare Wiederwahl der Vorsitzenden/des Vorsitzenden und der stellvertretenden Vorsitzenden/des stellvertretenden Vorsitzenden in ihre bisherige Funktion ist nicht zulässig.

(5) Gewählt ist, wer die absolute Mehrheit der abgegebenen Stimmen erhält.

(6) Erreicht keine Kandidatin/kein Kandidat die absolute Mehrheit, so findet in einem zweiten Wahlgang eine Stichwahl zwischen den beiden Kandidatinnen/Kandidaten mit der größten Stimmzahl statt. Gewählt ist, wer die größte Anzahl Stimmen erhält. Bei Stimmengleichheit wird die Stichwahl wiederholt. Im Fall nur einer Kandidatin/eines Kandidaten wird dieser in einem zweiten Wahlgang erneut zur Abstimmung gestellt und ist mit der relativen Mehrheit der Ja-Stimmen (gegenüber den Nein-Stimmen) gewählt.

(7) Führen die Wahlgänge zu keinem positiven Ergebnis, so kann die Wahl mit neuen Wahlvorschlägen aus dem Kreis der Mitgliederversammlung wiederholt werden. Die Mitgliederversammlung kann auch die Durchführung einer Briefwahl gemäß §11 Abs. (8) zur Besetzung der betreffenden Vorstandsfunktion beschließen. Zu dieser Briefwahl sollen auch Kandidatinnen/Kandidaten der bisherigen Wahlgänge erneut zur Wahl gestellt werden.

(8) Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl durchgeführt, für deren Durchführung die Vorsitzende/der Vorsitzende verantwortlich ist. Die Briefwahl ist geheim. Die Wahlunterlagen mit den Namen der auf der Mitgliederversammlung genannten und evtl. noch weiterer vorgeschlagener Kandidatinnen/Kandidaten werden den Mitgliedern brieflich innerhalb einer Frist von einem Monat zugesandt. Die Rückantworten mit der Stimmabgabe sind innerhalb einer Frist von 6 Wochen gerechnet vom Datum des Poststempels auf den Wahlunterlagen an die Vorsitzende/den Vorsitzenden zu schicken. Die Stimmen werden von zwei vom Vorstand beauftragten Mitgliedern innerhalb von 2 Wochen nach Einsendeschluss ausgezählt. Gewählt sind die Kandidatinnen/Kandidaten mit der relativen Mehrheit der Ja-Stimmen gegenüber den Nein-Stimmen. Bei Stimmengleichheit entscheiden die Auszählenden durch Los. Das Wahlergebnis wird allen Mitgliedern innerhalb von 4 Wochen nach der Auszählung brieflich bekannt gegeben.

(9) Die Amtsperiode der neu gewählten Mitglieder des Vorstandes beginnt mit dem Ende der Mitgliederversammlung, auf der sie gewählt wurden. Sie treten ihr Amt unmittelbar danach an. Bei einer Briefwahl beginnt die Amtsperiode nach Abschluss des Wahlvorgangs.

(10) Scheidet ein gewähltes Mitglied des Vorstandes vorzeitig aus, so sind zum frühest möglichen Zeitpunkt Nachwahlen durchzuführen. Der Vorstand kann durch Beschluss bis zur nächsten Mitgliederversammlung eine kommissarische Vertreterin/einen kommissarischen Vertreter für die Ausgeschiedene/den Ausgeschiedenen benennen. Diese/dieser besitzt die gleichen Rechte wie das ausgeschiedene Vorstandsmitglied. Als kommissarische Vorsitzende/ kommissarischer Vorsitzender kann nur ein gewähltes Mitglied des Vorstandes eingesetzt werden. Die Amtszeit der durch Nachwahlen bestimmten Vorstandsmitglieder erstreckt sich auf den Rest der Amtsperiode der Ausgeschiedenen/des Ausgeschiedenen. Für die durch Nachwahlen oder kommissarische Einsetzung neu bestimmten Vorstandsmitglieder ist eine einmalige unmittelbare Wiederwahl in ihre bisherige Funktion zulässig.

§12 Nationalkomitee für Kristallographie

(1) Aufgabe des Nationalkomitees für Kristallographie (NK) ist es, die Beziehung der DGK zur International Union of Crystallography (IUCr) und zur European Crystallographic Association (ECA) zu pflegen.

(2) Das Nationalkomitee besteht aus sechs gewählten Mitgliedern und der Vorsitzenden/dem Vorsitzenden der DGK.

(3) Alle drei Jahre werden jeweils drei Mitglieder des NK für eine Periode von 6 Jahren auf einer gemäß §8 Abs. (5) beschlussfähigen Mitgliederversammlung zusammen mit den Wahlen zum Vorstand der DGK gewählt, wobei wie in §11 ausgeführt zu verfahren ist. Eine unmittelbare Wiederwahl ist nicht zulässig. Ist die Mitgliederversammlung nicht beschlussfähig, so wird eine Briefwahl zusammen mit der Briefwahl zum Vorstand gemäß §11 (8) durchgeführt. Im Falle von 4 oder mehr Kandidaten erfolgt die Wahl aller 3 neuen NK-Mitglieder zusammen in einem Wahlgang durch geheime Abgabe von bis zu drei Namen. Gewählt sind die 3 Kandidatinnen/Kandidaten mit den meisten Stimmen. Bei Stimmengleichheit von 2 Kandidatinnen/Kandidaten mit den drittmeisten Stimmen erfolgt zwischen diesen beiden eine Stichwahl. Im Falle von nur 3 Kandidaten wird jede Kandidatin/jeder Kandidat einzeln zur Abstimmung gestellt. Gewählt ist, wer die relative Mehrheit der Ja-Stimmen (gegenüber den Nein-Stimmen) erhält. Die Ausführungen des §11 Abs. (7), (8), (9), (10) gelten sinngemäß.

(4) Das Nationalkomitee wählt seine Vorsitzende/seinen Vorsitzenden und die Vertreterinnen/den Vertreter in der ECA für eine Periode von 3 Jahren aus dem Kreis seiner Mitglieder auf der nach jeder Wahl stattfindenden konstituierenden Sitzung des Nationalkomitees mit einfacher Mehrheit. Bei Stimmengleichheit entscheidet die Stimme der Vorsitzenden/des Vorsitzenden der DGK.

§13 Der Beirat

(1) Dem Beirat gehören an:

- die Mitglieder des Nationalkomitees,

- die Sprecherinnen/Sprecher der Arbeitskreise.

(2) Der Beirat ist ein beratendes Gremium für alle Angelegenheiten der DGK.

(3) Der Beirat tritt einmal jährlich, in der Regel während der Jahrestagung der DGK, sowie bei Bedarf auch zusätzlich auf Einladung der Vorsitzenden/des Vorsitzenden gemeinsam mit dem Vorstand der DGK zusammen.

(4) Die Mitglieder des Beirates erhalten zu ihrer Information die Einladungen (nebst Tagesordnung) der Sitzungen des Vorstandes zugesandt. Sie können auf Einladung oder von sich aus (mit beratender Stimme) zu den Sitzungen des Vorstandes erscheinen, um ihre Angelegenheiten zur Beratung zu stellen.

§14 Arbeitskreise und Kommissionen

(1) In der DGK bestehen Arbeitskreise, die sich bestimmten Gebieten der Kristallographie widmen. Die Arbeitskreise sollen die wissenschaftliche Entwicklung auf ihrem Gebiet eigenverantwortlich vorantreiben; hierzu gehört die Organisation eigener Veranstaltungen. Für die Durchführung dieser Aufgaben kann den Arbeitskreisen auf Antrag vom Vorstand Unterstützung gewährt werden.

(2) Zur Bildung eines neuen Arbeitskreises ist ein formloser Antrag an den Vorstand notwendig, der von mindestens 20 Mitgliedern der Gesellschaft unterschrieben ist. Die Gründung eines Arbeitskreises bedarf der Zustimmung der Mitgliederversammlung auf Grund einer Empfehlung durch den Vorstand.

(3) DGK-Mitglieder bekunden durch die formlose schriftliche Erklärung gegenüber der Sprecherin/dem Sprecher ihr Interesse an einer Mitarbeit im Arbeitskreis (AK) und gelten damit als Mitglieder des AKs. Mitgliedsbeiträge werden dafür nicht erhoben.

(4) Die DGK-Mitglieder eines Arbeitskreises wählen die Sprecherin/den Sprecher in geheimer Wahl für eine Amtszeit von maximal 3 Jahren. Wiederwahl ist möglich.

(5) Die Sprecherinnen/ Sprecher der Arbeitskreise sind gegenüber den Organen der DGK berichtspflichtig. Auf Grund dieser Berichte empfiehlt der Vorstand der Mitgliederversammlung, Arbeitskreise weiter bestehen zu lassen oder aufzulösen. Die Auflösung bedarf der Zustimmung der Mitgliederversammlung.

(6) Ein Mitglied kann mehreren Arbeitskreisen angehören.

(7) Für spezielle Aufgaben von begrenzter Dauer können vom Vorstand der DGK Kommissionen eingesetzt werden.

(8) Mit verwandten wissenschaftlichen Gesellschaften können gemeinsame Arbeitskreise gebildet werden. Einzelheiten, insbesondere hinsichtlich der Mitgliedschaft und der Wahlen der Sprecherinnen/Sprecher, werden in entsprechenden Vereinbarungen geregelt.

§15 Assoziierte Gesellschaften

(1) Der Kontakt zu verwandten wissenschaftlichen Gesellschaften soll nach Möglichkeit in Form von Assoziierungsvereinbarungen hergestellt werden, die gegenseitige Vertretung in den Vorständen oder entsprechenden Gremien vorsehen.

(2) Die Vertreterinnen/Vertreter der DGK bei den assoziierten Gesellschaften werden vom Vorstand für 3 Jahre benannt. Die Art und Weise, in der die assoziierten Gesellschaften ihre Vertreterin/ihren Vertreter für den Vorstand der DGK benennen, bleibt der jeweiligen Gesellschaft überlassen. Die Amtszeit der Vertreterinnen/Vertreter der assoziierten Gesellschaften wird durch Vereinbarung geregelt.

§16 Max-von-Laue-Preis

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie vergibt an junge Wissenschaftlerinnen und junge Wissenschaftler für herausragende wissenschaftliche Leistungen den Max-von-Laue-Preis. Einzelheiten werden durch eine Preissatzung geregelt.

§17 Carl-Hermann-Medaille

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie verleiht an herausragende Forscherpersönlichkeiten die Carl-Hermann-Medaille. Einzelheiten werden durch eine Satzung geregelt.

§18 Änderung des Statutes und Auflösung der DGK

(1) Änderungen des Statutes können nach vorhergehender Beratung im Vorstand auf der Mitgliederversammlung beschlossen werden, wenn dies in der Tagesordnung vermerkt und der Wortlaut der geplanten Änderungen mit der Einladung bekannt gegeben worden ist. Anträge auf Änderung des Statutes müssen den Mitgliedern mindestens 4 Wochen vor der entscheidenden Versammlung bekannt gegeben werden.

(2) Für eine Änderung des Statutes ist das positive Votum von 2/3 der Anwesenden einer beschlussfähigen Mitgliederversammlung erforderlich.

(3) Die Auflösung der DGK kann erfolgen, wenn sie vom Vorstand beraten und mit mindestens 2/3 der stimmberechtigten Mitglieder auf einer beschlussfähigen Mitgliederversammlung beschlossen wird. Der geplante Beschluss wird nur wirksam, wenn bei einer anschließenden schriftlichen Befragung entsprechend §11 Abs. (8) mehr als 50% der persönlichen Mitglieder zustimmen.

(4) Bei der Auflösung oder Aufhebung der Gesellschaft oder bei Wegfall ihres bisherigen Zweckes fällt das Vermögen der Gesellschaft nach Zustimmung des zuständigen Finanzamtes an eine Körperschaft des öffentlichen Rechts oder eine andere steuerbegünstigte Körperschaft zwecks Verwendung für die Förderung von Wissenschaft und Forschung.

§19 Haftung

(1) Für Schäden, die Dritten durch das Handeln der Organe oder Vertreter der DGK in Ausübung ihrer Tätigkeit für die DGK entstehen, ist diese nach den Vorschriften des Zivilrechts verantwortlich. Ein Schadenersatzanspruch richtet sich gegen die DGK.

(2) Die DGK haftet höchstens mit ihrem Vermögen. Die Mitglieder haften nicht mit ihrem persönlichen Vermögen für Ansprüche gegen die DGK.

(3) Mitglieder des Vorstandes oder andere Bevollmächtigte, die ihre Befugnisse überschreiten, sind der DGK für einen dadurch entstandenen Schaden persönlich verantwortlich.

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

DIE XXIII. (10.) TAGUNG DES ARBEITSKREISES NICHTKRISTALLINE UND PARTIELLKRISTALLINE STRUKTUREN

Seine XXIII. (10.) Arbeitstagung führte der Arbeitskreis *Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen* vom 09. bis 12. September 2002 im angenehmen Ambiente des Steigenberger MAXX Hotels in Jena, im schönen Thüringer Saaletal gelegen, durch.

An der Arbeitskreistagung nahmen insgesamt sechsunddreißig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten - Physiker, Chemiker, Physikochemiker, Glaschemiker, Kristallographen, Mineralogen, Materialwissenschaftler, Glastechnologen - teil. Es wurden einunddreißig Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit - auch zu anschließenden 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.

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

Struktur und Kinetik der Keimbildung und Kristallisation in nichtkristallinen Materialien

Insbesondere wurden dabei folgende Teilkomplexe berücksichtigt:

- Strukturelle dynamische und statische Inhomogenitäten in nichtkristallinen Materialien auf verschiedenen Zeit- und Längenskalen.
- Strukturelle und dynamische Untersuchungen zum Glasübergang.
- Strukturbildungen in unterkühlten Schmelzen verschiedener Materialien - vor allem Glas- und Keimbildungsprozesse.
- Keimbildung und Kristallisation aus und in festen nichtkristallinen Materialien unter Berücksichtigung unterschiedlicher Zeitskalen und resultierender Mittelwerte.
- Molekulardynamische Modellierungen zu dynamischen und statischen Strukturbildungen in nichtkristallinen Materialien.
- Kritische Wertungen bisheriger kinetischer und thermodynamischer Theorien der Keimbildungsprozesse.
- Ansätze zu strukturellen Theorien von Keimbildungen aus nichtkristallinen Materialien auf der Basis topologischer Relationen und Restriktionen.

Die kontemporäre Keimbildungstheorie - bisher fast ausschließlich eine Domäne der Thermodynamiker - kann die strukturellen Probleme der Keimbildung, wie sie für die Erklärung von nanostrukturellen Prozessen u.ä. erforderlich ist, nicht lösen. So befassten sich auch nur wenige Vorträge direkt mit strukturellen Keimbildungsprozessen, da deren Untersuchungen und Charakterisierungen noch nicht wissenschaftliches Allgemeingut ist.

Es konnten jedoch aufgrund der gegenwärtigen Situation der Keimbildungstheorien sowie anhand der Inhalte der Vorträge am Ende der Arbeitskreistagung einige Schlussfolgerungen gezogen werden, um Keimbildungsprozesse aus und in nichtkristallinen Materialien sowohl strukturell als auch dynamisch besser erfassen zu können:

- Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien sind sowohl hinsichtlich der Strukturen als auch ihres Zustandes und der inhärenten Dynamik zu charakterisieren. Dazu ist einerseits zwischen diesen Beschreibungen zu differenzieren und andererseits deren gegenseitige Bedingtheit zu erfassen.
- Keimbildungsprozesse sind auf verschiedenen Längenskalen zu betrachten, wobei der intermediäre Strukturbereich eine dominierende Rolle ausübt. Es ist außerdem notwendig, sowohl den Nahbereich der Atome mit den Bindungen u.ä. als auch Mittelwerte wie die Korrelationsfunktionen und Korrelationslängen zu berücksichtigen.
- Die unterschiedlichen Zeitskalen der Keimbildungsprozesse sind wesentlich für dieselben und bezüglich der Dynamik und des Transportes der Baugruppen u.a. zu untersuchen. Ihr gegenseitig bedingter Einfluss - auch über zeitliche und räumliche Mittelwerte usw., - muss herausgearbeitet werden.
- Weiterhin gilt es, das Problem der Vermittlung zwischen Einzelschritt, Kooperativität und Kollektivität der Dynamik auf den verschiedenen Zeit- und Längenskalen zu klären, was vor allem eine Zusammenführung von Molekulardynamik - Thermodynamik - Kinetik auf diesen Skalen betrifft.
- Bei molekulardynamischen Prozessen zur Generierung von Keimbildungsprozessen bestehen Probleme vor allem darin, effiziente Potentiale für die Prozesse zu finden als auch die eng begrenzte Zeitskala auf realistische Bereiche zu erweitern.
- Strukturelle Probleme der Keimbildungsprozesse wie Charakterisierung und Beschreibung von Keimen mittels geometrischer, topologischer und raumausfüllender Restriktionen, der Wirkung und Eindeutigkeit von Raumgruppen und ihren Darstellungen in kleinen Strukturbereichen stehen ebenfalls noch aus.

Es ließen sich noch weitere Problemstellungen zu den Keimbildungsprozessen auflisten, aber die aufgeführten reichen aus, noch viele Arbeitskreistagungen mit innovativen Inhalten abhalten zu können. Das generelle Thema des Arbeitskreises *Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien* wird somit noch viele Jahre aktuell bleiben.

Das wissenschaftsorganisatorische Anliegen des Arbeitskreises, Forschergruppen zum Thema *Strukturbildungsprozesse in nichtkristallinen Materialien* zu etablieren, um diese auf Antrag von der DFG fördern zu lassen, konnte nicht realisiert werden, da kein Einverständnis dazu unter den Anwesenden erlangt werden konnte.

Ein wesentliches Anliegen sieht der Arbeitskreis darin, wieder mehr junge Wissenschaftler zur Teilnahme an den Arbeitskreistagungen zu gewinnen.

Die XXIV. Arbeitskreistagung wird vom 08. bis 11. September 2003 - traditionell im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf - zum Thema **Relaxations- und Alterungsprozesse auf verschiedenen Zeitskalen in nichtkristallinen Materialien** stattfinden.

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

Bernd Müller, Jena (Sprecher)

2. INTENSIVKURS DES AK MOLEKÜLVERBINDUNGEN -GRUNDLAGEN DER EINKRISTALLSTRUKTURANALYSE.

vom 09. bis 13. September 2002 im ehemaligen Zisterzienserkloster Hardehausen

Bereits zum zweiten Mal haben der Arbeitskreis Chemische Kristallographie (ChemKrist) der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie zusammen mit dem Arbeitskreis Molekülverbindungen der DGK eine Sommerschule veranstaltet, um dem wissenschaftlichen Nachwuchs vorwiegend präparativ arbeitender Arbeitskreise, aber auch interessierten Laboranten und Technikern, die Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse nahe zubringen.

Die gegenüber dem Jahr 2000 um einen Tag verlängerte Sommerschule fand vom 09. bis 13. September 2002, wiederum im ehemaligen Zisterzienserkloster Hardehausen südlich von Paderborn statt.

Trotz des erneut großen Andrangs mußte die Zahl der Teilnehmer auf 35 begrenzt werden, da einerseits der zur Verfügung stehende Platz beschränkt ist, vor allem aber Wert gelegt wird auf kleine Übungsgruppen mit individueller Betreuung durch die Tutoren. Als Tutoren fungierten U. Flörke (Paderborn) sowie die fünf Vortragenden, die auch schon im Jahr 2000 dabei waren. M. Bolte, Frankfurt/Main; U. Englert, Aachen; P. Jones, Braunschweig; C.W. Lehmann, Mülheim/Ruhr und W. Massa, Marburg, hatten sich alle bereit erklärt noch einmal fünf Tage ihrer vorlesungsfreien Zeit zu opfern.

Die Erfahrungen, die bei der ersten Sommerschule gesammelt wurden und die Anregungen aus dem Kreis der Teilnehmer fanden Eingang in, ein gegenüber dem ersten Mal leicht verändertes Programm, vor allem wurde den Übungen deutlich mehr Zeit eingeräumt. Durch den regelmäßigen Wechsel zwischen Vorlesung und Übungen in Sechser-Gruppen wurde der sehr große Stoffumfang (für eine detaillierte Beschreibung siehe diese Mitteilungen, Heft 21, November 2000) in begreifbare Abschnitte zerlegt. Die Übungen waren so angelegt, daß die Lösungen in den Gruppen allein mit Papier, Bleistift und Taschenrechner erarbeitet werden konnten. Das ausmultiplizieren einer (3×3)-Karle-Hauptman-Determinante sollte künftig aber in den Bereich des mathematischen Gruselkabinetts verbannt werden. Für diejenigen Teilnehmer, die am Abend noch das Bedürfnis zu weiterer Betätigung verspürten, hatte Peter Jones einige Problemstrukturen mitgebracht, die vor Ort am PC bearbeitet werden konnten. Neu hinzugekommen war außerdem eine Abendveranstaltung, die den Teilnehmern bei entsprechendem Interesse die Funktionsweise der Cambridge Structural Database nahe brachte.

Ansonsten wurden die Abende in mehr geselliger Runde verbracht. Bei der Wanderung zum nahen Wisentgehege entgingen alle nur knapp dem heranziehenden Regen, beabsichtigter weise feucht hingegen gestaltete sich der Kegelabend. Besonderer Dank muss auch diesmal den Mitarbeiter der Landvolkshochschule Hardehausen gelten, die für einen reibungslosen Ablauf der Sommerschule sorgten. Gleichfalls Dank gebührt den Sponsoren und der DGK, durch deren finanzielle Unterstützung die Teilnahmegebühren erfreulich niedrig gehalten werden konnten und damit vor allem dem wissenschaftlichen Nachwuchs die Teilnahme vereinfacht wurde.

Christian W. Lehmann, Mülheim an der Ruhr

6. Diskussionstreffen des Arbeitskreises NMR Spektroskopie

am 25. September 2002 in Bochum

Am 25. September 2002 fand das diesjährige 6. Diskussions- und Nutzertreffen des Arbeitskreises NMR Spektroskopie im Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum statt. Leider war die diesjährige Teilnehmerzahl sehr gering: Insgesamt waren nur 5 Arbeitskreismitglieder (Hannover, Darmstadt, Bochum) präsent. Aus dem Grunde wurde auch der vorgesehene Workshop abgesagt, da sich hier nur zwei Teilnehmer angemeldet hatten.

Der Grund für die geringe Besucherzahl ist zum einen darin zu suchen, dass immer weniger Doktoranden und Diplomanden der Mineralogie / Geowissenschaften eine kristallographische Forschungsrichtung anstreben. Ein weiterer wichtiger Grund liegt aber auch darin, dass seit Mai 2001 für die Betreuung des „Geowissenschaftlichen NMR“ kein angestellter Wissenschaftler mehr zur Verfügung steht und die Betreuung übergangsweise durch Sandra Grabowski, chemisch-technische Assistentin, gewährleistet wird. Dadurch wurde zwar die Durchführung von Routinemessungen und die Wartung des Gerätes hervorragend gewährleistet, womit auch gleichzeitig an dieser Stelle mein Dank an Frau Grabowski verbunden ist. Bei komplexen wissenschaftlichen Fragestellungen oder Experimenten konnte allerdings auch sie nicht weiterhelfen, so dass dadurch bedingt viele der Projektgruppen Ihre Messzeiten in Bochum im letzten Jahr nicht wahrnahmen.

Ab Januar nächsten Jahres werde ich daher die Betreuung des Spektrometers vor Ort übernehmen und hoffe dadurch auch wieder auf eine verstärkte Mitarbeit der Arbeitskreismitglieder in Workshops, auf den Tagungen und in wissenschaftlichen Projekten, bei denen Festkörper NMR Spektroskopie eingesetzt werden soll.

Der nächste Workshop des Arbeitskreises soll am 10. und 11. April 2003 stattfinden. Außerdem möchte ich noch auf den DMG Shortcourse hinweisen, der zusammen mit der DGK vom 10. bis 13. Juni stattfindet (s. Ankündigungen).

Michael Fechtelkord, Hannover

CRYSTAL PHYSICS
MEASURING, CALCULATING AND PREDICTING PHYSICAL PROPERTIES OF CRYSTALS

3. Rigi-Workshop vom 1. bis 5. August 2002

Der diesjährige Workshop des Arbeitskreises Kristallphysik fand wieder einmal auf der Rigi statt, einem Berg im Alpenvorland oberhalb des Vierwaldstätter Sees. Es gab 15 eingeladene Vorträge (von denen 2 leider ausfielen) aus Deutschland, der Schweiz, England, Italien und den USA und 12 Posterbeiträge von Teilnehmern, 6 davon zusätzlich als Kurzvortrag präsentiert.

Thema waren die Beziehungen zwischen Kristallstruktur und den physikalischen und chemischen Eigenschaften von Kristallen. Diese Beziehungen zu verstehen, und das möglichst so gut, dass Eigenschaften aus der Struktur vorhersagbar sind, ist eine der wichtigsten Aufgaben und größten Herausforderungen der Festkörperwissenschaften. Die zunehmende Komplexität technologischer Anforderungen benötigt eine immer breitere Palette verschiedener Materialien mit genau definierten (und am liebsten maßgeschneiderten) physikalischen und chemischen Eigenschaften. Aber immer noch sind wesentliche Fragen offen, obwohl die ersten theoretischen Modellvorstellungen von Kristallen schon mehr als 100 Jahre alt sind. Auch auf experimenteller Seite bestehen erhebliche Defizite, wie einige Zahlenbeispiele eindrucksvoll belegten. So gibt es mehr als 300 000 bekannte Kristallstrukturen, aber vollständige Datensätze elastischer Konstanten nur von etwa 1400 verschiedenen Kristallarten, und piezoelektrische Daten sogar nur von ca. 100 Kristallarten.

Anliegen des Workshops war es, Wissenschaftler aus (i) Anwendung, (ii) Experiment und (iii) Theorie zusammenzubringen, und das aus den Fachrichtungen Physik, Chemie, Materialwissenschaften und Geowissenschaften. Konkret hieß das, Wissenschaftler mit anwendungsnahen Forschungsgebieten und aus der industriellen Entwicklung und andererseits Experimentalisten und Theoretiker, die physikalische Eigenschaften von Kristallen messen und berechnen. Das bestimmte denn auch das Programm des Workshops.

i) Sicht der Anwender

Im ersten Teil gaben Geowissenschaftler, Materialwissenschaftler und ein Entwicklungsingenieur einen Überblick über ihr jeweiliges Spezialgebiet. Sie zeigten auf, welche Daten physikalischer Eigenschaften sie brauchen und wozu oder berichteten von neuen Materialien und ihren Möglichkeiten.

Geophysiker betrachten die Erde als Ganzes, mit Schwerpunkt auf den Dingen, die für die Menschen von besonderer Bedeutung sind wie Erbeben, Vulkanismus oder Erdmagnetfeld. Die Entstehungsorte dieser Phänomene liegen tief im Erdinneren. Alle Kenntnis über das Innere kommt jedoch aus seismischen und magnetischen Messungen von außen. Die Interpretation dieser Messungen erfordert Materialdaten bei den Drucken und Temperaturen, die in der Tiefe herrschen. Seismische Daten z.B. liefern ein Dichteprofil der Erde; umsetzen in ein Stoffmodell (Mineralphasen) lässt es sich nur mit Hilfe von thermoelastischen Daten in einem

sehr großem Temperatur- und Druckbereich. Solche Daten liegen bisher nur für wenige Stoffe vor. Modelle zum Ursprung und der zeitlichen Entwicklung des Erdmagnetfeldes erfordern die Kenntnis der elektrischen und magnetischen Eigenschaften von Metallen und Metallschmelzen unter extremen Bedingungen. Auch hier fehlen die Messdaten.

Die Sicht der Materialwissenschaften wurde an einem Hochtechnologie-Beispiel besonders vertieft, nämlich der Entwicklung von piezoelektrischen Bauelementen im Radiofrequenz- bis Mikrowellenbereich für kommerzielle und militärische Anwendungen. Die hier genutzten physikalischen Phänomene sind akustische Oberflächenwellen (SAW) z.B. in Mikrowellenfiltern oder elastische Volumenwellen in Präzisions-Resonatoren für hohe Frequenzen (kHz, GHz). Extreme Betriebsbedingungen wie Eis, Regen, Kälte, Hitze (von der Antarktis bis in die Sahara) stellen hohe Anforderungen. Die Entwicklung erfordert Kenntnis der dielektrischen, piezoelektrischen und elastischen Eigenschaften und ihrer Wechselwirkung, aber nicht nur der linearen Materialkonstanten unter Umgebungsbedingungen, sondern auch deren Temperatur- und Druckabhängigkeit und z.T. auch nichtlineare Effekte. Mit den Daten der linearen Eigenschaften allein kann man nicht einmal eine genau gehende Armbanduhr bauen. Fazit war eine Wunschliste an die Experimentatoren, sowohl in Bezug auf genauere und umfangreichere piezoelektrische und elastische Messdaten bekannter Kristallarten (insbesondere Effekte höherer Ordnung in einem größeren Temperaturbereich) als auch auf die Züchtung neuer vielversprechender Materialien in solcher Größe und Qualität, dass die benötigten physikalischen Messungen überhaupt möglich sind.

Als neue Materialklasse mit ganz ungewöhnlichen physikalischen Eigenschaften wurden die Quasikristalle vorgestellt. Ihnen fehlt die 3-dimensionale Translationssymmetrie. Statt dessen wird die Struktur beschrieben als Raumbedeckung durch zwei Einheitszellen mit „matching rules“ und Dekorieren dieser Raumteilung mit Atomen. Das hat u.a. zur Konsequenz, dass lokale atomare Gruppen dichter sein können als die Kugelpackung. Seit die Züchtung großer Quasikristalle möglich ist (1mm bis fingergroß), können auch physikalische Eigenschaften gemessen werden. Insbesondere die elektrische Leitfähigkeit erwies sich als ganz anders als bei Metallkristallen, obwohl Quasikristalle intermetallische Phasen sind. Auch die thermische Leitfähigkeit ist nicht metallisch, sondern ähnlich wie bei Keramik. Technische Anwendungen sind z.B. harte und korrosionsbeständige Oberflächen und Wärmeisolationsbeschichtungen.

ii) Sicht der Experimentatoren

In diesem Teil stellten die Experimentatoren vor, was sie können. Hier ging es um Meßmethoden und ihre Einsatzbereiche (Druck, Temperatur), die erreichbaren Genauigkeiten und die benötigten Probengrößen. Schwerpunkt waren (a) Ultraschall-Methoden, (b) Röntgen-Beugung und (c) elektrische Messverfahren.

a) Messen mit Ultraschall (US) ist die Methode der Wahl, um elastische Konstanten zu bestimmen. Hier wurden gleich drei verschiedene Varianten vorgestellt :

   1) Konventionelle US-Interferometrie in Reflektion oder Transmission. Hier wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Ultraschallwellen fester Frequenz in großen (≥ 1 cm^3) Kristallen oder Pulverpresslingen gemessen. Diese Methode liefert Druck- und Temperaturabhängigkeit von elastischen Konstanten in hoher Qualität (bei Pulver nur isotrope Mittelwerte). Eingebaut in eine große Vielstempel-Presse am Synchrotron kann gleichzeitig die Struktur bestimmt werden. Die vorgestellte Anlage in Stony Brook erreicht dabei bis $p \sim 22$ GPa und $T > 1600$ K. Messergebnisse an Mantelmineralen (elastische Konstanten, Dichte, thermische Ausdehnung in diesem

Druck-und Temperaturbereich) wurden mit seismischen Daten aus der Erde korreliert.

2) Brillouin-Spektroskopie ist Lichtstreuung (fokussierter LASER-Strahl) an elastischen Wellen (Phononen) im Kristall; mit einem Fabry-Perot-Interferometer wird die Frequenzverschiebung des inelastisch gestreuten Lichtes gemessen. Diese Methode hat den Vorteil, daß nur sehr kleine Proben benötigt werden (bis herunter zu einigen 10 μm), allerdings um den Preis geringerer Genauigkeit (~ 1%) als US-Methoden an großen Kristallen (0,1%). Sie ist deshalb besonders geeignet für Keramiken (einkristalline Bereiche sehr klein) und überhaupt für Hochdruck-Messungen in Diamantstempelzellen. Beispiel: TiO_2-Probe 20×30 μm^2 mit soft mode bei ~ 14 GPa.

3) Resonant ultrasound spectroscopy (RUS). Hier wird ein kurzer breitbandiger US-Impuls auf die Probe gegeben und die Resonanzen spektroskopiert. RUS misst die elastische Eigenschwingungsmoden (z.B. 20-90 Stück) von Kristallen regelmäßiger Form (Parallelepipeden, Zylindern, Kugeln, etc.), die um 2-3 Größenordnungen kleiner sein dürfen als bei den konventionellen Methoden. Weitere Vorteile sind, auch im Hinblick auf Hochtemperaturmessungen, dass kein Kleber zwischen Probe und "transducer" gebraucht wird und dass alle Konstanten an derselben Probe gemessen werden, was einen geringeren Präparationsaufwand und hohe Relativgenauigkeit bedeutet. Die nahezu freien Randbedingungen ermöglichen darüber hinaus eine hohe Absolutgenauigkeit. Theorie und Auswertung sind dafür sehr aufwendig und man braucht Startwerte für c_{ijkl}. Beispiele wurden gezeigt u.a. für einen Scandium-Einkristall (hexagonal) und den Quasikristall $Ti_{41.5}Zr_{41.5}Ni_{17}$ und seinen Approximanten $Ti_{44}Zr_{44}Ni_{16}$.

b) Als ungewöhnlichste Methode zur Bestimmung elastischer Konstanten entpuppte sich die Röntgen-Beugung mit Synchrotron-Strahlung, die man normalerweise mit Kristallstrukturanalyse verbindet. Diamantstempelzellen erlauben Drücke von mehreren 100 GPa und Temperaturen über 7000 K. Das umfasst alle Bedingungen des Erdinneren bis zum Mittelpunkt. Der Preis dafür ist ein winzig kleines Probenvolumen, das außer Röntgen-Beugung (bzw. Lichtstreuung) sonst nichts zulässt. Außerdem werden die mechanischen Spannungsfelder bei hohen Drücken stark anisotrop. Diese Komplikation kann jedoch auch als Vorteil genutzt werden. Ein Vortrag demonstrierte, wie durch Messen der Spannungsfelder σ_{ij} elastische Konstanten bestimmbar sind, und damit die Druckabhängigkeit der c_{ijkl} bis herauf zu ~ 230 GPa (bei Raumtemperatur).

c) Elektrische Messverfahren zur Piezoelektrizität und Elektrostriktion. Zunächst kam eine Einführung in elektrostriktive Effekte und elektromechanische Eigenschaften, d.h. in die Tensor-Beziehungen zwischen dielektrischen, piezoelektrischen, elastischen und elektrooptischen Konstanten und die physikalischen Phänomene, die jeweils beobachtet werden. Dann folgte ein Einblick in den Stand der Technik der gängigen Messverfahren für die linearen und quadratischen Effekte und eine detaillierte Erläuterung ihrer Leistungsfähigkeit, aber auch ihrer Schwierigkeiten. Gemessen wird, in irgendeiner Form, letztlich der Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und Dickenänderung des Kristalls. Das geschieht entweder lichtoptisch (Michelson-Interferometer) oder kapazitiv/dynamisch. Die Schwierigkeit liegt in der Kleinheit dieser Dickenänderung, die bei der quadratischen Elektrostriktion nur $\Delta L \sim 2 \cdot 10^{-3}$ Å beträgt. Dennoch ist das mit einem 100 MHz Oszillator messbar.

So ist es vielleicht nicht ganz überraschend, dass auch 120 Jahre nach den ersten systematischen Untersuchungen elektromechanischer Eigenschaften von Kristallen durch Pierre und

Jacques Curie bis heute von so wenigen Kristallarten die piezoelektrischen Eigenschaften gut bekannt sind.

iii) Sicht der Theorie

Kann die Theorie fehlende Messdaten ersatzweise berechnen? Vier Vorträge nahmen sich dieses Themenbereiches an, nämlich der Aufgabe, physikalische Eigenschaften, insbesondere elastische und piezoelektrische Konstanten, aus der Kristallstruktur zu berechnen. Es gab eine gründliche Einführung in alle wichtigen Ideen und Modellvorstellungen der Simulationsrechnungen, von den physikalischen Grundkonzepten über die mathematischen Näherungen bis zur jeweiligen Eignung für konkrete Fragestellungen. Da ging es um Gitterdynamik und Molekulardynamik, um Interatomare Potentiale und Dichtefunktionaltheorie, um Krümmungen der Energiefläche und lokale Elektronendichten. Je nachdem, welche Näherungen im Detail benutzt und welche Wechselwirkungen berücksichtigt wurden, waren die Rechnungen bei T=0 gut oder eher bei höheren Temperaturen, lieferten elektronische Bandstrukturen und Elektronendichteverteilungen bei hohem Druck oder elastische Konstanten und Phononendispersionen, Dielektrizitätskonstanten und ihre Frequenzabhängigkeit, thermische Ausdehnung und Wärmekapazitäten. Eine Reihe von Beispielen demonstrierten die Leistungsfähigkeit der Programme an Rechenergebnissen von beeindruckender Qualität im Vergleich mit experimentellen Daten. Elastische Konstanten lassen sich inzwischen auf ~20% genau berechnen (mit empirischen Potentialen) und mit höherem Rechenaufwand (ab initio plane waves oder periodic LCAO) sogar auf ~10%. Ähnliches gilt für piezoelektrische Konstanten, die in neuerer Zeit überhaupt zum ersten Mal erfolgreich berechnet wurden.

Die Posterbeiträge und Kurzvorträge vertieften viele der Themen und brachten Beispiele aus verschiedenen Bereichen der Materialforschung. Der Bogen spannte sich von Struktur- und Texturuntersuchungen mit Neutronen-Beugung, Synchrotron-Strahlung und Elektronenmikroskopie über Messungen elastischer und piezoelektrischer Konstanten, methodische Aspekte wie Ultraschalldämpfung, theoretische Konzepte zur Extrapolation von elastischen Messdaten nach hohen Temperaturen bis zu Anwendungen ferroelektrischer Kristalle als optische Wellenleiter.

Bei der Abschlussdiskussion wurde dann Bestandsaufnahme gemacht:

Welche physikalischen Kristalleigenschaften kennen wir mit hinreichender Genauigkeit? Was können die Experimentatoren leisten (Überblick über Meßmethoden und ihre Genauigkeit, p-, T-Bereiche, benötigte Kristallgrößen)? Was kann die Theorie schon rechnen, mit welchem Input und mit welcher Verlässlichkeit? Extrapolationen?

Wo ist Handlungsbedarf bei der Kristallzüchtung und Messtechnik? Warum gibt es von vielen potentiell interessanten Materialien gar keine Messdaten oder nur schlechte? Welche Materialdaten brauchen Bauelementeentwickler, um die Performance weiter zu steigern? Welche Daten brauchen Geowissenschaftler zur Vorhersage von Erdbeben und Vulkanausbrüchen? Welche Daten brauchen die Entwickler von Simulationsprogrammen zum Testen und Verbessern ihrer Modelle?

So war das Ergebnis eine umfangreiche gegenseitige Information von Wissenschaftlern, die physikalische Materialdaten produzieren und von solchen, die diese Daten in ihrer Arbeit anwenden.

Auch dieser Workshop wurde von Jürgen Schreuer (Laboratorium für Kristallographie der ETH Zürich) wieder hervorragend organisiert; ihm gebührt dafür besonderer Dank. Tatkräf-

tige Unterstützung vor Ort erfuhr er durch Martin Kunz (Naturhistorisches Museum Basel). Um das Wohl der Begleitpersonen kümmerte sich Erika Spengler (ETH Zürich), die ein umfangreiches und sehr schönes Ausflugsprogramm zusammengestellt hatte, von dem wir bei den gemeinsamen Abendessen leider nur die begeisterten Erzählungen der anderen mitbekamen. Aber auch die aktiven Workshop-Teilnehmer kamen nicht ganz zu kurz, da einige Diskussionsstunden (sofern das Wetter mitspielte) auch nach draußen verlegt werden konnten auf gemeinsame Spaziergänge an den Hängen der Rigi.

Leonore Wiehl, Mainz

In Ergänzung des Berichtes von Frau Wiehl wurde von der Redaktion die Liste aller Vorträge und Poster aufgenommen. Diese ist dem *program booklet* des Rigi2002-Workshops entnommen. Das *booklet* enthält auch die Abstracts zu untenstehenden Vorträgen und Postern (siehe *www.kristall.ethz.ch/rigi2002/rigi2002-booklet.pdf*)

Vorträge:

M. Kunz:

The earth and its materials: A current model and the state of ignorance.

J.A. Kosinski:

Piezoelectric crystals: Material constant issues for RF device design.

P. Becker:

Some aspects of crystal growth. (anstelle des Vortrags von T. Salva)

M. Carpenter:

Strain and elasticity variations due to phase transitions in minerals: A coherent approach based on Landau theory.

W. Steurer:

Physical properties of quasicrystals.

W.A. Bassett:

Diffraction experiments at extreme conditions to determine structure and elastic properties.

Baosheng Li:

Ultrasonic velocity measurements in conjunction with synchrotron radiation at high pressure and temperature.

H. Hellwig:

Brillouin spectroscopy - a powerful method to measure elastic properties.

R.G. Leisure:

Resonant ultrasound spectroscopy.

L. Bohatý:

Piezoelectric and electrostrictive properties of crystals.

W.A. Bassett:

Real-time diffraction and phase-transition mechanisms.

J. Gale:

Crystalline properties from lattice dynamics.

P. Blaha:

Electronic structure calculations and a comparison with experiment: success and failure.

A.R. Oganov:

Molecular dynamics: Basic theory, methodology, and simulations of elasticity of crystals.

M. Catti, R. Dovesi, Y. Noel:

Piezoelectric properties of crystals by *ab initio* periodic LCAO calculations.

Posterbeiträge:

J. Davaasambuu, A. Flucher, V. Kochin, U. Pietsch:

Temperature dependence of structure factor variations of piezoelectric crystals under external electric field.

H. Klapper, N.R. Ivanov, Ch. Scherf, Th. Hahn, G. Heger:

Dynamics of domain formation and propagation in ferroelectric ammonium lithium sulphate under an electric field.

A. Petraru, M. Schmid, J. Schubert, Ch. Buchal:

Ferroelectric $BaTiO_3$ thin film optical waveguide modulators.

J. Davaasambuu, A. Pucher, J. Stahn, U. Pietsch:

Electric field induced charge density variations in partially-ionic compounds.

R.R. Reeber:

High temperature thermoelastic properties of materials.

M. Schmid, A. Petraru, J. Schubert, Ch. Buchal:

Fabrication and characterization of epitaxial ferroelectric thin films for electro-optical application.

S. Schorr, M. Tovar, K. Bente:

Structure - property relations in the solid solution series 2ZnS - $CuInS_2$ studied by neutron diffraction.

J. Schreuer, C. Thybaut, J. Rupp:

Ultrasonic attenuation in $La_3Ga_5SiO_{14}$ and $La_3Ta_{0.5}Ga_{5.5}SiO_{14}$: An application of resonant ultrasound spectroscopy.

U. Straube, H. Beige, J. Bohm, R.B. Heimann, T. Hauke, M. Hengst:

Elastic, Dielectric and Piezoelectric Coefficients of Langasite-type crystal.

G.A. Frank, R.Z. Shneck, A. Landau, A. Venkert:

The use of subgrains formation in uranium for the study of plasticity.

L. Wcislak, H.J. Bunge, H. Klein, U. Garbe, J.R. Schneider:

Polycrystalline microstructure analysis and imaging with high-energy synchrotron X-rays.

L. Wiehl:

HRTEM and image calculations of Sr_2FeMoO_6 thin films on $SrTiO_3$.

ÜBERLEGUNGEN ZUR KOSTENDÄMPFUNG BEI WISSENSCHAFTLICHEN ZEITSCHRIFTEN

Christian W. Lehmann [a], Wolfgang W. Schmahl [b]

[a] MPI für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, 45470 Mülheim and der Ruhr,
[b] Ruhr-Universität Bochum, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik, Universitätsstraße 150, 44780 Bochum

Das Thema Kosten für Fachzeitschriften beschäftigt Wissenschaftler und Bibliothekare seit einigen Jahren immer wieder. Wenngleich sicher jedes Institut, jeder Fachbereich und jede Universität mit jeweils eigenen Schwierigkeiten zu kämpfen hat, sind alle Wissenschaftler mit jährlich steigenden Literaturkosten, Zeitschriftenneugründungen und schrumpfenden Bibliotheksetats konfrontiert. Die unvermeidliche Konsequenz - Abbestellungen nach mehr oder weniger nachvollziehbaren Kriterien. Besonders betroffen sind davon in der Regel die kleineren Disziplinen, zu denen realistischerweise auch die Kristallographie zu zählen ist. Die sinkenden Auflagen führen natürlich zu weiter steigenden Preisen bei den Fachzeitschriften und damit zu noch weiter sinkenden Auflagen. In dieser Situation ist der vorliegende Artikel zunächst einmal als Bestandsaufnahme gedacht. Darüber hinaus sollen aber auch einige Überlegungen angestellt werden, wie man der Literaturkostenspirale entrinnen könnte. Die Idee zu diesem Artikel entstand auf einer DGK Vorstandssitzung, wobei allerdings gesagt werden muß, daß die alleinige Verantwortung für den Inhalt bei den beiden Autoren liegt.

Kristallographie war schon immer und ist weiterhin eine interdisziplinäre Wissenschaft; traditionell der Mineralogie verbunden, ist diese Wissenschaft seit der Entwicklung der Kristallstrukturanalyse in der Chemie und Biologie genauso zu Hause, wie auch, wenngleich mit anderem Schwerpunkt in den Materialwissenschaften und der Physik. Jeder einzelne Lehrstuhl und Arbeitskreis wird darum die Frage nach den für die eigene Arbeit essentiellen Fachzeitschriften anders beantworten. Und während jene Kollegen, die in den großen Fachbereichen bzw. Fakultäten Chemie, Physik und Biologie angesiedelt sind, dort zwar auf die Standardwerke der einzelnen Disziplinen zugreifen können, werden sie für die rein kristallographischen Zeitschriften in Bibliothekskommissionen jedoch nur eingeschränktes Interesse finden. Diese Interessenkonflikte wird es an kleinen, kristallographischen Instituten in dieser Art nicht geben, dafür strapazieren die essentiellen Zeitschriften dann die Haushalte über Gebühr.

Zwangsläufig musste bei unseren Überlegungen eine Auswahl getroffen werden, welche Zeitschriften überhaupt betrachtet werden sollen. Eine solche Auswahl wird natürlich immer subjektiv sein. Um sich daher nicht von vornherein dem Vorwurf der Einseitigkeit auszusetzen, zieht man also besser einen unabhängigen Experten hinzu. Nützlicherweise hat bereits das Institute of Scientific Information für uns diese subjektive Auswahl getroffen. Unter dem Stichwort Crystallography verzeichnet der Journal Citation Report des Institute for Scientific Information 19 Zeitschriften (Tabelle 1).

Anhand dieser Zeitschriftenliste haben wir die Kosten ermittelt, die einer Institutsbibliothek beim Bezug aller Titel entstehen würden. Sie betrugen für das Jahr 2002 ca. € 47.000. Dieser zugegebenermaßen etwas unrealistische Bibliotheksbestand soll aber als Ausgangssituation für eine gleichermaßen fiktive Bibliothekskommission dienen, die ihre Zeitschriftensubskription auf ein finanzierbares Maß beschränken muss. Interessante

Überlegungen hat hierzu unter anderem der Physiker Henry Barschall angestellt. Vor einigen Jahren hat Barschall eine Untersuchung veröffentlicht[1], in der er die Kosten pro Druckzeichen einiger Physikzeitschriften untersucht hat. In einer zweiten Untersuchung wurde dann auch noch der „Impact Factor" der Zeitschriften berücksichtigt, um auch noch ein gewisses Maß für die Qualität oder Bedeutung der Zeitschrift einfließen zu lassen. Nicht völlig überraschend boten die Zeitschriften der wissenschaftlichen Gesellschaften ein wesentlich besseres Preis-Leistungsverhältnis als die Zeitschriften der kommerziellen Verlage. Diese in Physics Today veröffentlichte Untersuchung brachte dem US amerikanischen Autor und dem American Institute of Physics eine – allerdings erfolglose - Klage eines englischen Verlagshauses vor einem deutschen Gericht, wegen unlauteren Wettbewerbs ein. Eine ähnliche Untersuchung haben Sidney Abrahams und Richard Matula in Acta Cryst. 1988 publiziert[2].

Für die in Tabelle 1 aufgeführten Zeitschriften, haben wir ebenfalls einen solchen Vergleich angestellt. Den sehr hohen Aufwand die Druckzeichen zu zählen haben wir allerdings dadurch umgangen, daß wir die Seitenzahlen eines Jahrgangs zu Grunde legen. In erster Näherung wird dies der Anzahl der gedruckten Zeichen proportional sein, denn Herausgeber und Verlage versuchen möglichst viel Information, bei guter Lesbarkeit, auf einer Seite unterzubringen. Während Barschall bei den in dem Artikel genannten Physikjournalen einen Faktor von ungefähr 80 beim Preis pro Druckzeichen zwischen den Zeitschriften feststellte, liegt dieser Faktor in der vorliegenden Untersuchung „nur" bei 18, bezogen auf den Preis pro Seite. Bedenkt man, daß „Zeitschrift für Kristallographie – New Crystal Structures" pro Struktur „page charges" in Höhe von € 135 verlangt und streicht man die beiden, bei diesem Vergleich teuersten Titel, rücken die verbleibenden 15 Zeitschriften soweit zusammen, daß nur mehr der Faktor sechs verbleibt. Berücksichtigt man andererseits auch noch den Impact-Faktor so liegen die entsprechenden Zahlen zwischen € 0,19 (in der Einheit: pro Seite und Impact-Faktor) und 10,53, was einem Verhältnis von 1:55 entspricht und sehr weit von dem Faktor 850 entfernt ist, den Barschall in seiner entsprechenden Analyse gefunden hat. Nichtsdestoweniger klafft auch bei unserer Analyse ein schwer nachvollziehbarer Unterscheid zwischen dem Preis/Leistungsverhältnis der einzelnen Zeitschriften. Betrachtet man dann die Einnahmen/Ausgabenrechnung der IUCr für die von ihr herausgegebenen Zeitschriften, die für das Jahr 2001 im Bericht des IUCr Executive Committees an die Generalversammlung veröffentlicht sind, kann man sich auch ein Bild von den ungefähren Gewinnspannen der kommerziellen Verlage machen. Die Überschussrechnung weist für alle IUCr-Zeitschriften einen Betrag von ca. 520.000 Schweizer Franken aus. Nach Abzug der 10.000 Schweizer Franken für das Journal of Synchrotron Radiation, ergibt sich ein Ertrag von etwas weniger als 88 Schweizer Franken pro Druckseite, umgerechnet ca. 60 Euro. Es gibt wohl keinen Grund anzunehmen, daß dieser Ertrag bei den kommerziellen Verlagen deutlich geringer sein dürfte. Für den Augenblick möge der Leser die Zahl € 60 im Gedächtnis behalten, wir kommen noch einmal darauf zurück.

Auf der Basis der Daten aus Tabelle 1 kann die Entscheidung welche Zeitschriften weiterbezogen werden sollen mit einer gewissen Objektivität getroffen werden. Nicht gelöst wird dadurch aber das Problem der Literaturkosten insgesamt. Diese Frage ist ganz unmittelbar mit der Frage nach dem Umgang mit Literatur und ihrer Verbreitung verbunden. In dem der Kristallographie verwandten Bereich der Mineralogie hat sich das Modell bewährt, durch ein Regelabonnement aller Mitglieder einer wissenschaftlichen Gesellschaft die Auflage und Verbreitung hoch und damit die Druckkosten pro Exemplar niedrig zu halten. Zum Beispiel im Falle des European Journal of Mineralogy und des American Mineralogist wird damit und mit hervorragender Editionsarbeit ein Impact-Factor erreicht, der mit dem kommerzieller Anbieter mühelos konkurriert, und die Zeitschrift ist dabei zu einem

[1] Barshall, H. H., Physic Today, December 1986, 34; idem July 1988, 56.
[2] Abrahams, S., Matula R., Acta Cryst. A44, 401-410, 1988.

Preis/Leistung Verhältnis in den Bibliotheken, das bislang von keiner der kristallographischen Zeitschriften erreicht wird (im Jahr 2001: European Journal of Mineralogy, 150 EUR, 1511 Seiten, Impactfactor 1.36, American Mineralogist, 510 EUR, 1552 Seiten, Impactfactor 1.842) Die traditionelle Form der gedruckten, in der Bibliothek ausliegenden Zeitschrift ist mittlerweile in sehr vielen Fällen ergänzt durch eine on-line Version der Manuskripte. Darüber hinaus erscheinen einige neu gegründete „Zeitschriften" nur noch als sogenannte e-journals. Hierzu sei auf Acta Cryst. E oder CrystEngComm verwiesen. Die Entwicklung der elektronischen Publikationen wird natürlich dadurch unterstützt, das sehr viele Verleger bevorzugter weise Manuskripte in elektronischer Form (entweder ausschließlich oder zusätzlich zur ausgedruckten Variante) erhalten, bzw. sogenannte camera ready Manuskripte verlangen, die die Arbeit des Technical Editors auf ein Minimum begrenzen. Es darf aber auch nicht verschwiegen werden, daß rein elektronische Artikel auch eine Reihe von Nachteilen mit sich bringen bzw. dahinter versteckte Gefahren lauern. Das Blättern in einer gedruckten Zeitschrift fördert häufig interessante Artikel hervor, die man allein anhand des Inhaltsverzeichnisses übersehen hätte. Häufig erregt nämlich eine entsprechende Abbildung unsere Aufmerksamkeit. Artikel, die man nur am Bildschirm sieht sind darüber hinaus weniger gut lesbar und ersetzen nicht die Papierform. Dank pdf-Dateien kann man aber hervorragende Ausdrucke anfertigen und ist beim lesen dann auch nicht mehr an den Bildschirm gebunden. Andererseits bieten elektronische Publikationen graphische Darstellungsmöglichkeiten an die Printmedien nicht herankommen. Erwähnt seien nur frei drehbare drei-dimensionale Moleküldarstellungen und beliebige Verwendung von Farbe.

Für unsere vollständig vernetzte deutsche Universitäts- und Forschungslandschaft ist der technische Zugang zu rein elektronischen Zeitschriften sicherlich kein größeres Hindernis. Anders sieht es aber natürlich in den Ländern aus, die aus verschiedensten Gründen große Schwierigkeiten beim Internetzugang haben. Es ist jedoch zu bemerken, dass auch hierzulande bereits die finanziellen Probleme ihre Schatten voraus werfen. Im Land Nordrhein-Westfalen, zum Beispiel, ist so manche Universität inzwischen vom elektronischen Bezug von Zeitschriften der „führenden" kommerziellen Verlage abgeschnitten, da keine Solidarität zwischen den Hochschulen bei Preisverhandlungen der Verlage mit dem Wissenschaftsministerium bzw. Landeskonsortium bestand und der Hardcopy-Bezug der betreffenden Zeitschriften gerade zur Finanzierung dieses Konsortiums an vielen Orten eingestellt werden musste. Hier fehlt es in der Wissenschaftslandschaft an einer zentralen Einrichtung mit Verantwortung und Exekutivkraft, die die allgemeine Entwicklung in vernünftiger Bahnen lenken könnte. Deswegen sind nicht zuletzt die wissenschaftlichen Gesellschaften gefordert.

Als größte Gefahr bei den elektronischen Medien muß aber die Langzeitverfügbarkeit gesehen werden. So besteht einerseits die Gefahr, daß Datenträger infolge technischer Weiterentwicklungen oder einfach wegen Alterung nicht mehr gelesen werden können, andererseits könnte zentral gespeicherte Information durch Naturkatastrophen oder Gewalteinwirkung zerstört werden. Die weltweite Verbreitung der gedruckten Ausgaben macht eine völlige Zerstörung höchst unwahrscheinlich, gleichzeitig ist sie auch Garantie dafür, daß nachträglich keine Information verändert oder gelöscht wird.

Vom Kostenargument her betrachtet sollten elektronische Zeitschriften die preisgünstigere Literaturform sein. Tatsächlich existiert aber die leidige Praxis vieler Verlage nach Möglichkeit zweimal zu kassieren, indem sowohl für print als auch für on-line bezahlt werden muss. Natürlich kostet die Bereitstellung von großen Mengen an Speicherplatz auf dem Server des Verlags Geld, weitere Kosten werden aber infolge der elektronischen Datenverarbeitung innerhalb der Verlage nur in geringem Umfang anfallen. Bei rein elektronischen Zeitschriften entstehen natürlich zusätzlich Kosten für die redaktionelle Arbeit. Einen nicht unerheblichen Anteil dieser Aufgaben, zum Beispiel die Begutachtung,

übernehmen aber unbezahlte Fachkollegen. An dieser Stelle kommen wir auch noch einmal auf die € 60 Gewinn pro Druckseite zurück. Da in aller Regel die Verlage, zuerst einmal die Manuskripte unentgeltlich zu erhalten, um sie dann für gutes Geld an die Autorenschaft zurück zu verkaufen, sind wir, die Autoren wissenschaftlicher Beiträge, letztendlich diejenigen, die diese Gewinne ermöglichen.

Folgende durchaus provokante Schlußfolgerung kann also gezogen werden. Wer sich ständig steigenden Literaturkosten gegenüber sieht, muß sich fragen, ob nicht mittelfristig die größten Einsparungen dadurch erzielt werden, daß man vorwiegend in den Zeitschriften mit günstigem Preis-Leistungsverhältnis publiziert. Wenn wir diese dann auch noch lesen, ob on-line oder gedruckt, wird sich die Kostenspirale wesentlich langsamer drehen.

Tabelle 1: Zeitschriften, die unter dem Stichwort Crystallography im ISI Journal Citation Report indiziert sind. Der jährliche Seitenumfang ist dem jeweiligen Inhaltsverzeichnis der betreffenden Zeitschrift für das Jahr 2001 entnommen. Subskriptionspreise beziehen sich auf die Kosten für Bibliotheken und wurden im Internet recherchiert, soweit möglich wurden die Preise für 2001 zugrundegelegt, ansonsten die jeweils aktuell verfügbaren Preise. Dollarpreise wurden eins zu eins in Euro umgerechnet. Für die Zeitschrift „Chinese Journal of Structural Chemistry“ waren keine Daten erhältlich.

Zeitschriftentitel	Impact Factor	Kosten pro Seite in €	Kosten / (Seite * Impact) in €
Acta Crystallographica A	1.749	0,70	0,40
Acta Crystallographica B	1.955	0,64	0,33
Acta Crystallographica C	0.570	0,98	1,73
Acta Crystallographica D	2.124	0,41	0,19
Crystal Research and Technology	0.536	0,82	1,54
Crystallographic Reports	0.414	2,28	5,50
Journal of Applied Crystallography	2.583	0,74	0,29
Journal of Chemical Crystallography	0.312	1,84	5,91
Journal of Crystal Growth	1.283	1,18	0,92
Journal of Inclusion Phenomena and Macro…	1.150	1,23	1,07
Journal of Molecular Graphics and Modelling	1.210	0,99	0,82
Liquid Crystals	1.965	1,73	0,88
Molecular Crystals and Liquid Crystals	0.457	1,41	3,09
Phase Transitions	0.671	4,97	7,41
Polyhedron	1.200	1,64	1,37
Progress in Crystal Growth and Chemistry	0.618	6,51	10,53
Z. Kristallographie – New Crystal Structures	0.283	0,36	1,26
Zeitschrift für Kristallographie	1.370	1,73	1,27

Im DGK-Mitteilungsheft Nr. 24 ist der Artikel „Das hätten sich die Braggs nicht träumen lassen ...“ von G. Hildebrandt erschienen. Leider haben sich bei der redaktionellen Bearbeitung der Vorlage von Herrn Hildebrandt etliche Fehler eingeschlichen, die unkorrigiert abgedruckt wurden. Wir möchten uns daher beim Autor entschuldigen. Aus diesem Grund geben wir die – so hoffentlich – korrigierte Fassung erneut in diesem Heft wieder.

Die Redaktion

DAS HÄTTEN SICH DIE BRAGGS NICHT TRÄUMEN LASSEN ...

oder: ein Kristallograph rückt den Schwingquarzen zu Leibe und hilft so der Industrie

Fast alle Uhren sind heutzutage „Quartz"-gesteuert, und vom Handy bis zum Satelliten erstreckt sich ein noch immer expandierendes Anwendungsgebiet für Schwingquarze (angeblich „beschäftigt" jeder Erdenbürger bereits mehr als ein Dutzend davon). An ihre Qualität werden wachsende Anforderungen gestellt, besonders von der neuen UMTS-Technik, und gleichzeitig möchte man diese Bauteile immer mehr verkleinern, um sie in Schaltkreise direkt integrieren zu können. Natürlich wird auch nach anderen Materialien gesucht – aber das ist ein Kapitel für sich.

Wovon hängen denn nun die erwünschten Eigenschaften (Frequenz-/Temperatur- und Langzeitkonstanz, Stoßunempfindlichkeit usw.) bei Schwingquarzen ab? Die Antwort lautet: ganz wesentlich von der Orientierung ihrer Oberflächen, vorausgesetzt, das Ausgangsmaterial ist weitgehend fehlerfrei, liegt also nahe dem Idealkristall.

Aus großen mittels des Hydrothermal-Verfahrens gezüchteten Einkristallen, den *Stones* (guter Naturquarz ist selten geworden und zu teuer), werden die sog. *Lumbered Bars* mit Abmessungen von 200 x 20 x 10 mm^3 herausgeschnitten, exakt justiert längs der Y-Achse mit Längsflächen YX und YZ (Y steht senkrecht zu $(01\bar{1}0)$, Z ist die optische Achse). Orientierte Gattersägen zerteilen diese dann in schmale Scheiben; stehen hierbei die Sägeblätter parallel zur X-Achse und unter einem Winkel von $35^o15'$ gegen die Z-Achse, so erhält man *Blanks* im sog. AT-Schnitt, derzeit in Millionen Stück pro Woche produziert und in allen Quarzuhren aktiv. Ihre Oberfläche ist um einen Winkel $\varepsilon \approx 3^o$ gegen die die Röntgenstrahlen stark reflektierende $(01\bar{1}1)$-Netzebene des Quarzgitters geneigt. Hieraus resultiert die Möglichkeit sehr genauer Messungen von ε, wie noch zu zeigen ist.

In den frühen sechziger Jahren des vorigen (!) Jahrhunderts arbeitete ein junger Doktorand, Hans Bradaczek, in der Abteilung Prof. Hosemann des Fritz-Haber-Instituts der MPG in Berlin-Dahlem. Damals hatte der technikbegeisterte Direktor Max von Laue in der Maschinenhalle des Instituts (sie war Besichtigungspunkt Nr. 1 jedes auswärtigen Besuchers) auf Anraten eines weltbekannten Elektrokonzerns „geregelte" Generatoren zur Versorgung mehrerer Röntgen-Apparaturen aufstellen lassen, doch Hans Bradaczek ärgerten sie (und mich ebenfalls): zuverlässig gingen diese Maschinen „in die Knie", wenn eine weitere Anlage zugeschaltet wurde, und die damals gerade aufkommenden Zählrohre für Röntgenstrahlung reagierten empört mit Fehlmessungen.

Hans Bradaczek, ebenfalls technikbegeistert, setzte sich daher hin und baute einen auf 10^{-6} stabilisierten Röntgengenerator mit einer geregelten Sendetriode als Herzstück (er wurde später von der Fa. Seifert in Lizenz gebaut.). Das zweite Exemplar kaufte dann die Abt. Prof. Borrmann – es landete in meinem Labor.

Hiermit begann für Hans Bradaczek eine neue Entwicklung neben seiner Institutsarbeit, startend mit einer „Drei-Mann-Firma", und eben jetzt in einen mit modernsten Maschinen ausgestatteten 2000 m^2 großen Fabrikneubau einmündend.

Überspringen wir die Zwischenschritte (Zählgeräte, Computersteuerungen, Ansätze zu einem PC), kehren wir zum Thema zurück. Vor einem Dutzend Jahren wurden auch in Berlin noch

Quarz-Schwinger bei SEL und anderen Elektronik-Firmen produziert, mit Ausschüssen bis zu 50%, weil sich exakte Schnittwinkel bei runden Blanks schwer einhalten und mit wenig Aufwand nicht messen ließen. Die Firma Bosch kannte das Probleme, man hatte eine vage Idee und erbat die Mithilfe von Hans Bradaczek, inzwischen Professor an der Freien Universität Berlin, und über ihn war schließlich auch ich involviert: eine „Vier-Männer-Arbeit" entstand [1], basierend auf folgendem Prinzip. Man nehme einen winzigen Plattenteller, gut „rund" und konstant umlaufend, lege ein (inzwischen Oberflächen-behandeltes) AT-Blank darauf und lasse einen eng fokussierten Röntgenstrahl nun *nicht* unter dem Winkel $\Theta_B + \varepsilon$ einfallen (im Blank liegt $(01\bar{1}1)$ ja um $\varepsilon = 3^o$ schräg zur Oberfläche), sondern ein wenig flacher. Dann kann offensichtlich im „Symmetriefall" (wenn die Netzebenen-Normale in der Ebene von Röntgenstrahl + Drehachse liegt) *kein* Reflex auftreten, wohl aber, wenn sich die Drehachse in den Winkelstellungen $+\Omega$ oder $-\Omega$ befindet. Bei konstanter Rotation treten daher nacheinander zwei Reflexe auf, aus deren genauem Abstand 2Ω der Wert von ε folgt. Damit wurde $\varepsilon = \varepsilon(\Omega)$ zur Grundlage der heute „Ω-Scan" genannten Methode.

Natürlich muss ein Computer die genauen Reflexschwerpunkte errechnen, natürlich muss ein Laserreflex an der Oberfläche ein etwaiges „Wobbeln" der Drehachse sowie Nicht-Parallelitäten zwischen Blank und Plattenteller (Staub, Quarzpartikel) für Korrekturen berücksichtigen. Doch wenn das alles funktioniert (der Teufel liegt auch hier im Detail), genügt ein Umlauf des Plattentellers in zwei Zeitsekunden, um Messgenauigkeiten für ε besser als vier Winkelsekunden (!!) zu erreichen. Das Auflegen der Blanks sowie ihr anschließendes Einsortieren in eine von 24 Boxen, je nach dem gemessenen ε-Wert, erfolgt vollautomatisch innerhalb der Umlaufzeit des Tellers.

Ein Problem galt es noch zu lösen: liegt $(01\bar{1}1)$ im Blank „windschief" (als Folge von Schnittfehlern), so bleibt dies vom Ω-Scan unbemerkt, aber es gibt Messfehler. Abhilfe konnte nur eine zweite unabhängige Messung schaffen, ein zweiter Reflex musste her, der aber mit gleichem Primärstrahl und Zählrohr erfassbar sein sollte. Als brauchbar erwies sich $(02\bar{2}3)$ (die eigentliche Messung erfolgt ja in Reflexion 2. Ordnung, also mit $(02\bar{2}2)$. Die zwei neuen Reflexe treten um etwa $\Omega = 180^o$ versetzt auf, sind also gut trennbar. Erst dieser *Improved Ω-Scan* brachte die eben erwähnte Messgenauigkeit.

Aber wie es der Fortschritt nun einmal so an sich hat, er schreitet unerbittlich fort. „Zwar ist der AT-Schnitt gut. Aber so gut, dass man sagen könne, sehr gut, so gut ist der AT-Schnitt wiederum nicht" (frei nach Curt Götz' „Das Märchen"). Inzwischen kennt man andere Schnitte, SC, FC, IT etc. genannt, die optimalere Eigenschaften aufweisen (geringere Stoßempfindlichkeit, schmalere Frequenzbandbreiten usw.), die aber fernab prominenter Netzebenen liegen. Während der AT-Schnitt aus einfacher Drehung um eine Achse resultierte (s.o.), benötigt man nun zum Justieren der besseren Schnitte Drehungen um zwei Achsen, der Fachjargon nennt die zugehörigen Quarzscheiben daher *„doubly rotated blanks"*.

Präparation und Messungen sind komplizierter, der Ausschuss und die Unkosten sind daher höher: Während ein einfacher Uhren-(AT-)-Quarz vielleicht 50 US-Cent kostet, bezahlt man für einen Präzisions-SC-Quarz eher 10 US-Dollar.

Für die Kontrolle der Oberflächenorientierung sind nun prinzipiell unabhängige Messungen an *zwei* Netzebenen erforderlich – aber genau das hatte ja schon der *Improved Ω-Scan* vorweggenommen. Es galt daher „nur" noch mit Computer-Hilfe aus der Vielzahl brauchbarer Quarz-Reflexe zwei auszusuchen, die eine optimale Messung garantieren und der Bedingung „nur ein Röntgenstrahl, nur ein Zählrohr" genügten. Das gelang, und mittels Achtfach-Messung wurde bei SC-Blanks letztens eine Genauigkeit von zwei Winkelsekunden erreicht. Die Industrie ist hiermit (zunächst ?) restlos zufriedengestellt.

Der andere Trend hin zu winzigen Abmessungen wurde bereits erwähnt. Man arbeitet heute schon mit Blanks der Größe 1 x 2 mm^2 und nur noch 20 µm Dicke! Die inzwischen weltweit verbreiteten Ω-Scan-Geräte (allein in der VR China arbeiten drei Dutzend davon rund um die Uhr) kommen nach schärferer Bündelung von Röntgen- und Laser-Strahl auch mit diesen Mini-Blanks zurecht.

Abschließend bleibt nur zu hoffen, dass die Weltwirtschaft aus ihrer Talfahrt herausfindet und die Auftragslage sich verbessert, damit der sich im Bau einer erweiterten Produktionsstätte seiner Firma „EFG International“ manifestierende Optimismus von Hans Bradaczek nicht enttäuscht wird. Und um noch einmal auf die Überschrift zurückzukommen: das hätten sich die Braggs 1913 sicherlich nicht träumen lassen, dass mittels Anwendung ihrer Beugungsbedingung (genauer: mittels ihrer knappen Verfehlung) in extrem kurzen Zeiten sich derart extreme Messgenauigkeiten erzielen lassen!

Der interessierte Leser findet weitere Informationen im Aufsatz [2].

G. Hildebrandt, Berlin

[1] Nestler, B., Kuhr, H.-J., Hildebrandt, G., Bradaczek, H.: Novel use of a commercial goniometer for sorting round quartz blanks. Mes. Sci. Technol **2** (1991) 528-531.

[2] Hildebrandt, G., Bradaczek, H.: Experiences with Quartz Oscillator Angle-Sorting. J. Cryst. Res. Technol. **37** (2002) 111-118.

PERSONALIA:

Wir gratulieren

Herrn Prof. Dr. Ekkehart Tillmanns

zur Verleihung des

Erwin Schrödinger-Preises

der Österreichischen Akademie der Wissenschaften

Wien 2002

http://www.oeaw.ac.at/