

Die XXXI. Tagung des Arbeitskreises Nichtkristalline, PartIELlkristalline und Nanokristalline Strukturen

Seine XXXI. Arbeitstagung führte der Arbeitskreis *Nichtkristalline, PartIELlkristalline und Nanokristalline Strukturen* vom 11. bis 13. Oktober 2010 traditionsgemäß im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf – im schönen, ruhigen und erholsamen Thüringer Holzland gelegen – durch. Die Arbeitstagung zeichnete sich wiederum durch eine angenehme, offene und konstruktive Atmosphäre aus, welche noch durch die gute Küche des Hotels beflügelt wurde. Es nahmen insgesamt zwanzig Interessierte aus sehr unterschiedlichen Fachgebieten teil, davon viele Doktoranden und Nachwuchswissenschaftler und es wurden fünfzehn Vorträge gehalten, für welche reichlich Zeit – auch zu anschließenden, teilweise sehr heftigen Diskussionen – zur Verfügung stand.

Aufmerksame und kritische Leser werden sofort bemerkt haben, daß der Name des Arbeitskreises erweitert ist: Neben den nicht- und partIELlkristallinen Strukturen stehen nun auch die *nanokristallinen* Strukturen. Die Arbeitskreisversammlung beschloß einstimmig diese Erweiterung der Aufgaben des Arbeitskreises um die nanokristallinen Strukturen. Der Arbeitskreis will damit seiner Verantwortung gerecht werden, den satzungsgemäßen Auftrag zur Förderung von Forschung und Lehre zu erfüllen. *Nanokristalle* erlangen immer größere Bedeutung – sowohl in der wissenschaftlichen und technologischen Forschung als auch in ihren sehr vielfältigen Anwendungen. Insbesondere überlappen sich die Fachgebiete nichtkristalliner und nanokristalliner Strukturen im Bereich der Strukturbildungen (Keimbildung, Vorordnungen und Wachstums- und Zerstörungsprozesse) sowie auch der Strukturcharakterisierungen (Radiale Verteilungsfunktionen (PDF), Korrelationslängen (Kristallitgrößen), Fehlordnungen u. ä.).

So beschäftigten sich aktuell mindestens sechs der fünfzehn gehaltenen Vorträge explizit mit Themen nanokristalliner Strukturen, was auch durch das Schwerpunktthema der Tagung STRUKTUREN UND STRUKTURBILDUNGEN VON NICHTKRISTALLINEN ZU NANOKRISTALLINEN MATERIALIEN impliziert und diesem dadurch auch gerecht wurde, von der theoretischen Berechnung chemisch-physikalischer Eigenschaften dieser Materialien anhand von Strukturmodellen bis hin zur praktischen Modifizierung derselben als Wasserstoffspeicher sowie zur chemischen und biologischen Stabilisierung von Holz als Nachbildung der Holzopalisierung. Hervorzuheben sind auch die Modellierungen von Bildungsprozessen nanokristalliner Xenons als auch von metallischen Gläsern. Vielfältig sind auch die vorgestellten Eigenschaften und Strukturen von Gläsern sowie die Grundlagen möglicher Strukturbeschreibungen dieser Materialien.

Die Vortragenden und die Titel der gehaltenen Vorträge seien zur allgemeinen Information hier aufgeführt, wobei die Kurzfassungen der Vorträge von der Seite des Arbeitskreises (<http://www.chemie.uni-jena.de/DGK-AK4/>) als pdf-Dateien heruntergeladen werden können:

H. Hermann, V. Kokotin (Dresden): Effektive Eigenschaften von BMG-Nanokompositen

R. B. Neder (Erlangen): Characterization of Nanoparticles via Pair Distribution Function

O. Shuleshova, D. Holland-Moritz, W. Löser, G. Reinhart (Dresden, Köln): Metastable formation of decagonal quasicrystals in undercooled Al-Ni melts: *in situ* observations by synchrotron radiation

O. Khvostikova, L. Giebeler, B. Assfour, G. Seifert, H. Hermann, H. Ehrenberg (Dresden): Gezielte Strukturmodifizierung von MOFs zur Optimierung von Sorptionseigenschaften

U. Hoppe (Rostock): Structure of Binary Phosphate Glasses

B. Müller (Jena): Lokale Strukturbeschreibungen kondensierter Materie – Punktsymmetrien, Verbundvektoren, Eigen- und Verbundpolyeder, FSDP und Eigenpeaks sowie Korrelationslängen

N. Toto, J. C. Schön, M. Jansen (Stuttgart): Atomistic Modeling of xenon crystal synthesis via low-temperature atom beam deposition (LT-ABD)

V. Kokotin (Dresden): Computersimulation atomarer Prozesse für Herstellung metallischer CuZrAl-Gläser

H. J. Hoffmann (Berlin): Schmelzen, Glastransformation und Relaxation anorganischer Gläser

I. Kaban, P. Jávári, W. Hoyer (Dresden, Budapest, Chemnitz): Structural changes in GeSe₄ chalcogenide glass upon addition of indium and boron

I. Kaban, W. Hoyer, N. Mattern, J. Eckert (Dresden, Chemnitz): Liquid-liquid interfacial tension and wetting in Al-In and Al-Pb immiscible alloys

D. Ehrt (Jena): Photolumineszenz in Gläsern und Glaskeramiken

B. Marchetti, H. Bertagnolli (Stuttgart): Untersuchungen von amin-funktionalisierten Goldnanopartikeln mit Röntgenabsorptions- und UV-Vis-Spektroskopie

B. Unger, M. Shabir, M. Sabel, D. Pfeifer, Th. Hübert (Berlin): Imprägnierung von Holz mit SiO₂- und/oder TiO₂-Solen: Fixierung der anorganischen Komponente

Th. Pfeiffer, S. Müller, H. Roggendorf (Halle): Fortschritte bei der Herstellung von Wasserglas durch hydrothermalen Aufschluss von amorphen und kristallinen SiO₂-Quellen in Natronlauge

Eine Exkursion geleitete die Teilnehmer zu einer Werksbesichtigung in die KAHLA/Thüringen Porzellan GmbH, die zur Zeit effizienteste Porzellanfabrik Deutschlands, in welcher das theoretische Thema der Tagung *Strukturen und Strukturbildungen von nichtkristallinen zu nanokristallinen Materialien* in seiner praktischen, technologischen und ästhetischen Form dargeboten wurde. Der Produktionsleiter, Herr Marquardt, führte souverän durch die Produktionshallen und erläuterte sehr beeindruckend den gesamten Prozeß der Herstellung von Porzellan, das in Kahla in sehr modernen, ansprechenden und künstlerischen Varianten entsteht. Dabei wurden von den Teilnehmern kritische und vor allem auch konstruktive Beiträge zum Produktionsverfahren gegeben. Es war ein in jeder Hinsicht sehr anregender Nachmittag, der aber auch in die Probleme und Schwierigkeiten technologischer Prozesse einführte und diese anschaulich demonstrierte.

Die Arbeitskreisversammlung schlug vor, einen Workshop für Doktoranden zum Thema *Radiale Verteilungsfunktionen (RDF) und ihre Anwendungsmöglichkeiten* zu organisieren, für welche entsprechendes Lehrmaterial erarbeitet werden soll. Prof. Dr. G.-H. Klöß (Leipzig) – gemeinsam mit der DGM – sowie Prof. Dr. R. B. Neder (Erlangen) haben sich bereit erklärt, diesen vorzubereiten und durchzuführen.

Weiterhin wurde beschlossen, die XXXII. Arbeitskreistagung hauptsächlich zum Thema **Strukturcharakterisierungen nicht- und nanokristalliner Materialien mittels Radialer Verteilungsfunktionen (PDF)** durchzuführen. Sie wird vom 10. bis 12. Oktober 2011 – wiederum im Hotel Am Kellerberg in Wolfersdorf – stattfinden. Alle an dieser Thematik Interessierten sind herzlich eingeladen.

Auch werden alle Interessenten an der Herstellung, der Charakterisierung sowie den Strukturen nanokristalliner Materialien gebeten, ihre Mitarbeit im Arbeitskreis dem Arbeitskreissprecher (bernd.mueller@uni-jena.de) kundzutun, damit sie zu den Veranstaltungen des Arbeitskreises explizit eingeladen werden können.

Sprecher des AK Nichtkristalline, Partiekristalline und Nanokristalline Strukturen:

Bernd Müller, Institut für Physikalische Chemie der Friedrich-Schiller-Universität Jena

E-Post: bernd.mueller@uni-jena.de