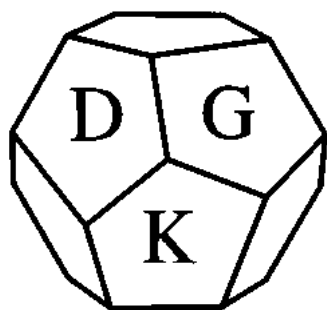






Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur: Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). Sie erscheinen zur Zeit jährlich im Sommer. Der Vorstand der DGK und die Redaktion der DGK-Mitteilungen weisen darauf hin, dass die Beiträge die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

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen: AXO Dresden GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Impact, Crystal Maker Software Ltd., Dectris Ltd., Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Incoatec GmbH, Jena Bioscience GmbH, Rigaku Global Marketing Group, Rigaku Innovative Technologies Inc., Röntgenlabor Dr. M. Ermrich, STOE & Cie GmbH.

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:

Prof. Dr. Dirk C. Meyer oder Dr. Hartmut Stöcker

Technische Universität Bergakademie Freiberg

Institut für Experimentelle Physik

Leipziger Straße 23, 09596 Freiberg

Tel.: 03731 39 2773, Fax: 03731 39 4314

E-Mail: dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de oder hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de

Redaktionsbereiche:

Anzeigen und Werbung: Dr. Tilmann Leisegang, tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de

Veranstaltungshinweise: Dr. Melanie Nentwich, melanie.nentwich@physik.tu-freiberg.de

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

Druck und Bindung:

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

Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351 3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

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

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

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

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

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

Vertreter der DMG: Prof. Dr. Jürgen Schreuer
Ruhr-Universität Bochum, Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik
Universitätsstraße 150, 44780 Bochum
Tel: +49 234 3224381, Fax: +49 234 3214433
E-Mail: schreuer@rub.de

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

Liebe Mitglieder der DGK,

wir hatten großes Glück, dass wir unsere Jahrestagung 2020 gemeinsam mit unseren polnischen Kolleginnen und Kollegen in Wroclaw noch wie geplant durchführen konnten, kurz bevor die Corona-Pandemie unser aller Leben ziemlich durcheinanderbrachte. An dieser Stelle möchte ich Prof. Susan Schorr, Prof. Udo Heinemann, Prof. Marek Glowka und Prof. Marek Wolczyk ganz herzlich für die hervorragende Organisation der gemeinsamen deutsch-polnischen Jahrestagung danken. Auch wenn es vom Organisationsteam so nicht geplant war, hatte in Wroclaw der Eröffnungsvortrag von Rolf Hilgenfeld höchste Aktualität, indem er uns zeigte, wie kristallographische Forschung zur Entwicklung neuer Wirkstoffe gegen SARS-CoV2 beitragen kann. In der Zwischenzeit haben sich weitere kristallographische Arbeitsgruppen an Universitäten und außeruniversitären Forschungseinrichtungen an dem Kampf gegen SARS-CoV2 beteiligt. Einen Überblick der diesbezüglichen Aktivitäten an BESSY II und PETRA III finden Sie in dieser Ausgabe der DGK-Mitteilungen sowie der entsprechenden weltweiten kristallographischen Arbeiten in dem aktuellen IUCr-Newsletter (Vol. 28(2)).

Die DGK hatte im letzten und auch in diesem Jahr eine Reihe von Reise-Stipendien an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler vergeben. Die Berichte der Stipendiatinnen und Stipendiaten über ihre Teilnahme am *European Crystallographic Meeting* 2019 in Wien, an der *Hercules European School* 2019 und der DGK-Jahrestagung 2020 in Wroclaw finden Sie in dieser Ausgabe der DGK-Mitteilungen. Diese Ausgabe enthält u. a. auch Berichte der DGK-Arbeitskreise und das Protokoll der Mitgliederversammlung, die während der Jahrestagung in Wroclaw stattfand.

Die nächste DGK-Jahrestagung ist für 15.–18. März 2021 in Hamburg geplant. Allerdings ist heute noch nicht abzusehen, ob eine Präsenz-Veranstaltung dieser Größe überhaupt erlaubt sein wird, oder ob die Jahrestagung nur im Internet stattfinden kann. Das Organisationsteam um Prof. Edgar Weckert plant derzeit für verschiedene Szenarios, aber eine Entscheidung wird sicher erst später in diesem Jahr möglich sein. Ebenso wird abzuwarten sein, ob der IUCr-Kongress, der im August dieses Jahres hätte stattfinden sollen, tatsächlich im August 2021 in Prag durchgeführt werden kann.

Ich hoffe, Sie alle sind die letzten Monate gesundheitlich vom Corona-Virus verschont geblieben und wünsche Ihnen, dass Sie es auch weiterhin bleiben!

Herzliche Grüße,

Ihr



Ralf Ficner (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 25.02.2020 in Breslau	9
Anlage zu Punkt 6.2: Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees	15
Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters	17
Anlage zu Punkt 6.5: Bericht der Kassenprüfer	19
Rückblick zur 28. Jahrestagung der DGK in Breslau	21
Berichte der Stipendiaten zum Joint Polish-German Crystallographic Meeting	26
Berichte der Stipendiaten zur ECM32 in Wien	28
HERCULES European School	32
Zur Entwicklung der Kristallographie anhand der akademischen Genealogie Peter Pauflers anlässlich seines 80. Geburtstags	35
Stanislav K. Filatov und der Neubeginn russisch-deutscher Zusammenarbeit im Osten	41
Nachruf auf Harry Müller, Bildhauer in Leipzig	45
Deutsche Synchrotrons gegen die Coronavirus-Pandemie	49

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Internationale Hochdruck-Sommerschule 2020 der IUCr/DGK in Bayreuth	55
Jahresbericht 2019 des AK 6 „Molekülverbindungen“	60
Bericht über den Workshop „Tipps und Tricks für SHELX“	62
Symmetrieseminar 2019 in Dresden	64
Bericht des AK20 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“	67
Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“	69

Personalia:

Jubilare 2019	75
Verstorbene Mitglieder	77
Ehrungen	78
Max von Laue-Preis 2019 an Mirijam Zobel	79
Max von Laue-Preis 2020 an Tobias Beck	83
Max von Laue-Preis 2020 an Matthias Zschornak	87
Will Kleber-Gedenkmünze 2020 an Robert Dinnebieer	89
Carl Hermann-Medaille 2020 an Dieter Fenske	93
Waltrude und Friedrich Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2020 an Julian Voss-Andreae	95
80. Geburtstag von Peter Paufler	100

Ankündigungen:

Aufruf zu Nominierungen für den Max von Laue-Preis 2021	105
Aufruf zu Nominierungen für die Will Kleber-Gedenkmünze 2021	106
Aufruf zu Nominierungen für die Carl Hermann-Medaille 2021	107
Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude und Friedrich Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie	108
Tagungen und Termine	109
Homepages von DGK, DMG und DGKK	112
Aufnahmeformular	113
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	115
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten	116

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

AM 25.02.2020 IN BRESLAU

Die Mitgliederversammlung fand im Rahmen des *Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020* am Dienstag, den 25. Februar, 12:00 – 13:30 Uhr, im Saal 10AC des *Congress Center Wrocław, University of Science and Technology*, Gebäude D20, ul. Janiszewskiego 8, 50-372 Breslau, Polen, statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Ralf Ficner, eröffnet die Sitzung um 12:15 Uhr und begrüßt die anwesenden Mitglieder der DGK.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird festgestellt. Es sind 56 Mitglieder anwesend. Nach § 9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind. Bei derzeit 1059 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 53 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird unverändert angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls der Mitgliederversammlung vom 26.03.2019 in Leipzig

Das Protokoll wird – wie in Heft 49 der „Mitteilungen der DGK“ ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

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

6 Berichte

6.1 Bericht des Vorsitzenden

Ralf Ficner berichtet über Entwicklungen seit der letzten Mitgliederversammlung. Von den ausgeschriebenen Stipendien für die Teilnahme von Studenten/-innen an der aktuellen Jahrestagung in Breslau wurden 13 vergeben.

6.2 Bericht der Vorsitzenden des Nationalkomitees

Ute Kolb berichtet über Entwicklungen im Rahmen der ECA und der IUCr. Auf der ECM in Wien wurde die DGK durch Claudia Weidenthaler und Andrzej Grzechnik vertreten. Der ausführliche Bericht ist dem Protokoll als Anhang beigelegt.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Töbrens berichtet über die Entwicklung der Mitgliederzahlen. Die DGK hatte am 23.03.2019 insgesamt 1070 Mitglieder, davon 865 Vollmitglieder, 45 Studenten und Doktoranden, 11 Arbeitslose, 102 Pensionäre, 30 Dauermmitglieder, 6 Ehrenmitglieder, 8 Institute und 3 weitere unpersönliche Mitglieder. Von den persönlichen Mitgliedern sind 239 Damen und 820 Herren. Dies sind 14 Mitglieder weniger als vor einem Jahr. Dazu zeigt sich in der Altersstruktur der Mitglieder eine gewisse Überalterung. Ähnliches ist auch für die Teilgruppe der Professoren erkennbar: Von 241 Professoren sind 144 im Ruhestand (>65). Es ist notwendig, verstärkt Nachwuchs zu rekrutieren, wenn dieser Trend gestoppt werden soll.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann legt die Einnahmen-Überschuss-Rechnung für 2019 sowie den Haushaltsplan für 2020 vor. Diese sind dem Protokoll als Anhang beigelegt.

Bei der Abbuchung der Mitgliedsbeiträge gab es relativ viele Rückläufer. Die Mitglieder sind aufgefordert, bei Änderungen der Bankverbindung ihre Daten bitte zeitnah zu aktualisieren. Bei einigen Mitgliedern wurde fehlerhaft nicht abgebucht. Dies liegt immer noch an Problemen mit der neuen Datenbank, welche durch die Einführung des SEPA-Systems notwendig wurde.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Die Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch legen ihren Bericht zur Prüfung der Kassenunterlagen der DGK für das Geschäftsjahr 2019 vor. Die Prüfung ergab keine Unstimmigkeiten und die Verwendung der Mittel erfolgte satzungsgemäß. Der ausführliche Kassenprüfungsbericht folgt als Anlage.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Jürgen Schreurer trägt vor. Da sich die DMG in diesem Jahr erst nach der DGK trifft, gibt es nichts Aktuelles zu berichten. Die *3rd European Mineralogical Conference* wird vom 6. bis 10. September 2020 in Krakau, Polen stattfinden.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand &

6.8 Bericht des Vertreters der DGK im Vorstandsrat der DPG

Ein Bericht des Vertreters der DPG liegt leider nicht vor. Auf der am 15. März anstehenden DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM), zu der auch der Fachverband „Kristalline Festkörper und deren Mikrostruktur“ gehört, wird das Vertreteramt voraussichtlich neu besetzt. Der Vorstand wird dann Kontakt aufnehmen.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Matthias Zschornak trägt in Vertretung von Hartmut Stöcker vor: Die Redaktion der Mitteilungen dankt allen Autoren für ihre Beiträge und den Werbekunden für die Mitfinanzierung des Heftes. Für das nächste Heft 50 laden wir alle DGK-Mitglieder ein,

das Heft aktiv zu gestalten. Wir freuen uns über jegliche Nachrichten, Berichte und Aufsätze mit Kristallographie-Bezug. Redaktionsschluss wird wie in den vorherigen Jahren der 31. Mai sein.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Nach der Umstellung der Webseite auf SSL-Verschlüsselung konnte das Formular zur Aktualisierung der Mitgliederdaten wieder freigeschaltet werden. Demnächst wird dieses ergänzt durch eine Möglichkeit, online die Mitgliedschaft in der DGK zu beantragen.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird per Akklamation, ohne Einspruch, entlastet.

8 Annahme der Beitragsordnung

Die Mitgliederversammlung beschließt einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, die am Ende dieses Heftes abgedruckte Beitragsordnung. Diese ist gegenüber dem Vorjahr unverändert.

9 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Der Vorstand schlägt Ullrich Pietsch und Alexandra Friedrich als Kassenprüfer vor. Beide werden per Akklamation, ohne Einspruch, gewählt.

10 Satzungsänderung der Liebau-Stiftung

Laut Schreiben des Finanzamtes Jena vom 04.12.2019 muss § 10 der Satzung der Waltrude und Friedrich Liebau-Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie (derzeit gültige Fassung vom 20. März 2013) geändert werden:

Erlischt die Stiftung, fällt das Vermögen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. zu, welche es satzungsgemäß zu gemeinnützigen Zwecken zu verwenden hat.

ist zu ersetzen durch:

Bei Auflösung oder Aufhebung der Stiftung oder bei Wegfall steuerbegünstigter Zwecke fällt das Vermögen der Stiftung an die Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V., die es unmittelbar und ausschließlich für gemeinnützige Zwecke zu verwenden hat.

Der Schatzmeister erläutert die Änderung. Diese wird anschließend einstimmig, ohne Gegenstimmen und ohne Enthaltungen, angenommen.

11 Wahlen zum Komitee für die Carl-Hermann-Medaille

Es liegen vier Kandidatenvorschläge vor:

- Dr. Robert Dinnebier
- Dr. Karen Friese
- Prof. Dr. Oliver Oeckler
- Dr. Manfred Weiss

Aus der Mitgliederversammlung werden keine weiteren Kandidaten vorgeschlagen. Es gibt keinen Einspruch gegen einen der Kandidaten. Da insgesamt vier Mitglieder in das Komitee zu wählen sind, erfolgt die Abstimmung *in cumulo*. Die Kandidaten werden bei vier Enthaltungen, ohne Gegenstimmen gewählt.

12 Wahlen zum Komitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze

Es liegen vier Kandidatenvorschläge vor:

- Prof. Dr. Guntram Jordan
- Prof. Dr. Thomas Schleid
- Dr. Leonore Wiehl
- Prof. Dr. Norbert Sträter

Aus der Mitgliederversammlung werden keine weiteren Kandidaten vorgeschlagen. Es gibt keinen Einspruch gegen einen der Kandidaten. Da insgesamt vier Mitglieder in das Komitee zu wählen sind, erfolgt die Abstimmung *in cumulo*. Die Kandidaten werden bei drei Enthaltungen, ohne Gegenstimmen gewählt.

13 Verleihung der Ehrenmitgliedschaft an Prof. Wolfram Saenger

Gemäß seinem Beschluss auf der Vorstandssitzung am 03.12.2019 in Jena schlägt der Vorstand der DGK der Mitgliederversammlung vor, Prof. Dr. Wolfram Saenger zum Ehrenmitglied der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie zu ernennen. Udo Heinemann trägt der Mitgliederversammlung die Begründung vor. Bei der satzungsgemäßen geheimen Abstimmung wird der Antrag mit 50 Ja-Stimmen bei drei Enthaltungen, ohne Gegenstimmen angenommen.

14 Verantwortlicher für Öffentlichkeitsarbeit

Bislang konnte noch niemand für das Amt eines Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit gewonnen werden. Mehrere vom Vorsitzenden angesprochene potentielle Kandidaten haben mit Verweis auf zeitliche Belastung abgelehnt. Es gibt keine spontanen Vorschläge aus der Mitgliederversammlung. Die Suche geht weiter.

15 Broschüre der DGK

Susan Schorr stellt ausführlich die Finanzierung, Ausstattung und Inhalt der auf der Vorstandssitzung am 03.12.2019 in Jena beschlossenen DGK-Info-Broschüre vor. Die Zielgruppe, an der sich das Niveau der Beiträge orientieren wird, sind MINT-Lehrer, Abiturienten, BSC-Studenten. Angestrebt wird, die Broschüre zum *IUCr Congress and General Assembly* (August 2020) fertigzustellen.

16 Deutsche Bewerbung um die Ausrichtung des IUCr-Kongresses 2029

Manfred Weiss stellt den Stand der Planungen vor. Es wird einen Stand zwecks Vorbewerbung auf der IUCr 2020 in Prag geben; hierfür werden Freiwillige gesucht.

17 Jahrestagung 2022

Wolfgang Schmahl wird die Möglichkeiten einer Durchführung in München eruieren.

18 Jahrestagung 2021

Alexander Schökel stellt in Vertretung von Edgar Weckert vor: Die Jahrestagung 2021 wird in Hamburg am DESY stattfinden. Voraussichtliches Datum ist 15.–18. März 2021. Edgar Weckert (DESY) übernimmt die Tagungsleitung.

19 Sonstiges

Die Deutsche Kristallzüchtungstagung DKT-2020 findet vom 11. bis 13. März 2020 in München-Garching statt.

Die Mitgliederversammlung endet um 13:14 Uhr.

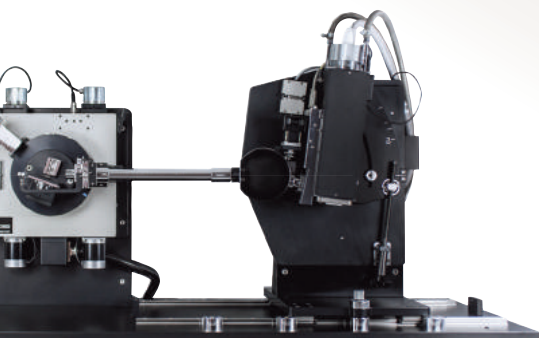


Daniel Többers
(Schriftführer)



STADIVARI
THE FASTEST AND MOST FLEXIBLE
WAY TO EXPLORE RECIPROCAL SPACE.

 SINGLE CRYSTAL
DIFFRACTOMETRY



STADI MP
ONE POWDER DIFFRACTOMETER -
THREE GEOMETRIES

 POWDER
DIFFRACTOMETRY

STOE UNPARALLELLED QUALITY

We accept no compromises when ensuring the best quality for your STOE powder and single crystal diffractometer systems.

We guarantee this with our new and unprecedented:

**10
YEAR**

STOE Parts & Labor
Guarantee for all new
STOE Diffractometer
Systems

Contact us for your best XRD solution and terms & conditions at info@stoe.com.

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

WWW.STOE.COM

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DER VORSITZENDEN
DES NATIONALKOMITEES

Auf der ECM wurde ein neuer Preis, der Kálmán-Preis, ausgelobt von der Familie Prof. Alajos Kálmáns und bezahlt von der Ungarischen Chemischen Gesellschaft, vorgestellt. Der Preis wird an einen einzelnen Forscher verliehen, der herausragende wissenschaftliche Beiträge auf dem Gebiet der Strukturwissenschaften in den letzten 5 bis 10 Jahren veröffentlicht hat. Der Preis besteht aus einer Medaille und einem Preisgeld. Der Preisträger hält einen Preisvortrag bei der ECM. Das Preiskomitee wird von der SIG-13 *Molecular Structure and Chemical Properties* benannt.

Der erste *Alajos Kálmán Prize* wurde Luigi Nassimbeni verliehen, der seit mehr als drei Jahrzehnten eine führende Rolle in den chemischen Wissenschaften in Südafrika einnimmt.

Der elfte *ECA Max Perutz Prize* ging an Professor Elspeth Garman, für Ihren unschätzbaren Beitrag auf dem Gebiet der makromolekularen kristallographischen Methoden durch die Entwicklung von Werkzeugen und Methoden zur Verbesserung der Qualität von Beugungsdaten.

Es wurde beschlossen, aus der ISE (*Initiative of Science in Europe*) auszutreten. Die ECA ist dort zwar Mitglied, ISE zeichnet sich allerdings hauptsächlich durch Untätigkeit aus, schickt keine Finanzreporte etc. Dennoch unterstützte die ECA die ISE-Petition für mehr Investitionen in *Horizon Europe* vor dem Sondertag des Europäischen Rates am 20.02.2020.

Der Internetauftritt der ECA wird erneuert.

Konferenzen:

- 2020: 25th IUCr, Prag, Tschechien
- 2021: ECM 33, Versailles, Frankreich
- 2022: ECM 34, Padua, Italien
- 2023: 26th IUCr, Melbourne, Australien

Schulen:

- 6th ECS Budapest 2020
- 7th ECS Lissabon 2021

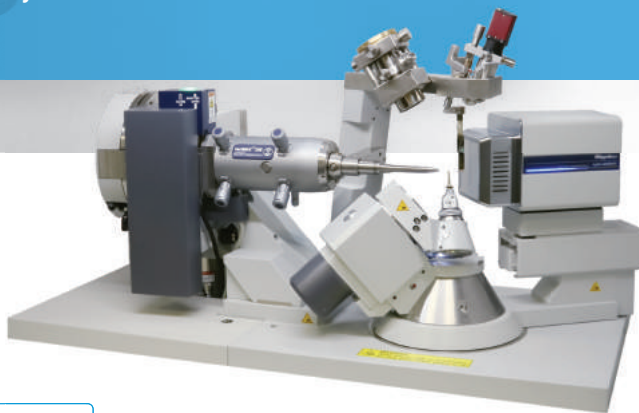
Neuwahl des Nationalkomitees in 2021:

Auf der anstehenden 29. DGK Tagung (15.–18. März in Hamburg) muss das Nationalkomitee teilweise neu gewählt werden. Von den sechs derzeitigen Mitgliedern (Ute Kolb (Vorsitzende), Claudia Weidenthaler, Thorsten Gelsing, Wolfgang Bensch, Andrzej Grzechnik, Yves Muller) werden Ute Kolb, Claudia Weidenthaler und Wolfgang Bensch turnusgemäß nach sechsjähriger Amtszeit ausscheiden. Yves Muller wird sich aufgrund anderweitiger Umstände außerplanmäßig zurückziehen. Ein Modus für eine satzungsgemäße Nachrückerregelung muss gefunden werden.

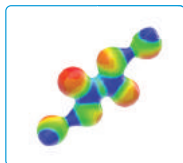
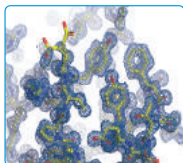
Ute Kolb, Mainz

THE EVOLUTION OF DUAL-WAVELENGTH TECHNOLOGY: XtaLAB Synergy-DW VHF

- New VHF optic produces 50 percent more fluence
- One source, two wavelengths, computer switchable
- Hybrid photon counting detector with massive dynamic range
- Perfect instrument to share between SCX and PX research
- Best-in-class data quality



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



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

In 2004, a revolution in crystallography was started when the Gemini dual-wavelength diffractometer was introduced. The experimental versatility of having two different wavelengths available to carry out diffraction experiments was quickly recognized as being important for a modern X-ray lab. The XtaLAB Synergy-DW VHF is an evolution of that original concept and greatly extends the range of crystal sizes that can be measured by utilizing a dual-wavelength rotating anode X-ray source and a new VHF optic that increases the fluence at the crystal by 50 percent.



ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2019 der DGK			
Einnahmen 2019			
Mitgliedsbeiträge inkl. Liebau-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2019	20.530,00 €	21.635,00 €
	Barzahler 2019	705,00 €	
	Entnahme Dauermitglieder	360,00 €	
	Beiträge rückwirkend	40,00 €	
Zinsen und Gebühren	Girokonto	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Umbuchung Liebau-Preisgeld			2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	1.750,00 €	3.735,08 €
	Rückzahlungen	1.985,08 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.400,00 €
Summe Einnahmen			31.770,08 €
Ausgaben 2019			
Mitteilungen			-7.161,47 €
Mitgliedsbeiträge	Beitragerstattung	0,00 €	-1.460,00 €
	Rücklastschriften	-1.460,00 €	
Administration	Bankgebühren	-227,60 €	-9.056,00 €
	Stornokosten	-111,59 €	
	Ehrungen und Preise	-8.519,93 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-38,52 €	
	Webseite	-158,36 €	
	Reisekosten & Spesen	0,00 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-1.750,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-13.703,60 €	-20.480,68 €
	Ausgaben	-1.277,08 €	
Reisestipendien	ECM Wien	-2.000,00 €	
Liebau-Preisgeld		-2.000,00 €	
Max von Laue-Preisgeld		-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			-39.908,15 €
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2018			
Einnahmen	neue Dauermitglieder	0,00 €	0,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2019		0,00 €
Überschuss 2019			0,00 €
Rücklage IUCr 2029			
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin			15.000,00 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2019			-8.138,07 €

Kontoführung 2019 der DGK			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	5.430,24 €	22.792,17 €	17.361,93 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.104,02 €	2.104,02 €	0,00 €
Sonderkonto AK 21	1.636,84 €	1.636,84 €	0,00 €
DKG-Cash 085	36.016,50 €	10.516,50 €	-25.500,00 €
Guthaben der DGK	45.187,60 €	37.049,53 €	-8.138,07 €

Haushaltsvoranschlag 2020 der DGK				
Einnahmen 2020				Vorjahr
Mitgliedsbeiträge	Bankeinzug 2020	22.000,00 €	26.150,00 €	21.635,00 €
	Barzahler 2020	1.000,00 €		
	Bankeinzug rückwirkend 2019	3.000,00 €		
	Dauermitglieder	150,00 €		
Spende Preisgeld			1.500,00 €	2.000,00 €
Zinsen und Gebühren	Girokonto		0,00 €	0,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen		0,00 €	3.735,08 €
Anzeigen Mitteilungen			4.000,00 €	4.400,00 €
Summe Einnahmen			31.650,00 €	31.770,08 €
Ausgaben 2020				Vorjahr
Mitteilungen			-7.500,00 €	-7.161,47 €
Mitgliedsbeiträge	Rücklastschriften/ Erstattung	-1.500,00 €	-1.500,00 €	-1.460,00 €
Administration	Bankgebühren	-250,00 €	-1.650,00 €	-9.056,00 €
	Geschäftsstelle	-600,00 €		
	Medaillen	-0,00 €		
	Verwaltung	-800,00 €		
Verbände	ECA, BVMatW		-1.000,00 €	-1.750,00 €
Jahrestagung	Ehrenabend Leipzig		0,00 €	-1.217,18 €
Arbeitskreise	Förderung	-10.000,00 €	-28.050,00 €	-19.263,50 €
Reisestipendien	IUCr Prag, ECS 6, Breslau	-5.550,00 €		
Broschüre Kristallographie		-11.000,00 €		
Laue-Preisgeld	Auszahlung	-1.500,00 €		
Summe Ausgaben			-39.700,00 €	-39.908,15 €
Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2020			-8.050,00 €	-8.138,07 €

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

ANLAGE ZU PUNKT 6.5:

BERICHT DER KASSENPRÜFER

Die detaillierte Prüfung der vorgelegten Kontoauszüge und Rechnungsabschlüsse des Jahres 2019 hat die Stimmigkeit der Aufstellung und Bilanzen des Schatzmeisters der DGK, Prof. Christian Lehmann, ergeben. Demnach hat das Kapital der DGK mit Ende des Jahres 2019 eine Abnahme von mehr als 8.000 € erfahren und beträgt nun etwas mehr als 37.000 €. Der erwünschte Kapitalabbau konnte somit durch intensive Förderung der Arbeitskreise, Vergabe von Reisestipendien, die Anfertigung neuer Medaillen für zukünftige Ehrungen sowie die Anfertigung von Werbematerial für die Bewerbung um die IUCr 2029 erreicht werden. In Anbetracht der Höhe des vorhandenen Guthabens befürworten wir ausdrücklich die Fortführung der zweckgebundenen Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr 2029.

Alexandra Friedrich (Würzburg) und Ullrich Pietsch (Siegen)

X-ray Beam Modules

Rigaku Innovative Technologies

New Components and Retrofitting Existing Systems

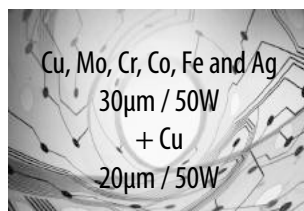
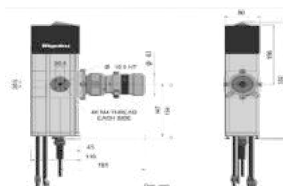


Retrofitting Existing Equipment

- Economical alternative to total system replacement
- Component level upgrades for optics and X-ray source
- Independent of system manufacturer
- Air-cooled feature available upon request

Replacement Beam Modules

- Optics
- High efficiency VariMax™ multilayer optics
- Spectral purity, exemplary beamsize and minimal divergence
- One or two dimensional optics, bent - and channel - cut crystals and pyrolytic graphite



Available beam modules

Sources

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

Over 300 X-ray Beam Modules Sold

Rigaku Innovative Technologies

www.rigakuoptics.com

"Leading with Innovation"


Rigaku

RÜCKBLICK ZUR 28. JAHRESTAGUNG DER DGK IN Breslau

Vom 24. bis 27. Februar fand die diesjährige DGK-Jahrestagung gemeinsam mit der *Polish Crystallographic Association* als *Joint Polish-German Crystallographic Meeting* an der *Wroclaw University for Science and Technology* statt. Dazu reisten 365 Teilnehmer, davon 85 Studierende (40 aus Deutschland, 38 aus Polen), aus insgesamt 22 Ländern nach Wroclaw: ca 50 % der Teilnehmer kamen aus Deutschland, Österreich bzw. der Schweiz und ca. 39 % der Teilnehmer aus Polen. Aber auch Wissenschaftler aus Ägypten, Aserbaidschan, Frankreich, Großbritannien, Indien, Italien, Japan, Niederlande, Russland, Schweden, Spanien, USA kamen nach Wroclaw, um sich über die neuesten Forschungsergebnisse auszutauschen. Zu der Tagung, die im Kongresszentrum der Universität stattfand, hatten polnische und deutsche Kollegen gemeinsam eingeladen: Marek Wolczyr und Marek Glowka sowie Udo Heinemann und Susan Schorr.

In sechs Plenarvorträgen berichteten international renommierte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler über die neuesten Entwicklungen in der Kristallographie. Schon der erste Plenarvortrag, gehalten von Rolf Hilgenfeld, hatte ein hochaktuelles Thema zum Inhalt: Wie kann Röntgenbeugung im Kampf gegen sich neu entwickelnde Viren helfen? Weitere Plenarvorträge wurden über Apparate zu Riboregulation und Transport (Ben Luisi, Cambridge), zur Strukturanalyse mittels Elektronenbeugung (Lukasz Palatinus, Prag), zum Verständnis der Hochtemperatur-Korrosion (Christiane Stephan, Berlin), zu Druck-induzierten physikalischen und chemischen Umwandlungen (Andrzej Katrusiak, Poznan) und zur Charakterisierung neuer Materialien mittels Neutronenbeugung (Maria Fernandez-Diaz, Grenoble) gehalten.

Die 18 Mikrosymposien wurden gemeinsam von den DGK-Arbeitskreisen und der *Polish Crystallographic Association* organisiert. Jedes Mikrosymposium hatte einen polnischen und einen deutschen Chair. Die „Jungen Kristallographen“ haben wieder in bewährter Weise die Session der 19 *Lightning Talks* zu Posterbeiträgen organisiert. Die Tagungssprache war durchgehend Englisch.

Die Firmen Rigaku Europe SE und Bruker AXS nutzten zwei Lunch-Symposien, um ihre neuesten Entwicklungen vorzustellen.

Die Verleihung der DGK-Preise fand traditionell im Rahmen eines feierlichen Ehrenabends statt. Zum DGK-Ehrenmitglied wurde Wolfram Saenger ernannt.

Ein weiterer Höhepunkt der Tagung war sicher auch das Dinner im Zoo von Wroclaw. Nach einer Führung durch die Anlagen gab es viele leckere Spezialitäten.

Die Tagung wurde, wie in den vergangenen Jahren, durch die Firma Conventus organisiert.

Susan Schorr, Berlin



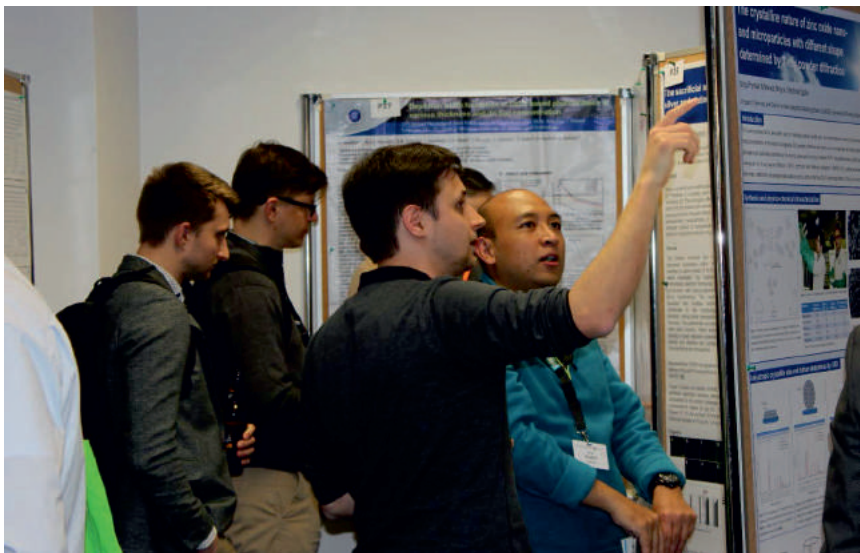
Eröffnung der Tagung mit den Tagungsleitern Marek Wolczyr (am Rednerpult), Marek Glowka, Susan Schorr und Udo Heinemann, weiterhin Ralf Ficner (Vorsitzender der DGK) und A. Trochimczuk (Vertreter der Wrocław University for Science and Technology).



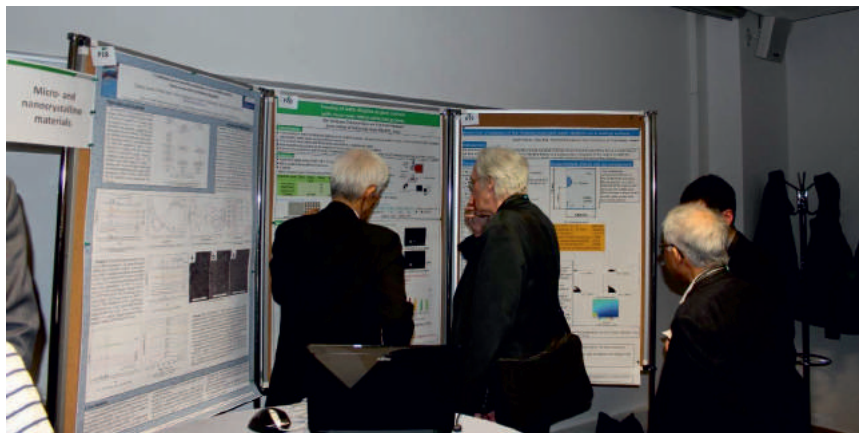
Der erste Plenarvortrag (Redner Rolf Hilgenfeld): aktuell und spannend!



Wissenschaftlicher Austausch mit Kollegen/innen und den Industrieausstellern



Diskussionen an den Postern



Impressionen aus den Postersessions

ONLY WITH

CrystalMaker[®]

Diffusion pathways in Terranovite, as visualized in CrystalMaker X

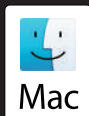
Interactive
Crystal Structures
Software

CrystalMaker Software

25 Years of Innovation

Mineralogy
Crystallography
Materials Chemistry

Works with
macOS Catalina



CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTALMAKER.COM

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



BERICHTE DER STIPENDIATEN ZUM JOINT POLISH-GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Marius Kremer, RWTH Aachen

Das *Joint Polish-German Crystallographic Meeting* fand vom 24. bis 27. Februar in Breslau statt. Mitten in der Stadt, nur ein paar hundert Meter von der Oder entfernt, liegt das *Centrum Kongresowe Politechnika Wroclawska*, der Austragungsort der Konferenz. Beim eher durchwachsenen Breslauer Wetter und dem interessanten wissenschaftlichen Programm, fiel es nicht schwer die vier Tage in den Räumen des Konferenzentrums zu verbringen. Die wie immer gute Versorgung mit Kaffee und Gebäck hat ihr Übriges dazu getan, dass es den Teilnehmern an nichts fehlte.

Mit sechs Plenarvorträgen, sechs Mikrosymposien, zwei Postersessions und Industriesymposien von Bruker und Rigaku war für jeden etwas dabei. Man hatte nicht nur die Chance, sich über die neusten Entwicklungen des eigenen Themenschwerpunkts zu informieren, sondern konnte auch interessante Einblicke in verwandte Disziplinen der Kristallographie erlangen. Besonders faszinierend war für mich der Plenarvortrag von Prof. Hilgenfeld von der Universität Lübeck, der uns einen Einblick in die Chemie von SARS-CoV-2 und verwandten Viren gab. Dieser Vortrag war vor allem deswegen hochaktuell, weil nur Tage vorher die ersten Infektionsfälle in Deutschland berichtet wurden, und Prof. Hilgenfeld selbst in China war, und eine einzigartige Perspektive auf den dortigen Zustand geben konnte.

Ich selbst habe einen *Lightning Talk* und ein Poster mit dem Titel „Dicarboxylic Acids – Versatile Ligands for Coordination Chemistry“ präsentiert und habe viele Kommentare und Vorschläge bekommen, die bei der weiteren Arbeit an meinem Thema sehr hilfreich sein werden.

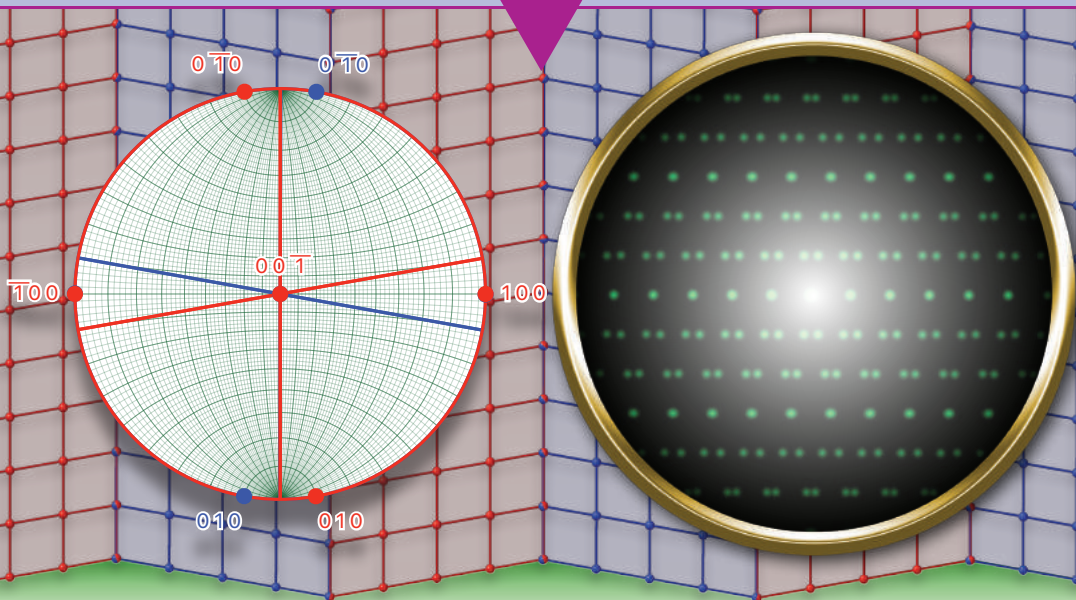
Neben dem wissenschaftlichen Programm wurde auch ein ausgezeichnetes Rahmenprogramm geboten, welches neben der *Welcome Reception*, und dem *Get Together* der Jungen Kristallographen auch eine Führung durch das „Afrikarium“ des Breslauer Zoos mit anschließendem Dinner beinhaltete.

Wem das nicht genügte, der konnte Breslau selbst erkunden. Die Stadt bietet neben dutzenden Museen und sehenswerten Kirchen viele architektonische und kulturelle Besonderheiten, wie die Altstadt, die noch heute von Gaslampen beleuchtet wird, und den Marktplatz, auf dem das alte Rathaus der Stadt steht.

Ich habe meine Reise zum *Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2020* sehr genossen und möchte mich herzlich bei der DGK für die finanzielle Unterstützung bedanken, die mir diese Reise ermöglicht hat.

ONLY WITH

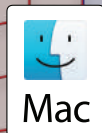
SingleCrystal™



SIMULATE • MEASURE • AUTO-INDEX

Interactive Multi-Phase Diffraction

TEM • Laue • Reciprocal Lattice • Kikuchi Lines • Powder Rings



CrystalMaker Software
25 Years of Innovation

we innovate • others imitate

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Diffraction Made Easy
Download a Free Demo



BERICHTE DER STIPENDIATEN ZUR ECM32 IN WIEN



Sabrina Thomä, Universität Bayreuth

Glücklicherweise hat mir das Reisestipendium der DGK ermöglicht an der ECM 32, welche vom 18. bis 23.08.2019 in Wien stattfand, teilzunehmen. In diesem Bericht will ich meine Erfahrungen mit interessierten Lesern teilen.

Die ECM 32 fand im historischen Hauptgebäude der Universität Wien mitten im Zentrum der Altstadt statt. Der Arkadenhof und die beeindruckenden Festsäle boten eine perfekte Location und versprühten ein tolles historisches Flair, welches die Konferenz überaus angenehm machte. Selbstverständlich hatte aber nicht nur die Konferenz-Location einiges zu bieten, sondern auch das wissenschaftliche Programm war sehr vielfältig. Mit verschiedenen *Plenary* und *Keynote lectures*, 48 verschiedenen Mikrosymposien gruppiert in vier Interessensgebiete (z. B. „Materials and Minerals“ und „Experimental and Computational Techniques“ – um nur zwei zu nennen) und den Posterpräsentationen hatte die ECM 32 für jeden, der Forschung auf dem Themengebiet der Kristallographie macht, etwas Interessantes anzubieten.



Aufgrund meines eigenen Forschungsschwerpunktes waren für mich das Mikrosymposium „Total Scattering Studies and Disorder“ (MS43) und die *Keynote Lecture* von Katharine Page am interessantesten. In ihrem Vortrag legte Katharine dar wie Grenzflächen von Nanostrukturen (z. B. Oberflächenwasser auf SnO_2 -Nanokristallen) mit *Neutron Total Scattering* und komplementären Methoden charakterisiert werden können. Dieser Vortrag war für mich sehr nützlich, da ich selbst an Nanopartikel-Grenzflächen forsche. Ihr Vortrag und ein anschließendes persönliches Gespräch mit ihr bestätigten mich in meiner Annahme, dass Neutronenstreuung auch bei meiner Forschung zusätzlichen Einblick zu Röntgenbeugungsexperimenten geben kann. Daher werde ich Neutronenstreuung definitiv in meinen

Arbeitsplan für meine Doktorarbeit aufnehmen. Ich hatte zuvor schon einige Paper von Katharine Page gelesen, allerdings war es noch viel besser einen Vortrag von ihr zu hören und die Möglichkeit zu haben mit ihr persönlich zu sprechen. Das war eine tolle und einzigartige Erfahrung.

Außerdem habe ich die Mikrosymposien „In Situ and In Operando Studies“ (MS42) und „Combined Approaches for Structure Characterization of Complex Materials at Multiple Length Scales“ (MS20) sehr genossen. Sie haben mir geholfen einige neue Ideen für meine Forschung zu entwickeln. So habe ich auf meiner ersten großen Konferenz eigentlich nur Sessions besucht, die mehr oder weniger nah an meinen eigenen Forschungsinteressen sind. Da das Programm aber so weit gefächert war, hat man definitiv auch die Möglichkeit über den Tellerrand hinaus zu blicken und sich inspirieren zu lassen. Das werde ich sicherlich beim nächsten Mal tun.

Es gab auch ein ansprechendes soziales Programm mit einem Konzert und einem Walzer-Tanzkurs. Ich selbst habe am *Young Crystallographer's Mixer* teilgenommen und es hat mir super gefallen. Es war toll so viele andere junge Kristallographen aus ganz Europa kennenzulernen. Auf der Dachterrasse der TU Wien konnte man sich sehr gut in lockerer Atmosphäre über Wissenschaft und über allgemeine Themen wie z. B. Auslandsaufenthalte während der Promotion, Stipendien etc. austauschen. Und nach so viel Wissenschaft gab es dort mit einem DJ auch die Möglichkeit zu tanzen und zu feiern. Ich freue mich schon sehr einige der neuen Bekanntschaften bald mal wieder zu sehen – vielleicht auf der ECM 33.

Tina Weigel, TU Bergakademie Freiberg

Die 32. ECM-Tagung fand vom 18. bis 23.08.2019 in Wien, Österreich statt. Im eindrucksvollen Hauptgebäude der Universität Wien hieß das Organisationskomitee der Universität Wien und der Technischen Universität Wien über 1000 Teilnehmer willkommen. Das wissenschaftliche Programm, welches sich aus zwei Plenarvorträgen, 16 *Keynote Lectures*, 48 Mikrosymposien mit je 5 Vorträgen, *Satellite Meetings* und *Workshops* zusammensetzte, war ein gelungenerer Mix mit Beiträgen aus den verschiedensten Bereichen der Kristallographie. Im Arkadenhof des Universitätshauptgebäudes, welcher mit seinen schönen Rundbögen und Monumenten berühmter Absolventen beeindruckte, fand die Ausstellung der Industriepartner statt. Dieser lud auch zu Diskussionen unter den Teilnehmern und Entspannen während der Mittagspause ein. Auch ein Großteil der Posterbeiträge wurde hier ausgestellt und während der nachmittäglichen Kaffeepause präsentiert.

Ein besonderes Highlight war für mich der *Science Slam*, der nach der ECM in Basel erst zum zweiten Mal ein Programmpunkt der Konferenz war. Hier hatten die Beitragenden die Möglichkeiten kristallographische Themen oder die eigenen Forschungsarbeiten in kurzen, populärwissenschaftlichen Vorträgen dem Publikum zu präsentieren. Zusätzlich zu dem umfassenden wissenschaftlichen Programm gab es für die Konferenzteilnehmer auch die Möglichkeiten in einer großen Auswahl von gesellschaftlichen Veranstaltungen die Stadt Wien und deren Kultur besser kennen zu lernen. So wurden neben Exkursionen in verschiedene Wiener Stadtteile oder Museen auch ein Wiener-Walzer-Tanzkurs angeboten. Das Konferenzdinner fand im berühmten Wiener Schloss Schönbrunn stand. Besonders hat mir persönlich das Konzert des Orchesters der Technischen Universität Wien gefallen. In dem einstündigen Konzert lauschten die Konferenzteilnehmer in der einzigartigen Kulisse der Votivkirche den klassischen Klängen des Orchesters. Auch der *Young Crystallographer's Mixer*, welcher auf der Dachterrasse eines Universitätsgebäudes der TU Wien stattfand, war

eine gelungene Veranstaltung. Wie auch bei der ECM im Vorjahr wurde auch in Wien stark auf die Familienfreundlichkeit der Konferenz geachtet. Es gab eine extra Kinderbetreuung auf dem Tagungsgelände, was auch einige Teilnehmer in Anspruch nahmen und mit ihren Familien anreisten.

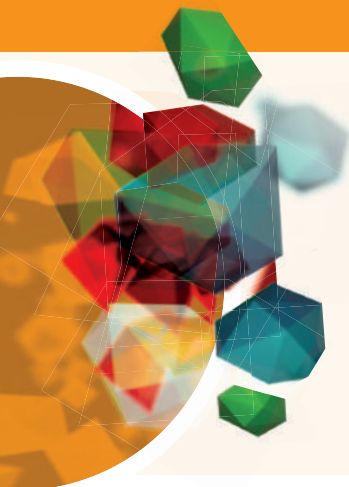
Die Konferenz überzeugte neben der beeindruckenden Kulisse des historischen Hauptgebäudes, mit dem Arkadenhof und den Festsälen in denen einige Mikrosymposien stattfanden auch durch die gute Organisation, einem hilfsbereiten Organisationsteam, kulinarischen Köstlichkeiten und einem breit aufgestellten wissenschaftlichen Programm. Damit alles in einen zeitlichen Rahmen passt, war dieser sehr eng gestrickt, was es natürlich nicht immer einfach machte diesen auch einzuhalten.

Ich selbst hatte die Möglichkeit mit einem Posterbeitrag zum Thema „Morphological analysis of the migration-induced field-stabilized polar phase in SrTiO_3 with Scanning X-ray Diffraction Microscopy“ meine aktuellsten Forschungsergebnisse vorzustellen. Dies war eine wunderbare Gelegenheit mich mit anderen Wissenschaftlern über meine Arbeit auszutauschen, neue Erkenntnisse zu gewinnen und Kontakte zu knüpfen. Auch zu anderen Fragestellungen und Problemen meiner Forschungstätigkeit habe ich während der Konferenz die richtigen Ansprechpartner gefunden und kann nun nach Konferenzende motiviert und mit neuen Ideen für Lösungsansätze an die Arbeit gehen. Persönlich hat mir an der Konferenz besonders das breite Angebot der Beiträge gefallen, bei denen ich einige Male über meine eigenen Tätigkeiten hinausschauen konnte und auch neue Aspekte der Kristallgraphie kennenlernen durfte.

An dieser Stelle möchte ich mich bei der DGK für die großzügige finanzielle Unterstützung bedanken, mit der mir die Teilnahme an der ECM ermöglicht wurde. Ein großes Dankeschön geht auch an die Organisatoren der Konferenz, welche diese zu einer äußerst lehrreichen, informativen und spannenden Veranstaltung für mich machten.



Der große Festsaal der Universität Wien war sicherlich der imposanteste und prunkvollste Tagungsraum der 32. ECM.



The XtalTool is an ALL-in-ONE Sample Holder for

- › Crystallization
- › *In-situ* crystal manipulation
- › *In-situ* data collection



The patent-pending XtalTool was developed as a platform for protein X-ray crystallography to be used in all steps from crystallization, ligand soaking and data collection without any direct crystal handling. It is specially interesting therefore for fragile crystals, in which any manipulation might disturb crystal packing and impair diffraction quality.



Learn more about XtalTool: www.jenabioscience.com/xtaltool

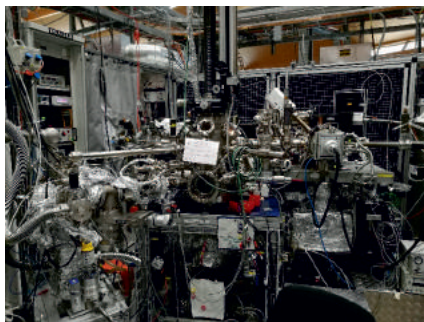
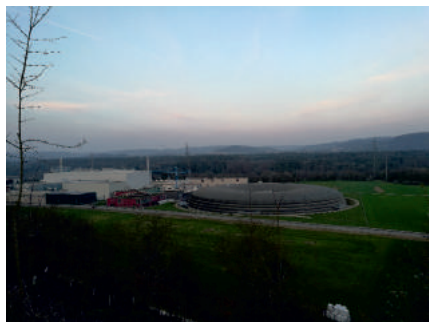


HERCULES EUROPEAN SCHOOL

Im Jahr 2019 hatte ich das große Glück zu den 60 Teilnehmern der *HERCULES European School* zu zählen. Zunächst führte mich die Reise für zwei Wochen nach Grenoble. Unter gebracht waren wir dort in einem Apartment-Hotel, wo wir am ersten Abend mit Wein und Käse willkommen geheißen wurden. Die erste Woche des Kurses startete mit Grundlagenvorlesungen zu Kristallographie, der Erzeugung, Eigenschaften und Anwendung von Röntgenstrahlung und Neutronen sowie den Hardwarekomponenten einer Beamline, wie Detektoren und Optiken, um den Teilnehmern ein gemeinsames Basiswissen zu vermitteln. Auch Besichtigungen des Neutronenreaktors und der Synchrotronstrahlungsquelle in Grenoble sowie Besuche verschiedener Laboratorien fanden in der ersten Woche statt. Zum Abschluss der ersten Woche gab es Posterpräsentationen, auf denen alle Teilnehmer ihre Forschung vorstellen konnten. Anschließend waren die Teilnehmer und Dozenten zu einem Abendessen mit französischer Küche, Wein und Musik eingeladen.

Ab der zweiten Woche starteten die Spezialvorlesungen zu den zwei Kursspezifikationen „Chemie und Physik von kondensierter Materie“ und „Biomolekulare Strukturen und Dynamiken“. Hier wurden den Teilnehmern die Grundlagen zu den verschiedenen Messmethoden und deren Anwendung für den jeweiligen Fachbereich gegeben. Aufgrund von Baumaßnahmen der Synchrotronquellen und des Neutronenreaktors konnten in Grenoble keine Praktika stattfinden. Die Teilnehmer wurden daher, anhand ihrer Forschungsschwerpunkte, in drei Gruppen eingeteilt und besuchten Partnereinrichtungen, um auch einen Einblick in das praktische Arbeiten in solch einer Forschungseinrichtung zu bekommen.

Meine Gruppe führte es als erstes an das Paul-Scherer-Institut (PSI) in Villingen in der Schweiz. Am PSI hatten wir an zwei Tagen die Möglichkeit an einer Beamline zu arbeiten und Experimente in kleinen Gruppen durchzuführen. Meine Gruppe führte Experimente zu Röntgenabsorptionsspektroskopie und zu Photoemissionselektronenmikroskopie (PEEM) durch. Am Ende der Woche stellten die Gruppen in einer kurzen Präsentation den anderen Kursteilnehmern das Experiment und die Ergebnisse vor. Zusätzlich bekamen wir eine Führung zum neugebauten SwissFEL und dem *Proton Health Care Center*, bei dem Protonen zur Behandlung von Tumoren eingesetzt werden.



Das Paul-Scherer-Institut (PSI) in Villingen, Schweiz, wo ein Teil der Praktika während des *HERCULES*-Kurses stattfand (links). Die Surfaces/Interfaces Microscopy (SIM) Beamline am PSI, wo wir das PEEM-Experiment durchführten (rechts).

Anschließend ging es mit dem Bus weiter nach Karlsruhe an das KIT. Hier erwarteten uns fünf volle Tage mit Experimenten in den Bereichen der Spektroskopie, Tomografie und Mikroskopie. In der letzten Woche des Kurses trafen sich alle Kursteilnehmer wieder in Grenoble zu weiteren Spezialvorlesungen und Tutorials. Hierbei bekam ich in einem Praktikum einen Einblick in die Durchführung und Auswertung von Experimenten zu quasi-elastischer Neutronenstreuung sowie der Auswertung von Laue-Beugungsdaten mit Neutronen. Weiterhin hatte ich die Möglichkeit bei einem Tutorial zur Software FDMNES für die Simulation von Röntgenspektroskopiedaten teilzunehmen und konnte Fragen direkt an den Entwickler der Software stellen.

Natürlich war während des Kurses auch für ein ausreichendes Sozialprogramm gesorgt. An allen Etappen der Reise wurden wir von unseren Gastgebereinrichtungen sehr herzlich willkommen geheißen und mit regionaler Küche verwöhnt. Am ersten Wochenende organisierten die Veranstalter in Grenoble für alle Kursteilnehmer eine Schneeschuhwanderung in den Bergen von Chamrousse. Hier führte die Wanderung über breite Wanderwege auf ein Hochplateau und querschnitt durch den Wald zurück zum Ausgangspunkt, wo wir mit heißen Getränken und Schokolade begrüßt wurden. In der Schweiz hatten wir die Möglichkeit an einem Abend ein Thermalbad zu besuchen und entspannten in den heißen Bädern oder in der Salzgrotte.

Die Teilnahme am HERCULES-Kurs war für mich persönlich eine große Ehre und vor allem eine einmalige Gelegenheit meinen Wissenstand auf dem Bereich der Forschung mit Synchrotronstrahlung und Neutronen zu erweitern. Ich habe einen umfangreichen Einblick in diese Bereiche bekommen, konnte mir viel neues Wissen aneignen und bereits bestehendes Wissen vertiefen sowie neuartige Messmethoden kennenlernen. Gespräche mit den Kursteilnehmern, Organisatoren und Wissenschaftlern gaben mir die Möglichkeit meine eigene Arbeit besser einzuordnen und neue Ideen für zukünftige Projekte zu finden. Die Erfahrungen dieses Kurses werden eine hervorragende Basis für meine weitere wissenschaftliche und berufliche Karriere sein. Durch den Austausch mit internationalen Nachwuchswissenschaftlern habe ich viel über die Wissenschaft und die Promotion in anderen Ländern gelernt und viele neue Freundschaften geschlossen.

Jedes Jahr im Frühjahr organisieren die *Université Grenoble Alpes* und das *Grenoble Institute of Technology* den einmonatigen Kurs über die Anwendung von Neutronen und Synchrotronstrahlung für die Untersuchung von kondensierter Materie. Der Bewerbungszeitraum für den Kurs beginnt jeweils im September. Teilnehmen können Doktoranden und Post-Docs aus EU- und Nicht-EU-Ländern.

Tina Weigel, Freiberg

Your Partner for X-ray Tubes & Microfocus Sources

Metal
Ceramic
X-ray Tubes

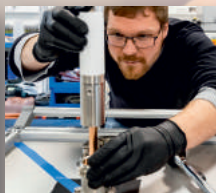
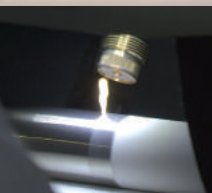
Air-cooled

Maintenance
free

Microfocus

Customization to Application

- superior performance
- large variety of anode materials
- for diffraction and fluorescence applications
- substitute radioactive sources for calibrations
- in-house R&D and production



ZUR ENTWICKLUNG DER KRISTALLOGRAPHIE ANHAND DER AKADEMISCHEN GENEALOGIE PETER PAUFLERS ANLÄSSLICH SEINES 80. GEBURTSTAGS

„Und Ritter [...], der, wie Moses mit seinem Stab an den harten Fels der Wissenschaft schlägt, aus dem die reine kristallhelle Quelle der Weisheit hervorsprudelt, und wer es wagt, seinen Becher dran zu füllen, der wird von der Größe dieses unsterblichen Menschen durchdrungen.“ [1] So schreibt Clemens Brentano über seinen Freund, den deutschen Physiker **Johann Wilhelm Ritter** (*16.12.1776 – †23.01.1810), den Entdecker der ultravioletten Strahlung, Erfinder des wohl ersten Akkumulators und Begründer der wissenschaftlichen Elektrochemie. Mit ihm darf der akademische Stammbaum von Peter Paufler beginnen, der am 18. Februar 2020, fast 250 Jahre später, seinen 80. Geburtstag feierte. Die Kristallographie schien Ritter noch nicht zu beeindrucken. Denn obwohl er mit dem deutschen Mineralogen und Begründer der geometrischen Kristallographie Christian Samuel Weiss lange befreundet war, fanden beide mit ihren wissenschaftlichen Arbeiten keine Verbindung zueinander [2].

Während der Jenaer Zeit Ritters besuchte ihn der dänische Physiker und Chemiker **Hans Christian Ørsted** (*14.08.1777 – †09.03.1851). In Ritter fand Ørsted seinen verehrten Lehrer und Freund. Nachdem Ørsted zur Naturphilosophie des deutschen Philosophen Immanuel Kants promoviert hatte [3], wurde er zum Entdecker des Zusammenhangs zwischen Magnetismus und Elektrizität. Zudem gelang ihm die Darstellung des Aluminiums in reiner Form. Kontinuierlich arbeitete er auch an der „Wechselwirkung fundamentaler Kräfte“. Nach einer Diskussion mit Weiss schlussfolgerte er, dass die gleichen fundamentalen Kräfte sowohl die Kristallisation als auch den Elektromagnetismus erklären müssten [3].

Als Ørsted in Kopenhagen eine Professur für Physik annahm, wurde der norwegische Mathematiker, Physiker und Astronom **Christopher Hansteen** (*25.11.1784 – †11.04.1873) sein erster Student [3]. Wie Ørsted beschäftigte sich auch Hansteen mit Magnetismus. Er betrieb ein *Data Mining* zum Erdmagnetismus und erstellte damit detailreiche Karten. Infolge dieser Arbeiten wurde er auf eine Professur an die gerade gegründete Universität Christiania (Oslo) berufen. Eine weitere Entdeckung betraf das Nordlicht, dessen Erscheinung er erstmals in den Zusammenhang mit dem Erdmagnetismus setzte [4]. Hansteen führte zudem verschiedenste Expeditionen durch, wobei die Darstellungen einer Reise ins russische Sibirien populär wurden. Er wurde daraufhin Ehrenmitglied der Russischen Akademie der Wissenschaften in St. Petersburg [4].

Die Sibirienreise wollte Hansteen ursprünglich gemeinsam mit dem norwegischen Geologen, Geographen und Bergsteiger **Balthazar Matthias Keilhau** (*02.11.1797 – †01.01.1858) durchführen, der an der Universität Christiania Lektor der Bergwissenschaften war und für den Hansteen zunächst als Lehrer und dann als Mentor fungierte [4]. Keilhau studierte an der Universität Christiania Mineralogie und graduierte dann als erster Student in diesem Fachgebiet [5]. Gemeinsam mit dem norwegischen Mathematiker Niels Henrik Abel unternahm Keilhau eine Reise durch Europa, wobei er in Berlin die Mineralogie bei Weiss und in Freiburg die Geologie und Kristallographie bei dem deutschen Geologen und

Kristallographen Carl Friedrich Naumann vertiefte [5]. Nachdem Keilhau zum Universitätslektor berufen wurde, entwickelte er sich dort zum führenden Wissenschaftler und Begründer der norwegischen Geologie unter Einbeziehung der Mineralogie [6]. Am bekanntesten ist seine detailreiche Vermessung und Kartierung Norwegens sowie die diesbezüglich angefertigten detailreichen und künstlerischen Skizzen, Zeichnungen, Aquarelle und geologische Karten.

Ein herausragender Student Keilhau war der norwegische Geologe **Theodor Kjerulf** (*30.03.1825 – †25.10.1888). Keilhau empfahl ihm zu reisen und so viel Geologie und Chemie zu studieren wie möglich und die Chemie dann auf geologische Probleme anzuwenden [7]. Dementsprechend reiste Kjerulf u. a. nach Deutschland, wo er beim deutschen Geologen und Chemiker Karl Georg Gustav Bischof und ein halbes Jahr beim deutschen Chemiker Robert Wilhelm Eberhard Bunsen verbrachte. Kjerulf wurde Nachfolger von Keilhau und Professor für Geologie an der Universität Christiania [7]. Er erkannte die Bedürfnisse der Gesellschaft nach geologischem Wissen [8] und gründete daher den Norwegischen Geologischen Dienst (*Norges geologiske undersøkelse* – NGU), dessen erster Direktor er wurde. Kjerulf führte Norwegen in die moderne wissenschaftliche Geologie, die fortan auf quantitativer, chemischer Analyse und Mikroskopie basieren sollte [9].

Zu Kjerulfs bekanntesten Studenten wiederum gehörte der norwegische Mineraloge, Geologe, Paläontologe und Archäologe **Waldemar Christofer Brøgger** (*10.11.1851 – †17.02.1940), den man auch als „Chef“ oder „Bismarck“ der norwegischen Wissenschaft bezeichnet [10]. Zu seinen herausragendsten Arbeiten gehören die mineralogischen Untersuchungen des Langesundsfjords, insbesondere die Erforschung der Seltenen Erden enthaltenden Pegmatite, die er während seiner Zeit als Professor für Mineralogie und Geologie an der Universität Stockholm durchführte [11]. Seine Antrittsvorlesung in Stockholm trug den Titel „Die Bedeutung der Kristallographie für die moderne Petrographie und – durch sie – die Geologie“ [11]. So rückte in dieser Zeit auch die Kristallographie – wahrscheinlich durch eine Zusammenarbeit mit dem deutschen Geologen und Mineralogen Johann Jacob Gerhard vom Rath inspiriert [12] – weiter in den Fokus der skandinavischen Wissenschaften, wobei sich Brøggers Institut für Mineralogie zum aktivsten Mineralogie-Institut Nordeuropas entwickelte [11]. Später nahm er den Ruf auf eine Professur für Mineralogie und Paläontologie an die Universität Christiania als Nachfolger Kjerulfs an [9]. Der größte Teil von Brøggers Memoiren war einer detaillierten kristallographischen, optischen und chemischen Untersuchung der mehr als siebzig Minerale der Pegmatite gewidmet, die er in einer 898-seitigen Monographie beschrieb [11, 13]. Kurz nach der Entdeckung der Beugung von Röntgenstrahlen bezog Brøgger die Röntgendiffraktometrie in seine Arbeiten ein.

Ein herausragender, wenn nicht sogar der berühmteste Student Brøggers war der Schweizer Kristall- und Geochemiker **Victor Moritz Goldschmidt** (*27.01.1888 – †20.03.1947). Brøgger war so von Goldschmidt überzeugt, dass er nicht nur als Lehrer sondern vor allem als sein Mentor fungierte und ihn auch für den Nobelpreis vorschlug [14]. Früh wurde Goldschmidt von Brøgger auf Exkursionen mitgenommen, sodass er mit dem deutschen Mineralogen und führenden Kristallographen der damaligen Zeit, Paul von Groth, den Goldschmidt daraufhin auch besuchte, zusammentraf. Die im Zusammenhang mit den Exkursionen durchgeführten Arbeiten flossen in seine 483 Seiten umfassende Dissertation ein. Kurz darauf wurde er Professor und Direktor am Mineralogischen Institut der Universität Christiania. Später wechselte er an die Universität Göttingen, von der er, bedingt durch die Judenverfolgung durch die Nationalsozialisten, bald zurück nach Norwegen und dann nach England fliehen musste. Goldschmidt kombinierte in seiner akademischen Zeit verschiedene Wissenschaften und erschuf damit das Gebiet der strukturellen Chemie. Seine Arbeiten über

die relative Häufigkeit der Elemente, Atom- und Ionenradien, interionische Abstände, die Auswirkung des Radiusverhältnisses auf die Koordinationszahl in Kristallen, den Ersatz von Ionen in Mineralen und die Lanthanidenkontraktion finden sich in vielen Lehrbüchern der Chemie. Er hat die Grundlage für die moderne Kristallchemie und die Geochemie zur Interpretation der Eigenschaften anorganischer Substanzen geschaffen [14]. Die Röntgendiffraktometrie und -spektroskopie wurden bereits in Christiania seine wichtigsten Methoden zur Bestimmung der Kristallstruktur und des Elementgehalts [13]. Inspiriert hat ihn sicherlich Brøgger sowie eine Zusammenarbeit mit dem britischen Physiker und Nobelpreisträger William Henry Bragg. Mithilfe der Röntgendiffraktometrie bestimmte Goldschmidt Kristallstrukturen von mehr als 200 Verbindungen mit 75 Elementen, aus denen er viele Atom- und Ionenradien extrahierte. Dieses *Data Mining* diente als Grundlage für seine Gesetze zur geochemischen Verteilung der Elemente auf der Erde bzw. im Universum [14].

In der Göttinger Zeit Goldschmidts studierte und promovierte der deutsche Metallphysiker und Kristallchemiker **Gustav Ernst Robert Schulze** (*24.02.1911 – †05.10.1974) als einer von Goldschmidts besten Studenten bei ihm [15]. Er spezialisierte sich bei Goldschmidt hinsichtlich kristallographischer Verfahren wie der Röntgenkristallstrukturanalyse und Methoden der Kristallchemie [15]. Anschließend arbeitete er am Kaiser-Wilhelm-Institut (KWI) für Chemie in Berlin, welches von Otto Hahn geleitet wurde, wo er einen Arbeitsplatz für die Aufnahme von Röntgenpulverdiffraktogrammen nach dem Debye-Scherrer-Verfahren errichtete. Später wechselte er über das Physikalische Institut der Universität Greifswald, wo er magnetische Eigenschaften im Zusammenhang mit der Kristallstruktur untersuchte [15], zum KWI für Metallforschung in Stuttgart. Dort geriet er unter den Einfluss der deutschen Physiker Richard Glocker, der beim deutschen Physiker und Nobelpreisträger für Physik Wilhelm Conrad Röntgen promoviert hatte, und Ulrich Dehlinger, der beim deutschen Physiker Paul Peter Ewald promoviert und bei Glocker habilitiert hatte. Schulze beschäftigte sich in Stuttgart u. a. mit der Kristallchemie der intermetallischen AB₂-Verbindungen (Laves-Phasen). Er erhielt bald eine Dozentur für Experimentalphysik an der TH Dresden, die er als Folge des Zweiten Weltkriegs aufgeben musste. Es schlossen sich mehrere Jahre der Internierung im russischen Samara und Moskau an, wo er sich mit thermodynamischen Problemen der Triebwerkstechnologie befasste. Nach seiner Rückkehr nahm er einen Ruf als Professor für Röntgenkunde und Metallphysik, dann als Professor für Experimentalphysik an die TU Dresden an. Zu den Forschungsgebieten Schulzes gehörten die Metallphysik, die Kristallchemie, die Kristallographie und die Röntgenkunde. Er beschäftigte sich vorwiegend mit Metallen und intermetallischen Phasen, wobei er nicht die chemischen, sondern die mechanischen Eigenschaften (Festigkeit) in den Fokus rückte [15]. Sein Institut avancierte auf Beschluss des Ministerrats der DDR zum wissenschaftlichen Leitinstitut für die Entwicklung und Produktion von Röntgenfeinstruktur- und -spektroskopiegeräten. Kommissarisch übernahm er auch das Institut für Mineralogie und Geologie der TU Dresden. Er engagierte sich national und international aktiv im Nationalkomitee für Kristallographie der DDR bzw. der Deutschen Vereinigung für Kristallographie (VfK).

Der bekannteste „Schüler“ Schulzes ist der Jubilar selbst, der deutsche Physiker und Kristallograph **Peter Paufler** (*18.02.1940). Peter Paufler promovierte und habilitierte sich bei Schulze zur Plastizität intermetallischer Verbindungen bzw. zur Analyse des Mechanismus plastischer Verformung in spröden metallischen Festkörpern. Nach Auslandsaufenthalten an der Lomonossow-Universität sowie am Vereinigten Institut für Kernforschung (VIK) in Dubna nahm er als Nachfolger des deutschen Mineralogen und Kristallographen Hermann Heinrich Neels einen Ruf als Professor für Kristallographie an die Universität Leipzig an, wo er gleichzeitig Direktor des Instituts für Kristallographie, Mineralogie und Materialwissenschaft wurde. Nach der Wiedervereinigung wechselte Peter Paufler an die TU Dresden,

wo er bis zu seiner Emeritierung Professor für Kristallographie blieb. Peter Paufler engagierte sich in zahlreichen ehrenamtlichen Tätigkeiten und in wissenschaftlichen Vereinigungen [16]. So war er u. a. Vorsitzender der VfK, der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft und der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK). Wie im nachfolgenden Beitrag geschildert, verbindet Peter Paufler eine intensive Kooperation mit dem russischen Geologen, Kristallographen und Materialwissenschaftler Stanislav Konstantinovich Filatov aus St. Petersburg, dem akademischen Nachfahren des russischen Mathematikers, Kristallographen und Mineralogen Evgraf Stepanovich Fedorov. Eine neue nach Peter Paufler benannte Mineralart, das Pauflerit, symbolisiert die Ergebnisse dieser deutsch-russischen Zusammenarbeit. Peter Pauflers Forschungsthemen umfassen ein breites Spektrum an kristallphysikalischen, kristallchemischen, kristallographischen und mineralogischen Themen sowie Themen aus den Bereichen Kunst und Archäologie und insbesondere der Wissenschaftsgeschichte. Schwerpunkte seiner wissenschaftlichen Arbeiten betreffen den Mechanismus und die theoretische Behandlung der plastischen Eigenschaften von Festkörpern, methodische Arbeiten auf dem Gebiet der Nanohärtemessungen sowie der Röntgenanalyseverfahren mit Schwerpunkt auf der Nutzung von Synchrotronstrahlung, halbleitenden III-V-Verbindungen, Supraleiter und Struktur-Eigenschaft-Beziehungen von insbesondere intermetallischen (Seltenerd-) Verbindungen.



Damit lässt sich der akademische Stammbaum Peter Pauflers über 245 Jahre bis ins Jahr 1776 zurückverfolgen und umfasst neun Generationen. Der Stammbaum zeigt eine Linie der historischen Entwicklung der Kristallographie auf, die sich als wichtiges und zeitloses Fachgebiet über drei Jahrhunderte bis heute weiterentwickelt hat. Der Stammbaum ist zudem durch die Fachgebiete Physik und Magnetismus, die Röntgenanalytik und Seltenerdverbindungen charakterisiert und weist starke Bezüge zur Wissenschaftslandschaft Deutschlands (Dresden, Freiberg, Göttingen, Leipzig) und Norwegens (Oslo) sowie zu Russland (Moskau, Samara, St. Petersburg) auf.

Dieser Text ist ein Ausschnitt eines ausführlichen Artikels zur akademischen Genealogie Peter Pauflers [17].

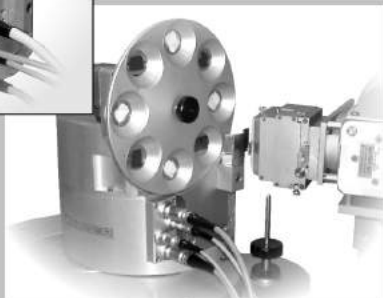
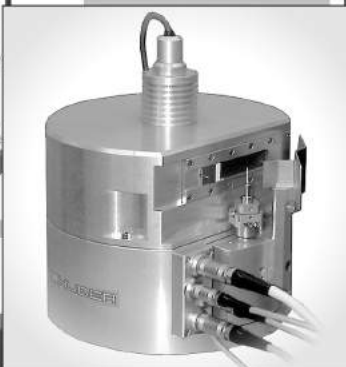
Tilman Leisegang, Dresden

Referenzen

- [1] B. v. Arnim, C. Brentano: Frühlingskranz, Jazzybee Verlag Jürgen Beck, Altenmünster, 2012.
- [2] K. Richter: Das Leben des Physikers Johann Wilhelm Ritter, Ein Schicksal in der Zeit der Romantik, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2003.
- [3] D. C. Christensen: Hans Christian Ørsted – Reading Nature’s Mind, Oxford University Press, Oxford, Großbritannien, 2014.
- [4] K. Reich, E. Roussanova: Carl Friedrich Gauß und Christopher Hansteen – Der Briefwechsel beider Gelehrten im historischen Kontext, Walter de Gruyter, Berlin/Boston, 2015.
- [5] Ar. Stubhaug: Ein aufleuchtender Blitz: Niels Henrik Abel und seine Zeit, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2003.
- [6] A. Bjørlykke: En usedvanlig dyktig observatør. GeoPublishing AS, Heggedal, Norwegen, <https://geo365.no/geoprofilen/en-usedvanlig-dyktig-observator> (05.04.2020).
- [7] T. V. Segalstad: Glimpses from the history of mineralogy and the Geological Museum in Oslo. Distributed at 33rd International Geological Congress, Oslo, Natural History Museum, University of Oslo, 11.08.2008, <http://folk.uio.no/tomvs/minerals/geo4910/Mineralogy-Geomus-Oslo.pdf> (10.04.2020).
- [8] A. Bjørlykke: Geologi for samfunnet; arven fra Kjerulf. Norwegian Geological Survey, <https://www.ngu.no/filearchive/91/ArneBjørlykke.pdf> (10.04.2020).
- [9] I. B. Ramberg: The Making of a Land: Geology of Norway, Geographical Society of Norway, Oslo, 2008.
- [10] W. C. Brøgger, Norwegisches Polarinstitut, Gemeinde Tromsø & Universität Tromsø, <http://polarhistorie.no/personer/brogger%2C%20Waldemar%20Christoffer.html> (10.04.2020).
- [11] C. E. Tilley: Waldemar Christopher Brøgger, 1851 – 1940, Obituary Notices of Fellows of the Royal Society 3 (1941) 503.
- [12] W. C. Brøgger, G. Rath: Ueber grosse Enstatit-Krystalle, Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials 1 (1877) 18.
- [13] B. Mason: Victor Moritz Goldschmidt: Father of Modern Geochemistry, Geochemical Society, Washington, USA, 1992.
- [14] G. B. Kauffman: Victor Moritz Goldschmidt (1888–1947): A Tribute to the Founder of modern Geochemistry on the Fiftieth Anniversary of his Death, The Chemical Educator 2, Springer Verlag, New York, 1997.
- [15] P. Paufler: Gustav Ernst Robert Schulze: Metallphysiker, Kristallchemiker, Hochschullehrer, Sächsische Akademie der Wissenschaften, Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse, Band 96, Heft 6, Leipzig, 2013.
- [16] https://dgk-home.de/media/pdf/wuerdigung_paufler.pdf (27.04.2020).
- [17] T. Leisegang, A. A. Levin, A. Kupsch: From the Ritter pile to the aluminum ion battery – Peter Paufler’s academic genealogy, Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials (2020) DOI: 10.1515/zkri-2020-0063.

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry



HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

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

HUBER
X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

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

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

STANISLAV K. FILATOV UND DER NEUBEGINN RUSSISCH-DEUTSCHER ZUSAMMENARBEIT IM OSTEN

Als die DDR 1990 dem Grundgesetz beitrug, waren auch jahrzehntelange deutsch-russische Forschungs-kooperationen vom grundlegenden Wandel betroffen. Zum ideologisch notwendigen Paradigmenwechsel („Von der Sowjetunion lernen, heißt siegen lernen“ hin zur sachlichen und Jahrhunderte überspannenden Wertschätzung der Pionierleistungen russischer Gelehrter) traten vor allem neue Prinzipien der Forschungsförderung¹ und neue Möglichkeiten effizienter Arbeit². Bei allen Veränderungen konnten Natur- und Ingenieurwissenschaftler ihre Forschungsthemen im Unterschied zu Geisteswissenschaftlern auch weiterhin aus dem aktuellen internationalen Erkenntnisstand ableiten und bisher gewonnene Erfahrungen unmittelbar nutzen.



Der weiteren Entwicklung kam zugute, dass aus früheren gemeinsamen Projekten enge persönliche Beziehungen der Akteure über die Grenzen hinweg entstanden waren und nicht zuletzt die Vertrautheit der Ostdeutschen mit der russischsprachigen Fachliteratur³ ein Alleinstellungsmerkmal im deutschen Sprachraum darstellte.

Als Stanislav K. Filatov (geb. 1940; Dr. geol.-mineral. Wiss.) 1990 zum Professor am Lehrstuhl für Kristallographie⁴ der Staatlichen Universität St. Petersburg ernannt worden war, bemühte er sich bald auch um wissenschaftliche Kontakte zu Kristallographen in Deutschland. Er hatte damals schon ein umfangreiches Werk zur Hochtemperatur-kristallchemie vorgelegt mit besonderem Augenmerk auf das Vorhandensein und die strukturelle Interpretation negativer thermischer Ausdehnungskoeffizienten. Gemeinsam mit seiner Frau Rimma S. Bubnova sammelte er umfangreiches Datenmaterial dafür. Zu dieser Zeit standen die neuen Hochtemperatursupraleiter vom Typ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ gerade als vielversprechendes Material im Fokus der Festkörper- und Strukturforschung, und S. K. Filatov zeigte sich auch an den Ausdehnungskoeffizienten dieser neuen Substanz interessiert. In Leipzig hatten wir 1990 eine Diplomarbeit zur röntgenographischen

¹ Vielfältiger und differenzierter, z. B. durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), den Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD), die Alexander von Humboldt-Stiftung, die Volkswagen-Stiftung u. a.

² Stichworte: konvertierbare Binnenwährung, Reisefreiheit, Publikationsfreiheit.

³ Die Selbstverordnete Nichtkonvertierbarkeit der DDR-Währung behinderte auch die Beschaffung von Fachliteratur aus der alten BRD. Sowjetische Verlage fühlten sich vor 1990 nicht an Copyright-Ansprüche gebunden, so dass im DDR-Buchhandel Übersetzungen deutscher Lehrbücher und Monographien ins Russische leicht verfügbar waren und noch dazu sehr preisgünstig, weil stark subventioniert.

⁴ Er leitete den Lehrstuhl seit 1989 als Nachfolger von Viktor A. Frank-Kamenetskij.

Strukturverfeinerung ausgegeben⁵ und dazu Proben aus den Keramischen Werken Hermsdorf verwendet. Dieses Präparat bildete so das entscheidende Bindeglied für das erste gemeinsame Projekt (Ausdehnungskoeffizienten vs. Strukturparameter) zwischen der Gruppe S. K. Filatov in St. Petersburg⁶ und einer deutschen Gruppe in Leipzig bzw. anschließend in Dresden⁷. Die Ergebnisse konnten zur ersten *European Powder Diffraction Conference* (EPDIC) 1991 in München vorgetragen werden⁸.

Daraus entwickelte sich ein regelmäßiges enges Miteinander der Akteure, das bis zum heutigen Tag Bestand hat, wenn auch der Schwerpunkt auf die jüngere Generation übergeht. Komponenten waren Arbeiten an ausgewählten Themen mit gemeinsamen Veröffentlichungen, Austausch von Präparaten für Experimente, Ergänzung in Experimentiermethoden und Beteiligung an der Organisation gemeinsamer Tagungen. Die Ergebnisse sind bisher in 20 Publikationen⁹ in wissenschaftlichen Zeitschriften und 42 Vorträgen auf internationalen Tagungen öffentlich gemacht worden.

Von besonders nachhaltiger Wirkung erwiesen sich der Austausch von Nachwuchswissenschaftlern (z. B. bis zu 6-monatige Forschungsstipendien) und die Unterstützung russischer Doktoranden mit Sachbeihilfen durch deutsche Förderinstrumente¹⁰. Mit Maria G. Krzhizhanovskaja arbeitet eine der Stipendiatinnen inzwischen erfolgreich als Dozentin am Lehrstuhl Kristallographie und leitende Mitarbeiterin im Zentrum für röntgendiffraktometrische Untersuchungsmethoden. Einige der russischen Stipendiatinnen blieben anschließend permanent in Deutschland. Für die Zusammenarbeit zwischen den Universitäten Dresden und St. Petersburg stellte der Postdoktorand Aleksandr A. Levin insofern eine besonders wirkungsvolle Verstärkung dar, als er 7 Jahre lang Projekte in der Rolle eines Dresdner Mitarbeiters tatkräftig unterstützte¹¹.

Dabei waren die eingesetzten Mittel vergleichsweise bescheiden. Zu der in der Anfangszeit dominierenden Unterstützung des Wissenschaftleraustauschs in beiden Richtungen über den DAAD und des Materialverbrauchs durch die DFG trat von russischer Seite zunehmend die – inzwischen analog zur DFG dort aufgebaute – Förderung mit Hilfe des „Rossijskij fond fundamental'nych issledovanij“ (RFFI) bzw. der „Russian Foundation for Basic Research“ (RFBR). Bestand in den neunziger Jahren noch Nachholbedarf in der Ausrüstung mit modernen Röntgenstrahldiffraktometern, so hat sich unter anderem dank eines Sonderfonds des Präsidenten der Russischen Föderation die Ausstattung mit Geräten wesentlich verbessert.¹²

⁵ Utta Wachtel: Methodische Einflüsse auf das Ergebnis einer Rietveld-Verfeinerung am Beispiel des Hochtemperatursupraleiters $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, Diplomarbeit Inst. f. Kristallographie, Mineralogie und Materialwissenschaft, Univ. Leipzig, 1991.

⁶ Die Stadt erhielt ihren ursprünglichen Namen St. Petersburg erst im September 1991 durch Umbenennung von Leningrad.

⁷ Der Verfasser erhielt 1991 den Ruf nach Dresden.

⁸ U. Wachtel, M. G. Gorskaja, S. K. Filatow, P. Paufler, W. Schmitz: Temperature dependence of the lattice constants of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, *Materials Science Forum* 79 (1991) 935–940 (EPDIC 1, Munich).

⁹ Die jüngste in diesem Jahr ist einem Blick auf die frühe Geschichte der deutsch-russischen Zusammenarbeit gewidmet: P. Paufler, S. K. Filatov, *Minerals* 10 (2020) 181.

¹⁰ In diesem Rahmen erhielten 6 Doktoranden und 1 Postdoktorand Stipendien des DAAD an der TU Dresden und 2 Dresdner Diplomanden Stipendien für die Arbeit in St. Petersburg.

¹¹ Er ist in dieser Zeit Mitautor von 37 Veröffentlichungen geworden.

¹² Die Experimentiertechnik ist an der Universität in einem „Wissenschaftspark“ zentralisiert, der 26 „Ressourcen-Zentren“ umfasst, wobei einem davon alle röntgendiffraktometrischen Methoden und notwendigen Mitarbeiter zugeordnet sind. Unter anderem stehen diesem Zentrum rund 10 moderne Einkristall- und Pulverdiffraktometer zur Verfügung.

Stanislav Konstantinovich Filatov hat über einen Zeitraum von etwa 40 Jahren wesentliche Erkenntnisse zum Auftreten, der Systematik und der Deutung des Phänomens der negativen thermischen Ausdehnung gewonnen, die ihn zu einem der tiefsten Kenner dieses Effekts hat werden lassen. Mit den besonders intensiv bearbeiteten Boraten und Borosilikaten¹³, deren praktische Bedeutung sich aus dem Bedarf an kleinen thermischen Ausdehnungskoeffizienten zur Vermeidung thermischer Spannungen ergibt, bewegt er sich im Grenzgebiet zwischen Mineralogie, Feststoffchemie und Glastechnologie. Immer wieder hat er die Brücke zwischen dem scheinbar anomalen Ausdehnungs-Verhalten einzelner Stoffe und dem strukturellen Hintergrund geschlagen und somit die maßgeschneiderte Werkstoffentwicklung in besonderer Weise stimuliert. Zu seinem umfangreichen Werk gehört eine Reihe von Monographien und Lehrbüchern mit dem Schwerpunkt Kristallchemie¹⁴.

Prof. Filatov war von 1989 bis 2002 Leiter des Lehrstuhls für Kristallographie, dem er auch heute noch angehört¹⁵. Er ist Mitglied der Russischen Akademie der Naturwissenschaften und mehrfach für seine wissenschaftliche und pädagogische Arbeit ausgezeichnet worden¹⁶, darunter auch mit der Georg-Agricola-Medaille der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft 2009. Als Leiter der Kommission für Kristallchemie und Röntgenographie der Minerale innerhalb der Mineralogischen Gesellschaft Russlands beteiligt er sich aktiv an der Gestaltung des wissenschaftlichen Lebens seines Landes. Auf zahlreichen Exkursionen hat er insbesondere Minerale nach Ausbruch des Vulkans Tolbačik auf Kamčatka 2012 untersucht und an der Entdeckung einer Reihe neuer Minerale Anteil.

Mit Sergej Vladimirovič Krivovičev hat er inzwischen einen schon in jungen Jahren international angesehenen Nachfolger im Amt des Lehrstuhlleiters und kreativen Wissenschaftler gefunden¹⁷.

Auf der Suche nach Stoffen mit neuartigen Eigenschaften braucht es eine leistungsfähige Präparation. Es ist ein glücklicher Umstand, dass mit Rimma S. Bubnova, leitende Mitarbeiterin im Institut für Silikatchemie der Russischen Akademie der Wissenschaften und Professorin am Lehrstuhl für Kristallographie der Universität eine sehr erfahrene und gut ausgestattete Physikochemikerin an den Projekten maßgebend beteiligt ist.

¹³ Darunter die Systeme LiB_3O_5 (kristallin und Glas), RbB_5O_8 , $\text{Rb}_2\text{O}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$, $\text{K}_{1-x}\text{Cs}_x\text{BSi}_2\text{O}_6$ ($x = 0, 0.12, 0.50, 1.0$), $(\text{K,Rb})\text{BSi}_2\text{O}_6$, $(\text{Rb,Cs})\text{BSi}_2\text{O}_6$, $\text{CsBSi}_5\text{O}_{12}$, $(\text{Cs,Rb})\text{BSi}_5\text{O}_{12}$, RbBSi_2O_6 -Glas, nanoporöses Na-Borosilikatglas.

¹⁴ S. K. Filatov, R. S. Bubnova, S. V. Krivovičev, Systematische Kristallchemie, Univ. St. Petersburg, 2019 (russ.); S. K. Filatov, S. V. Krivovičev, R. S. Bubnova, Allgemeine Kristallchemie: Ein Lehrbuch. Univ. St. Petersburg, 2018 (russ.); R. S. Bubnova, S. K. Filatov, Hochtemperaturkristallchemie von Boraten und Borosilikaten, St. Petersburg, Nauka, 2008 (russ.); E. N. Kotelnikova, S. K. Filatov, Kristallchemie von Paraffinen. SPb, Neva, 2002 (russ.); S. V. Krivovičev, S. K. Filatov, Kristallchemie der Minerale etc., I.c. 2001 (russ.); S. K. Filatov, R. Hazen, High-temperature and high-pressure Crystal Chemistry, In: Advanced Mineralogy, Vol. 1, Ed. A. S. Marfunin, Springer, 1994, p. 76–90.

¹⁵ In der aktuellen Struktur gehört die Kristallographie zu einem von 25 Lehrstühlen des Instituts für Erdwissenschaften der Universität St. Petersburg.

¹⁶ 1995 Wahl zum Mitglied der Russischen Akademie der Naturwissenschaftler, 1999 Verdienter Wissenschaftler der Russischen Föderation, 1999 Preis der Staatl. Univ. St. Petersburg für hervorragende pädagogische Leistungen, 2000 V. A. Frank Kamenekki-Preis der Universität, 2003 Preis der St. Petersburger Gesellschaft der Naturforscher – gemeinsam mit S. V. Krivovičev – als beste wiss. Arbeit: „Kristallchemie der Minerale und anorganischen Verbindungen mit Komplexen anionenzentrierter Tetraeder“ (russ.), St. Petersburg 2001.

¹⁷ S. Krivovičev hat nicht nur zahlreiche ehrenvolle Aufgaben in internationalen wissenschaftlichen Gremien übernommen, er erfreut sich auch hoher Auszeichnungen der Regierung der Russischen Föderation und als Diakon der russisch-orthodoxen Kirche.

In seinem 80. Lebensjahr kann Prof. S. K. Filatov auf ein erfolgreiches Schaffen zurückblicken, darunter auch auf rund dreißig Jahre Förderung der russisch-deutschen Zusammenarbeit. Die mit ihm arbeiten durften und dürfen profitieren dankbar von seinen breiten mineralogischen Erfahrungen sowie von seinem liebenswürdigen und bescheidenen Wesen. Der Verfasser wünscht Stanislav Filatov stellvertretend für die Dresdner Partner fortdauernde Freude an kristallchemischen Exkursen und die Schaffenskraft dafür.

Peter Paufler, Dresden

NACHRUF AUF HARRY MÜLLER, BILDHAUER IN LEIPZIG



Der Bildhauer Harry Müller, der erste Preisträger des DGK-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie (verliehen 2010), ist am 19.04.2020 in seinem Zuhause in Leipzig verstorben.

Der 1930 in Leipzig geborene Künstler begann seine Ausbildung an der Fachschule für angewandte Kunst in Leipzig und studierte danach Bildhauerei an der Hochschule für bildende und angewandte Kunst in Berlin-Weißensee. Bereits während seines Studiums entwickelte Harry Müller seine eigene abstrakt-geometrische Formsprache. Er lebte und arbeitete Zeit seines Lebens in Leipzig. In den 1960er und 70er Jahren entstanden seine wohl in der Öffentlichkeit bekanntesten Werke: die denkmalgeschützte, geschwungene Fassade des Konsument-Warenhauses bestehend aus hyperbolischen Paraboloid-Elementen aus Aluminium sowie drei Brunnen-Plastiken aus Chrom-Nickel-Stahl auf dem ehemaligen Leipziger Sachsenplatz (heute stehen diese Plastiken auf dem Leipziger Richard-Wagner-Platz direkt vor der Aluminiumfassade der heutigen Höfe am Brühl). Ebenso gestaltete er Fassaden von Warenhäusern in Cottbus und Hoyerswerda, eine weitere Chrom-Nickel-Stahl-Plastik steht in Schwerin. In den Sammlungen der Leipziger Museen fanden seine Werke ebenfalls Aufnahme.

Harry Müllers künstlerisches Schaffen war geprägt von abstrakt-geometrischen Formen. Er hatte großes Interesse an der Kristallographie, insbesondere an den geometrischen Formen der Kristalle. Dazu möchte ich an dieser Stelle ein Statement Harry Müllers aus dem Jahr 2006 zitieren:

„Geometry was born by the forces of nature, independent of man-made manage, i.e. from forces between atoms, shown in the first formations of lattice structures in clusters of nm size. The growth, layer by layer, has as result a polyhedron with plane faces, of course natural geometrical bodies in a very good approximation to their mathematical counterparts, as Dr. Hofmeister from the Max-Planck-Institute for Microstructure Physics in Halle, Germany, has shown.“

Susan Schorr, Berlin



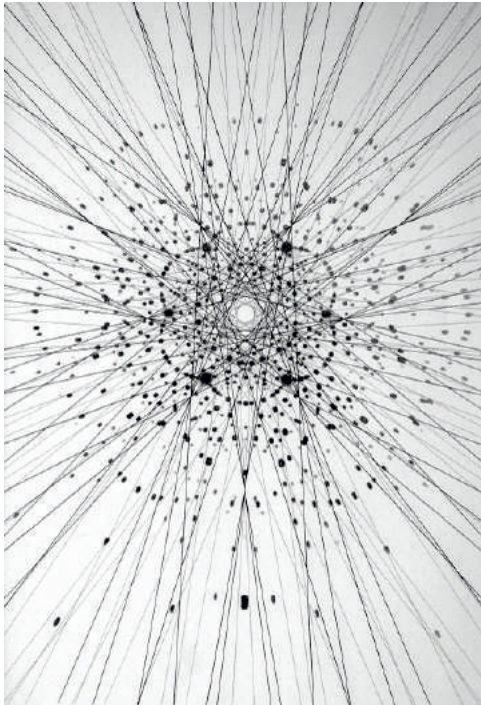
Brunnen auf dem Sachsenplatz in Leipzig, 1972, Chrom-Nickel-Stahl, Höhe 3,50 m



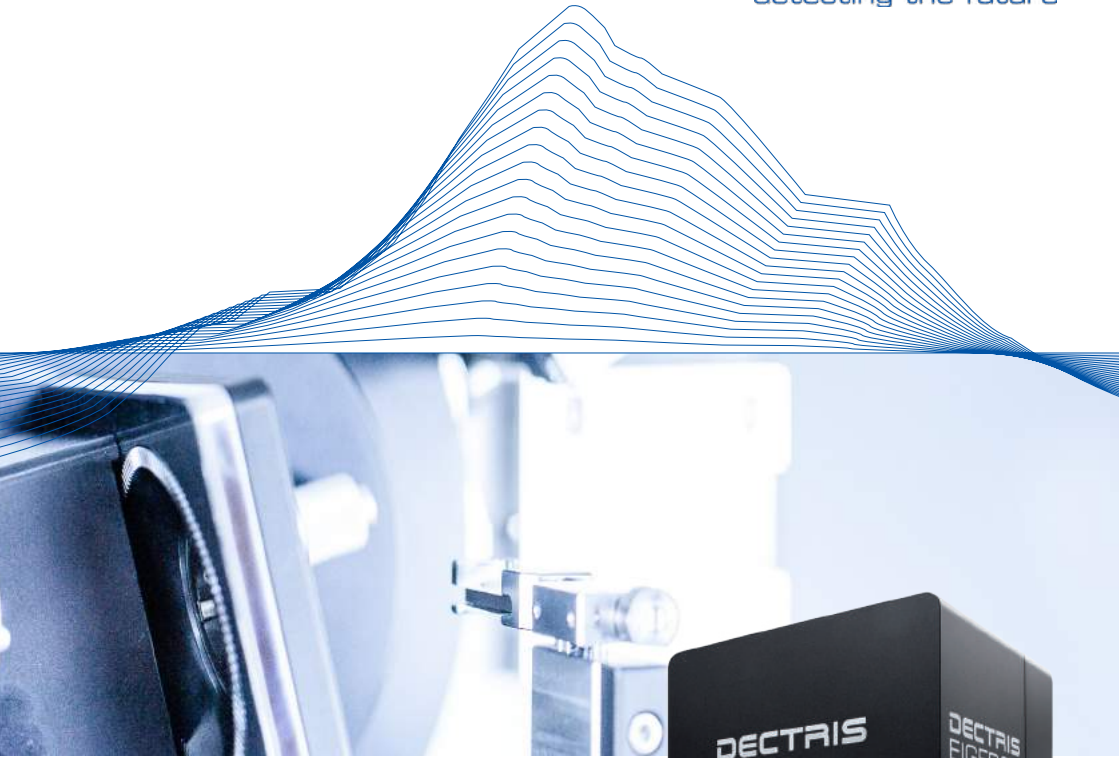
Blick auf das Konsument-Warenhaus mit zwei Brunnenplastiken, 2018



*Galaxis, 1987,
Ausführungsmodell im Maßstab 1:6,
Gips, Höhe 2,50 m*



*Konstruktion III Cubus Simus auf
Laue-Diagramm, 1985,
Tusche auf Karton, 50 x 70 cm*



The detector for XRD without compromises

- Large active area with high spatial resolution
- Superior count rates
- Highest dynamic range
- Efficient suppression of fluorescence, cosmic and white radiation

Available
from DECTRIS and
our OEM partners

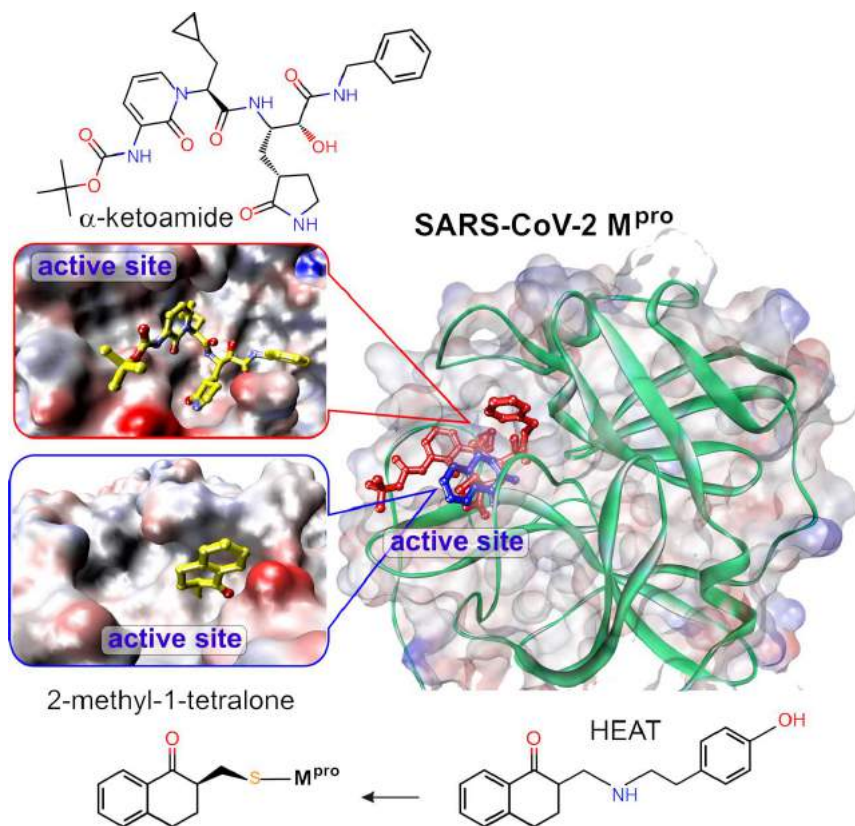
DEUTSCHE SYNCHROTRONS GEGEN DIE CORONAVIRUS-PANDEMIE

Die COVID-19-Pandemie ist eine der größten Herausforderungen unserer Zeit. Sie bedroht unser Gesundheitswesen, unsere Wirtschaft und unsere Gesellschaft als Ganzes auf selten dagewesene Weise. Zur Überwindung der derzeitigen Situation werden große Hoffnungen in die Wissenschaft gesetzt und es ist beeindruckend zu sehen, dass sich hunderte von Forschergruppen weltweit dem Kampf gegen SARS-CoV-2 angeschlossen haben. Auch in der Bundesrepublik, die bisher vergleichsweise glimpflich durch die Corona-Pandemie gekommen ist, sind viele Kollegen an nationalen und internationalen Initiativen beteiligt. Die Kristallographie ist seit Beginn des Ausbruchs bei der Suche nach neuen Wirkstoffen gegen COVID-19 vorne mit dabei [1]. Ein frühes Zeugnis hiervon gab der Plenarvortrag von Rolf Hilgenfeld auf dem *Joint Polish-German Crystallographic Meeting* Ende Februar 2020 in Wrocław, wo Prof. Hilgenfeld seine kurz darauf in der Zeitschrift *Science* veröffentlichten Strukturen der SARS-CoV-2-Hauptprotease M^{pro} im Komplex mit α -Ketoamid-Inhibitoren vorstellte [2]. Beachtlich ist, dass es nur zehn Tage brauchte, um die ersten Proteinkristalle von SARS-CoV-2-M^{pro} zu erzeugen und dass in Zusammenarbeit mit dem BESSY-II-Synchrotron am Helmholtz-Zentrum Berlin bereits drei Tage später hochaufgelöste Diffraktionsdaten zur Verfügung standen.

Während diese Arbeiten auf der jahrzehntelangen Forschung an ähnlichen viralen Proteasen in der Hilgenfeld-Gruppe an der Universität Lübeck fußen, wurden inzwischen zahlreiche neue strukturbiochemische Initiativen zur Identifizierung von Anti-COVID-19-Wirkstoffen begonnen. Exemplarisch wollen wir hier nur zwei Projekte hervorheben, die an den Synchrotron-Messstationen für makromolekulare Kristallographie in Berlin und Hamburg gestartet worden sind.

So verwendet das Team von Manfred Weiss am BESSY II, wiederum in Zusammenarbeit mit der Universität Lübeck, die Methode des Fragment-Screenings, um die Bindestellen „kleiner“ Moleküle an z. B. SARS-CoV-2-M^{pro} mit kristallographischen Hochdurchsatzmessungen zu kartieren. Die so identifizierten Liganden können dann in einem zweiten Schritt durch chemische Methoden wie der kovalenten Verknüpfung in potentere Inhibitoren verwandelt werden, die als Leitstrukturen für neue Medikamente dienen. Auch hier macht sich wieder jahrelange Pionierarbeit bezahlt, die am BESSY II bei der Entwicklung des kristallographischen Fragment-Screenings geleistet wurde.

Allerdings erfordert die Entwicklung neuer Medikamente aufgrund komplexer Entwicklungs-, Test- und Genehmigungsschritte in der Regel viele Jahre – ein Zeitraum, der in der gegenwärtigen Krise inakzeptabel scheint. Deutlich schneller könnte die Umwidmung bereits zugelassener Wirkstoffe zu Medikamenten gegen COVID-19 führen. Am PETRA-III-Synchrotron auf dem DESY-Campus in Hamburg verfolgt man diesen Ansatz. In einer von Alke Meents vom *Center for Free-Electron Laser Science* koordinierten internationalen Zusammenarbeit von 27 Instituten wurden an den Hamburger Strahlrohren innerhalb kürzester Zeit die über 5600 Substanzen der „Fraunhofer IME Repurposing Collection“ aus bekannten Arzneimitteln, klinischen Kandidaten und bioaktiven Substanzen mittels Kokristallisation auf ihre Bindung an SARS-CoV-2-M^{pro} untersucht. Überraschenderweise fanden die Kollegen dabei eine kovalente Modifikation des aktiven Zentrums durch ein Fragment von „HEAT“ (2-((4-Hydroxyphenethylamino)methyl)-3,4-dihydronaphthalen-1(2H)-on), einem kompetitiven Inhibitor von α -Adrenorezeptoren [3].



Röntgenstruktur der SARS-CoV-2-Hauptprotease M^{pro} mit an das aktive Zentrum gebundenem α -Ketoamid- (rot) [2] oder 2-Methyl-1-Tetralon-Inhibitor (blau) [3]. Die Topologie und elektrostatische Ladungsverteilung der Bindungsstellen ist auf den linken Tafeln dargestellt. Die 2-Methyl-1-Tetralon-Gruppe ist durch chemische Reaktion von M^{pro} und HEAT kovalent an das aktive Zentrum gebunden [3].

Was aber ist mit den Kollegen, deren Arbeit unter gegenwärtigen Zugangsbeschränkungen zu eben diesen Strahlenquellen ausgebremst zu werden droht? Die Koordinatoren der Messstationen haben für diese Fälle aktuell einen „Notfalldatensammelservice“ etabliert, der „Mail-in Crystallography“ oder aber an manchen Stationen auch ferngesteuerte Datensammlung ermöglicht. Interessierte wenden sich bitte direkt an die Verantwortlichen an BESSY II oder PETRA III.

[1] Scudellari, Nature 581 (2020) 252–255

[2] Zhang et al., Science 368 (2020) 409–412

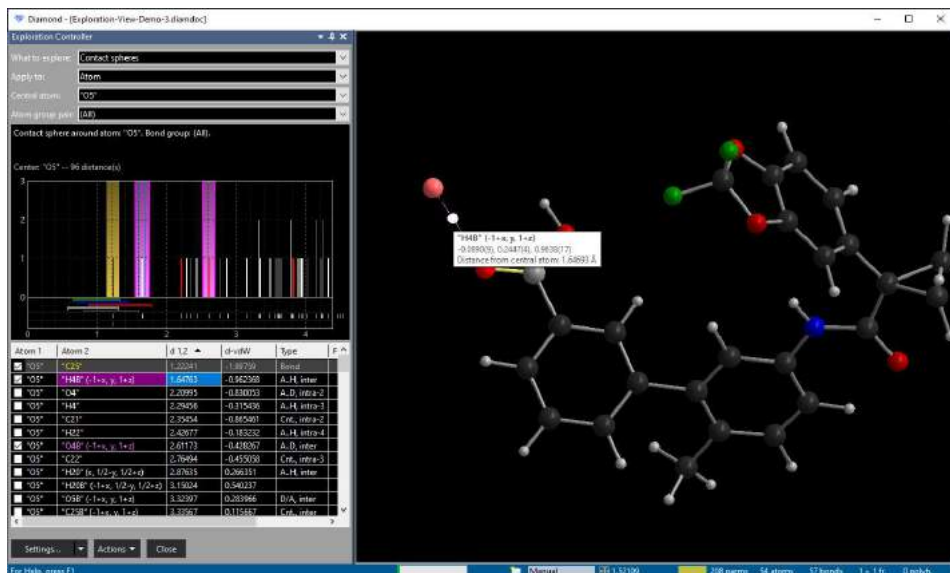
[3] Günther et al., bioRxiv preprint, DOI: 10.1101/2020.05.02.043554

Roman Fedorov, Hannover & Wulf Blankenfeldt, Braunschweig



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Version 5

Die neue Version 5 von Diamond wird um den Jahreswechsel 2020/21 erscheinen.

Eine der herausragenden Neuerungen ist die **Exploration View**, die es ermöglicht, (stark wechselwirkende) Bindungen sowie H-Brücken und nicht-bindende Kontakte bei der Suche nach Nachbaratomen und -molekülen zu studieren. Durch das interaktive Zusammenspiel zwischen Strukturbild, Abstands-histogramm und einer Tabelle der Nachbaratome lassen sich gewünschte Verknüpfungen durch Anklicken leicht einfügen bzw. unerwünschte entfernen.

Mit der neuen Version 5 ersetzen wir das bisherige System kostenpflichtiger Updates durch das sogenannte **Subskriptionsmodell**, das sich bereits seit einigen Jahren in der aktuellen Version 3 von Match!, unserer Software zur Phasenidentifizierung aus Pulverbeugungsdaten, bewährt hat.

Version 5 ist für lizenzierte Nutzer der aktuellen Version 4.x kostenlos.

Nähere Informationen zum Subskriptionsmodell finden Sie unter:

<https://www.crystalimpact.de/subscription.htm>

Zur aktuellen Version 4.6 finden Sie eine kostenlose Demoversion sowie weitere Infos unter:

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



**CRYSTAL
IMPACT**

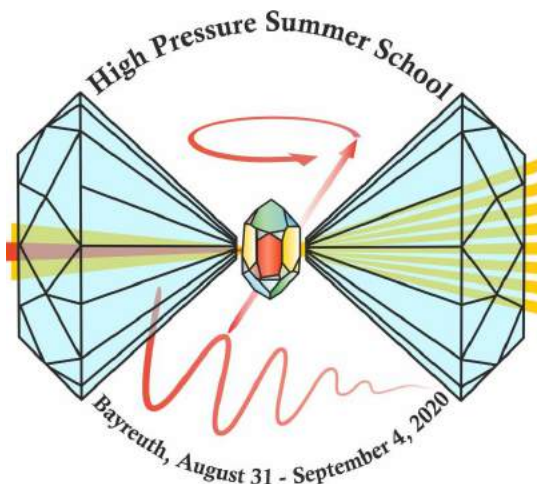
CRYSTAL IMPACT
H. Putz & K. Brandenburg GbR
Kreuzherrenstr. 102
D-53227 Bonn

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

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN

INTERNATIONALE HOCHDRUCK- SOMMERSCHULE 2020 DER IUCr/DGK IN BAYREUTH

EINFÜHRUNG IN NEUE METHODEN DER ATOMAREN UND ELEKTRONISCHEN
STRUKTURFORSCHUNG UNTER HOHEM DRUCK



Vom 31. August bis zum 4. September 2020 fand in Bayreuth die internationale Sommerschule über „neuartige Methoden zur Untersuchung atomarer und elektronischer Strukturen unter hohem Druck“ statt (siehe <https://www.dubrovinskaia.uni-bayreuth.de/en/High-Pressure-Summer-School-2020>). Sie wurde von der IUCr (durch die *IUCr Commission on High Pressure*, CHP) und von der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) genehmigt. Wir erwarteten, unsere Studenten aus der ganzen Welt an der Universität Bayreuth zu empfangen. Die COVID-19-Pandemie hinderte die Teilnehmer jedoch daran, sich im Herzen Bayerns zu versammeln, aber sie unterstützten enthusiastisch die Idee der Organisatoren, über „Zoom“ teilzunehmen. Die Schule war ein großer Erfolg und wir glauben fest daran, dass sie zu einer jährlichen Veranstaltung werden wird.

Die Idee der Sommerschule entstand aus dem Wunsch, die Erfahrungen zu teilen, die innerhalb der Dubrovinsky-Dubrovinskaia-Gruppe (siehe <https://www.dubrovinskaia.uni-bayreuth.de>) gesammelt wurden, deren Forschung während des letzten Jahrzehnts hauptsächlich auf die Entwicklung der Hochdruck-Einkristall-Röntgendiffraktometrie (sc-XRD) und der magnetischen Kernresonanz (NMR) in Diamant-Stempelzellen (DAC) ausgerichtet war. Unsere Anstrengungen ermöglichen sc-XRD- und NMR-Experimente bei hohen Drücken von über ~180 GPa und gleichzeitig Temperaturen von mehreren tausend Grad. Dies hat zu bemerkenswerten Ergebnissen in der Festkörperphysik, Chemie und Materialwissenschaft unter extremen Bedingungen geführt.

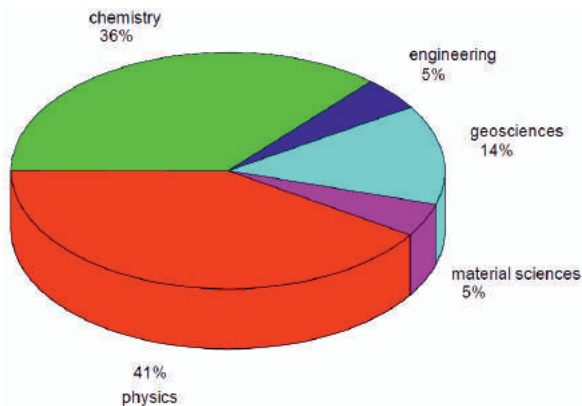


Das Bayreuther Team aus Vortragenden und Studenten (von links nach rechts und von der hinteren Reihe nach vorne): Timofey Fedotenko, Saiana Khandarkhaeva, Dominique Laniel, Thomas Meier, Kirill Vlasov, Sergey Ovsyannikov, Alena Krupp, Andrey Aslandukov, Alena Aslandukova, Natalia Dubrovinskaja, and Leonid Dubrovinsky (Achim Schaller ist nicht auf dem Foto).

Die Schule, deren Organisation von Dominique Laniel und Thomas Meier vorangetrieben wurde, zielte darauf ab, Wissenschaftlern im frühen Karrierestadium (Masterstudenten und Doktoranden, Postdocs) sowie Wissenschaftlern, die auf dem Gebiet der Hochdruckforschung tätig sind, eine Einführung in neuartige Methoden zur Untersuchung atomarer und elektronischer Strukturen bei hohen Drücken in einer Diamant-Stempelzelle zu geben. Der Schwerpunkt wurde auf die neuen Entwicklungen gelegt, die auf dem Gebiet der Hochdruck-sc-XRD und NMR bahnbrechend sind.

Ein Überblick über die notwendigen theoretischen und methodischen Grundlagen, einschließlich der DAC-Vorbereitung und der Strategie der Experimente, wurde durch Vorträge mit zahlreichen Demonstrationen, praktischen Übungen und Schritt-für-Schritt-Tutorials vermittelt. Am Ende des Kurses sollten die Teilnehmer in der Lage sein, grundlegende Hochdruck-sc-XRD- und NMR-Experimente sowie Datenverarbeitung und -interpretation durchzuführen.

Die Sommerschule wurde online von 25 Teilnehmern aus 7 Ländern besucht: Deutschland (8), Indien (6), Frankreich (3), China (3), Italien (2), Großbritannien (2) und Slowenien (1). Darunter befanden sich 11 Doktoranden, sieben Postdoktoranden, 2 Masterstudenten und 5 wissenschaftliche Mitarbeiter. Sie wurden von 12 Dozenten und Dozentinnen unterrichtet, von denen zehn entweder gegenwärtige oder ehemalige Mitglieder unserer Bayreuther Gruppe sind.



Akademischer Hintergrund der Teilnehmer

Der Lehrplan der Sommerschule umfasste 30 Unterrichtsstunden (6 Stunden pro Tag), die sich wie folgt verteilen: Der sc-XRD-Teil von 23 Stunden beinhaltete Kristallographie-Vorlesungen (10 Stunden), die Themen von den Grundlagen der Kristallographie und Röntgenbeugung bis zu fortgeschrittenen Themen der Datenverarbeitung und Software abdeckten, Vorlesungen über die technischen Aspekte der Arbeit mit DACs, einschließlich eines historischen Einblicks (3 Stunden), und Vorlesungen über Synchrotronaufbauten (2 Stunden); zwei Stunden waren Anwendungsfällen gewidmet, die einen Einblick in ein breites Spektrum wissenschaftlicher Probleme in Physik, Chemie und Materialwissenschaften geben sollten, die mit den während der Schule gelehrt Methoden behandelt werden konnten. Die sc-XRD-Praxissitzungen umfassten 6 Stunden Übungen (6 verschiedene Praxissitzungen wurden von vier Ausbildern für 4 Gruppen von Studenten parallel geleitet). Der NMR-Teil von 7 Stunden umfasste NMR-Vorträge (4 Stunden) und praktische Übungen (3 Stunden) für drei Gruppen zu verschiedenen Zeiten.

Zweifelslos unterscheidet sich eine Schule via Zoom sehr von einem Workshop vor Ort. Wie von vielen Dozenten hervorgehoben wurde, stellte das Fehlen eines unmittelbaren Feedbacks des Publikums, insbesondere während der „Lehr“-Vorträge, eine wesentliche Schwierigkeit dar. Interessanterweise besuchte die Mehrheit der Dozenten auch die Vorträge der anderen Dozenten. Für diejenigen, die von der Ostküste der USA aus online zugeschaltet waren, begann die Schule mitten in der Nacht (um 2:30 Uhr), aber, wie einer der Teilnehmer schrieb: „sie genossen die Schule sehr, trotz der Zeitzonendifferenzen zu Deutschland“.

Unter Berücksichtigung der großen Vielfalt an Hintergründen und Vorkenntnissen der Teilnehmer war das Programm der Sommerschule sehr vielfältig. Die Vorträge reichten von den Grundlagen der Symmetrie und NMR über sehr komplexes Material für fortgeschrittene Kristallographen bis hin zu interessanten Fällen aus realen Experimenten. Die Mehrheit der Teilnehmer bewertete diese Breite sehr positiv: Einerseits konnte jeder dem seinem eigenen Wissen entsprechenden Material folgen und es somit verbessern. Andererseits konnte man das über das eigene Niveau hinausgehende Material sehen und es als nächstes Lernziel betrachten.

Eine exemplarische Rückmeldung der Studierenden: „Alle Referenten haben ihre Vorträge auf eine ‚nicht langweilige Art und Weise‘ gehalten, dafür möchte ich ihnen meinen besonderen Dank aussprechen.“

Wir glauben, dass unsere Erfahrungen auch für andere Kollegen nützlich wären, die beabsichtigen, in Zukunft Online-Schulen und -Workshops durchzuführen. Wir haben einige technische Empfehlungen zusammengefasst, die Online-Veranstaltungen noch effizienter machen könnten:

- Es wäre sehr hilfreich, wenn die Teilnehmer alle Materialien und Software mindestens eine Woche vor Kursbeginn ohne Hektik und Stress herunterladen könnten.
- In der Woche vor dem Kurs würden wir vorschlagen, eine/zwei Online-Sitzungen zum Testen der Software zu organisieren: Das würde helfen, mögliche Probleme im Voraus zu beseitigen und wertvolle Zeit zu Beginn des Kurses zu sparen.
- Es sollte im Voraus festgelegt werden, dass die Verwendung eines großen Monitors oder zweier getrennter Monitore während der praktischen Übungen eine wichtige technische Voraussetzung ist, um die praktischen Übungen effizient durchführen zu können. Da mehrere Programme parallel laufen müssen und man schnell zwischen dem gemeinsamen Bildschirm des Dozenten und den eigenen laufenden Programmen hin- und herschalten muss, reicht ein einziger kleiner Monitor nicht aus.
- Die Zeit für die Hands-On-Sitzungen sollte großzügiger eingeplant werden; ein häufiger Vorschlag für unseren sc-XRD-Teil war, sie um den Faktor 1,5 zu erhöhen, d. h. 9 statt 6 Stunden Hands-On zu planen, was bedeutet, dass fast 40 % der Unterrichtszeit für Hands-On eingeplant werden sollten.
- Man sollte sich um die Pausen zwischen den Vorträgen kümmern. Eine angemessene Pausenzeit (bis zu 15 Minuten) würde es nach Meinung der Teilnehmer erlauben, über den gerade beendeten Vortrag nachzudenken und sich auf den folgenden vorzubereiten.

Vortragende: Natalia Dubrovinskaia, Dominique Laniel, Thomas Meier, Konstantin Glazyrin, Saiana Khandarkhaeva, Achim Schaller, Vitali Prakapenka, Stella Chariton, Elena Bykova, Sergey Ovsyannikov, Maxim Bykov, Karen Friese, Leonid Dubrovinsky



Die Schule ist vorbei. Danke an alle und auf Wiedersehen!

Natalia Dubrovinskaia, Dominique Laniel, Thomas Meier und Leonid Dubrovinsky, Bayreuth



IµS DIAMOND – Simply Brilliant

'Diamonds are a crystallographer's best friend'

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

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

Contact us for a personal system demonstration.

www.bruker.com/imsd

JAHRESBERICHT 2019 DES AK 6 „MOLEKÜLVERBINDUNGEN“

Im wissenschaftlichen Programm der Jahrestagung 2019 in Leipzig war unser AK 6 an zwei Mikrosymposien beteiligt. In Absprache mit Synchrotron- und Neutronennutzern haben wir zum Thema „Small molecules at large facilities“ beigetragen und wir haben Poster und Redebeiträge zu „Organic molecules and coordination compounds“ eingeworben. Ebenfalls im Rahmen der Jahrestagung wurde ein Arbeitskreis-Treffen angekündigt und abgehalten.

Zeitlich unmittelbar nach dem GDCh-Wissenschaftforum haben der AK 6 für die DGK und ChemKrist für die Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh bei uns in Aachen den Workshop „Tipps und Tricks für SHELX“ organisiert. Vom 18. bis zum 20. September 2019 konnten sich 41 Interessierte von den Dozenten Michael Bolte (Frankfurt), Daniel Kratzert (Freiburg) und Regine Herbst-Irmer (Göttingen) zu den Themen Constraints & Restraints, Fehlordnungen und Zwillinge in Hinblick auf Theorie und Software informieren lassen und selbst an ihren Problemstrukturen Hand anlegen. Ein etwas ausführlicherer Bericht zum Workshop folgt auf der nächsten Seite. Wir danken der DGK für die Unterstützung, die uns mit den weiteren Geldgebern GDCh, Bruker, STOE, Merck und Sparkasse Aachen sehr günstige Teilnehmergebühren ermöglicht hat.

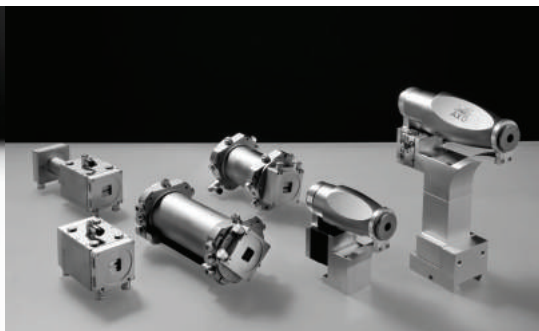
Im laufenden Jahr muss der Kurs „Grundlagen der Einkristalldiffraktion“ im Kloster Hardehausen aufgrund der Kontaktbeschränkungen entfallen; er wird in 2021 wieder stattfinden. Weitere Informationen erhalten Sie von Frau Dr. Cula (beatrice.cula@hu-berlin.de).

Ulli Englert, Aachen

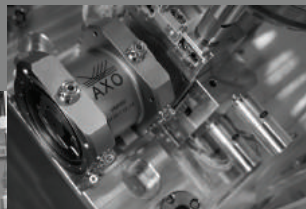
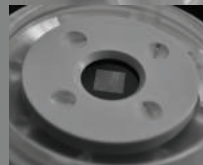
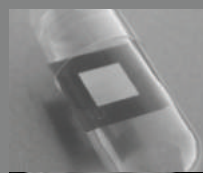
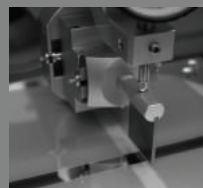


APPLIED X-RAY OPTICS

Multilayer X-ray Optics High Precision Deposition



- One- and two-dimensional focusing and parallel beam multilayer X-ray optics for X-ray reflectometry, high resolution and single crystal diffraction
- Up-grade of all common X-ray systems
- Multilayer synchrotron optics from EUV to the hard X-ray region up to a substrate length of 1000 mm
- Tailored micro-focus X-ray source systems with adapted 1D or 2D optics
- Sub-nanometer precision large area deposition
- Thin film multi-element reference samples for XRF



AXO DRESDEN GmbH

APPLIED X-RAY OPTICS
MULTILAYER X-RAY OPTICS
HIGH PRECISION DEPOSITION

MORE THAN 20 YEARS EXPERIENCE IN X-RAY OPTICS AND HIGH PRECISION DEPOSITION

Gasanstaltstr. 8b
01237 Dresden · Germany
phone: +49 351 250897 20
fax: +49 351 250897 66
contact@axo-dresden.de
www.axo-dresden.de

BERICHT ÜBER DEN WORKSHOP „TIPPS UND TRICKS FÜR SHELX“

Vom 18. bis 20.09.2019 fand in Aachen der Workshop „Tipps und Tricks für SHELX“ statt, der vom AK 6 Molekülverbindungen der DGK gemeinsam mit dem AK ChemKrist der GDCh veranstaltet wurde. Am Institut für Anorganische Chemie der RWTH begrüßten Iris Oppel im Namen der GDCh und Ulli Englert für die DGK 41 Teilnehmende aus dem In- und Ausland und aus den verschiedensten wissenschaftlichen Karrierestadien – von Studierenden, Promovierenden bis hin zu langjährigen SHELX-Anwender*innen.

Bei Kaffee und Kuchen wurde zuallererst die Software auf den neuesten Stand gebracht, um anschließend unmittelbar in die Materie einzutauchen. Michael Bolte aus Frankfurt gab einen Abriss über die Verwendung von *Constraints und Restraints*. Daniel Kratzert (Freiburg) erklärte, wie man mit dem DSR-Programm knifflige und extensive Fehlordnungen sehr elegant und effizient modellieren kann. Zu guter Letzt zeigte Regine Herbst-Irmer (Göttingen), wie man am besten am Zwillingsproblematiken herangehen sollte, ohne verzweifeln zu müssen.



Zu jeden der vorgestellten Themenblöcke gab es eine Vielzahl von Beispielen, die individuell gelöst werden konnten. Dabei standen die Fachleute stets engagiert mit Rat und Tat zur Seite. Außerdem gab es genügend Zeit, um selbst mitgebrachte Problemstrukturen gemeinsam mit den Expert*innen zu diskutieren. Zudem konnten sich die Teilnehmenden über neueste Diffraktometertechnik der Firma STOE (Jens Meyer), aktuelle Softwareimplementierungen zu asphärischen Verfeinerungsmodellen bei Bruker AXS (Holger Ott), sowie zu derzeitigen und zukünftigen Entwicklungen bei Merck (Carolina v. Eßen) zur effizienten Anwendung der *Crystal-Sponge*-Methode informieren.

Der ausrichtende AK 6 Molekülverbindungen dankt der DGK, der GDCh sowie der Stadtparkasse Aachen für die finanzielle Unterstützung des Workshops. Ebenso gilt unser Dank den Firmen STOE, Bruker AXS und Merck, die zusätzlich für das leibliche Wohl in entspannter Atmosphäre sorgten.

Ulli Englert und Alexander Pöthig, Aachen

SYMMETRIESEMINAR 2019 IN DRESDEN

Vom 30. September bis 2. Oktober 2019 fand am Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe (MPI-CPfS) in Dresden ein dreitägiges Intensiv-Seminar zu „Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie“ statt. Der Einladung des AK 2 (PD Dr. Ulrich Schwarz, Forschungsbereich Chemische Metallkunde am MPI CPfS) und AK 19 (Prof. Thomas Doert, Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie der TU Dresden) folgten mehr als fünfzig ausgewählte Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler aus dem deutschsprachigen Raum. In zwanzig Vorlesungen wurden Grundlagen, Anwendungen und Beispiele vorgestellt, wie mit Hilfe gruppentheoretischer Werkzeuge kristallographische Herausforderungen gelöst und die Beschreibung von Kristallstrukturen systematisiert werden kann. Zur Einübung und Vertiefung des erlernten Stoffs wurden ausgewählte Übungsaufgaben in mehrstündiger gemeinschaftlicher Arbeit unter Anleitung der Referenten bearbeitet. Als Referenten konnten renommierte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler gewonnen werden, die durch ihre didaktisch klug aufgebauten Beiträge und ihr großes Engagement bei den Übungen ausschlaggebend zum Erfolg der Veranstaltung beigetragen haben.

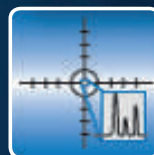
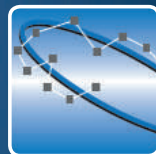
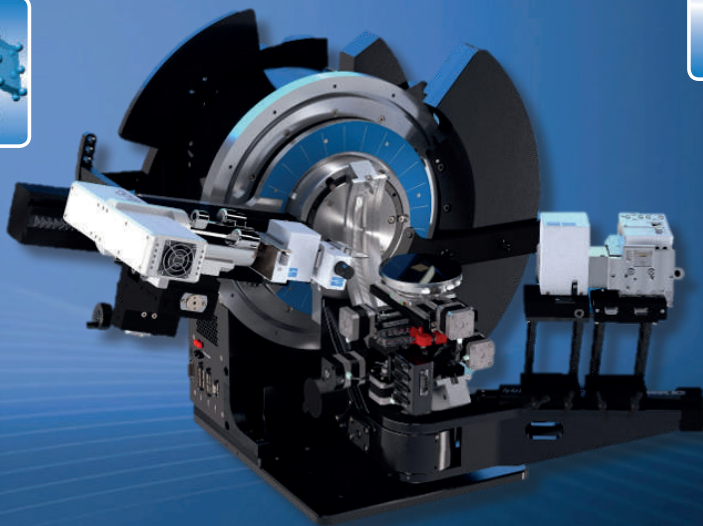
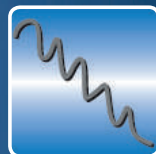
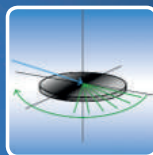
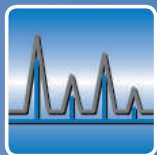
Nach einem Abriss über die Grundidee des Konzepts zur Systematisierung von Strukturverwandtschaften auf der Basis von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen durch dessen maßgeblichen Entwickler, Hartmut Bärnighausen, KIT Karlsruhe, wurden am ersten Tag mit Vorträgen zur Gruppentheorie (Ulrich Schwarz), zu kristallographischen Grundbegriffen und den Symmetrieinformationen in den *International Tables for Crystallography* (Thomas Doert) sowie zu Matrixoperationen (Michael Ruck, Dresden) die Grundlagen geschaffen. Am zweiten Tag wurden detailliert Untergruppen von Raumgruppen und Symmetrieverwandtschaften vorgestellt (Caroline Röhr, Freiburg) und anhand von Beispielen intermetallischer Verbindungen (Rainer Pöttgen, Münster) vertieft, bevor die Anwendung auf Überstrukturen im $(3+n)$ -dimensionalen Raum behandelt wurde (Rolf D. Hoffmann, Münster). Der dritte Tag brachte mit Zwillingen (Oliver Oeckler, Leipzig) und strukturellen Phasentransformationen (Holger Kohlmann, Leipzig) weitere praxisnahe Aspekte und Anwendungen. Abschließend wurde die große Breite kristallographischer Werkzeuge des „Bilbao Crystallographic Server“ (Gemma de la Flor Martin, Karlsruhe) kompetent vorgestellt.



Der hohen Informationsdichte und den anspruchsvollen Übungsaufgaben begegneten die Teilnehmer mit durchweg hoher Motivation und Konzentration, die sich während der drei Tage auch in vielen lebhaften Diskussionen innerhalb und außerhalb des Seminarraums widerspiegelten. Am Ende der durch den Feiertag verkürzten Arbeitswoche waren Teilnehmer, Referenten und auch Organisatoren gleichermaßen beeindruckt vom Erfolg des Seminars. Alle Beteiligten verließen den Veranstaltungsort bereichert durch vielfältige neue Erkenntnisse, Eindrücke und persönliche Kontakte.

Die großzügige finanzielle Unterstützung durch die Gesellschaft Deutscher Chemiker, die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, die Wilhelm-Klemm-Stiftung (Münster) sowie die Firmen Netzsch Gerätebau (Selb), STOE & Cie (Darmstadt) und Bruker AXS (Karlsruhe) ermöglichte eine für die Teilnehmer kostenfreie Durchführung und soll dankbar herausgestellt werden. Ein besonderer Dank gilt auch Prof. Ulrich Müller, der wesentlich zur Erstellung des Konzepts beitrug, am Seminar selber aber krankheitsbedingt leider nicht teilnehmen konnte. Abschließend bedanken wir uns auch herzlich bei Prof. Juri Grin und den Mitarbeitern seines Forschungsbereichs am MPI CPfS für die Bereitstellung der Infrastruktur und die stets freundliche sowie kompetente und unkomplizierte Unterstützung im Vorfeld und während der Veranstaltung!

Ulrich Schwarz und Thomas Doert, Dresden



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

The D8 DISCOVER Plus
Choose Excellence.

www.bruker.com/xrd

BERICHT DES AK20 „MATERIALWISSENSCHAFTLICHE KRISTALLOGRAPHIE“

An der vom Arbeitskreis AK20 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“ im Zeitraum 22.–24. August 2019 organisierten internationalen Sommerschule am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr zum Thema „Synthesis and characterization of inorganic functional materials“ haben rund 40 Studentinnen und Studenten teilgenommen. Das wissenschaftliche Programm wurde von 13 Sprecherinnen und Sprechern gestaltet und umfasste verschiedene Aspekte der Synthese anorganischer Materialien sowie deren Charakterisierung. Das Vortragsprogramm bot einen breiten Überblick von der Züchtung großer Einkristalle, über die Synthese von Nanomaterialien bis zur anwendungsorientierten Herstellung von mikro- und mesoporösen Materialien. Die vorgestellten Methoden zur Charakterisierung umfassten zum einen Streumethoden wie beispielsweise Einkristall- und Pulverdiffraktometrie oder Kleinwinkelstreuung, zum anderen wurden verschiedene spektroskopische Methoden wie etwa die Infrarot-Spektroskopie, Mößbauer-Spektroskopie oder auch Festkörperkernresonanzspektroskopie vorgestellt.



Die Doktorandinnen und Doktoranden hatten am ersten Abend die Möglichkeit ihre eigenen Arbeiten anhand von Postern zu diskutieren und sich mit den anderen Teilnehmern auszutauschen. Am zweiten Abend fand ein Barbecue statt.

Aufgrund der positiven Resonanz wird die Veranstaltung Anfang Oktober 2020 in Mülheim an der Ruhr wiederholt. Die Ankündigung sowie der genaue Termin werden in Kürze über die entsprechenden Portale verteilt.

Claudia Weidenthaler, Mülheim an der Ruhr



seit 1997

RÖNTGENLABOR Dr. M. Ermrich

Röntgendiffraktometrie - Röntgenfluoreszenzanalyse

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

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

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

Fax: (+49) 6162 - 939 824

Tel.: (+49) 6162 - 837 56

Auftragsanalytik / Forschung / Projektarbeit

Reflexion / Transmission / Hochtemperatur / dünne Schichten ...

Bereitstellung von Analyseverfahren für das Industrielabor

Quantitative Phasenanalyse / Nachweisgrenzen / Polymorphie ...

Beratungen zur Geräteauswahl bei Kaufvorhaben

Seminar „Röntgendiffraktometrie für die Praxis“ / 2x im Jahr (TAW)
sowie problembezogene Seminare in Ihrem Haus !

Ansprechpartner und Vertrieb des Rietveld- Programms

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



Sietronics
X-ray
Analytical
Specialists

Das Werkzeug zur quantitativen Phasenanalyse im Labor.

Bestimmung des amorphen Anteils u.a.

Alle Datenformate.

Si- Phase

Einbindung von CIF- Files oder eigenen Strukturdaten

Initiierung und Teilnahme an Round Robin bzw. Laborvergleichen

Handbuch: M. Ermrich / D. Opper

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

„Einführung in die Röntgenbeugungsanalyse“

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

Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ ist nun seit sieben Jahren ein fester Bestandteil der DGK und wächst stetig weiter. Auch im letzten Jahr konnten wir uns über steigende Mitgliederzahlen freuen und verzeichnen nun 215 Mitglieder aus 15 verschiedenen europäischen und nicht-europäischen Ländern. Die Mitglieder des Arbeitskreises stammen zu großen Teilen aus den Gebieten der Materialwissenschaften und Chemie, gefolgt von der Mineralogie, der Biologie und der Physik, aber auch noch immer zu einem kleinen Teil aus der klassischen Kristallographie und der Kristallzüchtung. Auch unter den jungen Kollegen lässt sich erkennen, dass die Vielfalt der Forschungsgebiete und Forschungsthemen schier endlos ist und alle Teile des globalen Lebens berührt – verbunden durch die Begeisterung an der Kristallographie.

Das wachsende Interesse an unserem Arbeitskreis verdanken wir der starken Präsenz auf den DGK-Jahrestagungen und den immer beliebter werdenden Lightning-Talk-Sessions, durch jährliche Herbsttreffen und Lab-Meetings sowie die Unterstützung durch Gruppenleiter und unsere Industriepartner. Auch möchten wir dem DGK-Vorstand danken, der uns seit Anfang an mit Rat und Tat zur Seite steht und auch mit finanzieller Förderung die Arbeit überhaupt ermöglicht.

Wir präsentieren uns nach wie vor auf der DGK-Homepage (<http://dgk-home.de/aks/jkyc>) als auch mit einem detaillierten und regelmäßig aktualisierten Blog. Des Weiteren sind wir in verschiedenen Karrierenetzwerken (LinkedIn und XING), aber auch in den sozialen Medien (Facebook und Twitter) aktiv und stehen im Austausch mit europäischen Gruppierungen sowie unserem Pendant der Deutschen Gesellschaft für Kristallwachstum und Kristallzüchtung.

Die jährlich stattfindenden Herbsttreffen an deutschen Hochschulen sowie die *Lab Meetings @ STOE*, ebenso wie das regelmäßige *Get Together* während der DGK-Frühjahrstagung helfen uns ein wachsendes Netzwerk aufzubauen und zu halten. Wir hoffen, dass wir diese schöne Tradition nun fest etablieren konnten, um sie auch in den kommenden Jahren fortsetzen, aber auch um neuen Ideen nachgehen zu können.

Vom 19. bis 20. September 2019 fand das *1st Joint Meeting of the Young Crystallographers (DGK) and the Young Crystal Growers (DGKK)* in Köln statt (<https://dgk-home.de/aks/jkyc/koeln-2019>). Das Ziel dieses Meetings war es den Austausch zwischen den zwei Jung-Gruppierungen zu stärken und den fachlichen Weitblick der jeweils eigenen Gruppe zu erweitern – etwas „über den eigenen Tellerrand hinaussehen“ wie man so schön sagt.

Neben den 19 *Lightning Talks* und den zwei *Poster-Sessions* der TeilnehmerInnen gab es drei sehr interessante *Academic Talks*, gehalten von Claudia Weidenthaler (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mühlheim), Hartmut Niemann (Fakultät Chemie, Universität Bielefeld) und Andreas Danilewsky (Kristallographie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg). Des Weiteren wurde den Teilnehmern ein Einblick in den Arbeitsablauf der Firmen STOE, Horiba

und Siltronic gegeben. Abgerundet wurde das Programm mit einer Untergrund-Stadtführung und dem Besuch in einem echten Kölsch-Brauhaus.



An dieser Stelle möchten wir uns auch nochmal bei dem Team um Linda Kerkhoff und Michael Haiduk sowie den Kolleginnen der DGKK Melissa Roder und Patrizia Fritsch für die Planung und die Durchführung diese Meetings bedanken. Ein weiterer Dank geht an die Firma STOE, die uns seit Anfang an unterstützt und auch dieses Mal wieder die Posterpreise gesponsort hat. Herzlichen Glückwunsch an die Gewinner Nadine Pfändler (ALU Freiburg), Sebastian Selter (IFW Dresden) und Melanie Nentwich (TU Freiberg). Weitere Unterstützung bekamen wir vom Fonds der Chemischen Industrie, der DGK sowie den Firmen STOE und DECTRIS. Dadurch konnten die TeilnehmerInnen ihre aktuellen Forschungsergebnisse und Fragen miteinander diskutieren. Mehr Informationen finden Sie unter oben genanntem Link oder in unserem Blog.

Bei der DGK-Frühjahrstagung im Februar 2020 in Wrocław (Polen) zusammen mit den polnischen Kollegen haben die Jungen Kristallographen wie üblich in den letzten Jahren mit zwei Teilveranstaltungen aktiv beigetragen (<https://dgk-home.de/aks/jkyc/breslau-2020>). In diesem Jahr konnten insgesamt 19 TeilnehmerInnen aus Deutschland und Polen in Kurzvorträgen à fünf Minuten ihre aktuelle Forschung vorstellen. Die *Lightning-Talk-Sessions* wurden ergänzt durch die zugehörigen *Poster-Sessions*, in denen die Ergebnisse intensiv mit anderen TagungsteilnehmerInnen diskutiert werden konnten. Wie auch in den letzten Jahren wurden wieder die drei besten Posterbeiträge prämiert, gesponsort durch die Firma STOE & Cie GmbH. Herzlichen Glückwunsch an die Gewinner Bipasha Debnath (IFW Dresden), Zhenyu Wang (Helmholtz-Zentrum Berlin) und Elżbieta Wątor (Jagiellonian University Cracow).



Neben dem Mikrosymposium fand während der Frühjahrstagung unser *Get Together* statt, bei dem die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises kurz zusammengefasst und kommende Events beworben wurden. Hierbei wurden einige neue Teammitglieder gewählt: Nach zwei engagierten Jahren in der Führungsebene wurden die ehemaligen Sprecher Linda Kerkhoff und Michael Haiduk (beide Uni Köln) vom neuen Sprecher Jan Philipp Wöhrle (ALU Freiburg) abgelöst. An seine Stelle wurde Tina Weigel (TU Freiberg) als die neue stellvertretende Sprecherin der Jungen Kristallographen gewählt. Des Weiteren löste Melanie Nentwich (TU Freiburg) als neue Blog-Verantwortliche Manuel Rothenberger (ebenfalls TU Freiburg) ab. An dieser Stelle möchten wir allen ehemaligen Teammitgliedern für ihren hervorragenden Einsatz für die Jungen Kristallographen der DGK danken und wünschen euch viel Erfolg für eure Zukunft. Außerdem möchten wir uns auch hier für die finanzielle Unterstützung des *Get Together* bei unseren Industriepartnern STOE, Dectris und Bruker recht herzlich bedanken!

Für die nächsten Jahre sind selbstverständlich weitere Aktivitäten geplant, auch wenn es in Zeiten von COVID-19 etwas schwierig ist diese zu planen. Nach dem sehr erfolgreichen Meeting in Köln planen wir dieses Jahr vom 4. bis 6. Oktober das *2nd Joint Meeting of the Young Crystallographers (DGK) and the Young Crystal Growers (DGKK)*. Austragungsort wird dieses Mal Freiberg sein. Wir versprechen uns eine Festigung der gewonnenen Freundschaft und hoffen auf viele TeilnehmerInnen beider Gruppen. Des Weiteren ist für 2021 wieder ein *Lab-Meeting* gemeinsam mit STOE geplant.

Weiterhin freuen wir uns auf den nächsten IUCr-Kongress in Prag, der auf 2021 verschoben wurde, auf die DGK-Jahrestagung 2021 in Hamburg sowie hoffentlich viele weitere Tagungen und Workshops, auf dem wir, die Jungen Kristallographen, hoffentlich wieder erfolgreich zum Tagungsprogramm beitragen können.

Jan Philipp Wöhrle, Freiburg und Tina Weigel, Freiberg

PERSONALIA

JUBILARE 2020

Name	Ort	Alter
Horst Saalfeld	Hamburg	100
Karl Fischer	Saarbrücken	95
Heinrich Arnold	Aachen	90
Dietrich Babel	Marburg	90
Ulrich Benedict	Karlsruhe	90
Ulrich Klement	Regensburg	90
Joachim Bohm	Berlin-Adlershof	85
Walter Engel	Pfingsttal	85
Heino Freese	Hamburg	85
Elisabeth Kirchner	Salzburg	85
Wilfrid Edgar Klee	Baden-Baden	85
Ali Kutoglu	Marburg	85
Heinz Hermann Schulz	München	85
Ursula Steinike	Berlin	85
Wolfgang Wilde	Berlin	85
Hans Berger	Berlin	80
Udo Bogner	Regensburg	80
Martin Dräger	Mainz	80
Otto Ermer	Köln	80
Heinrich Fink	Kassel	80
Wolfhart Göcke	Rostock	80
Herbert E. Goebel	München	80
Hans Hartl	Berlin	80
Siegfried Heinrich	Stuttgart	80
Hartmut Jex	Ulm	80
Walter Jung	Köln	80
Volker Krämer	Freiburg	80
Herbert Kroll	Münster	80
Emil Makovicky	Copenhagen	80
Fritz Parak	Garching	80
Peter Paufler	Dresden	80
Dieter Pohl	Hamburg	80
Kriemhild Reinecke	Berlin	80

Roland Boese	Essen	75
Detlef Fanter	Teltow	75
Hans Anton Graf	Berlin	75
Rüdiger Kniep	Dresden	75
Jürgen Kräußlich	Jena	75
Gerhard Materlik	London	75
Burkhard Ziemer	Berlin	75
Helmuth Zimmermann	Erlangen	75
Johannes G. Bednorz	Rüschlikon	70
Walter Großhans	Offenburg	70
Bernd Harbrecht	Marburg	70
Winfried Hinrichs	Greifswald	70
Helmut Klein	Göttingen	70
Eric Jan Mittemeijer	Stuttgart	70
Nora Pätzke	Dresden	70
Gerhard Paul Raabe	Aachen	70
Werner Skrotzki	Dresden	70
Walter Steurer	Zürich	70
Bernhard Anselment	Ludwigshafen	65
Rolf Bachmann	Leverkusen	65
Matthias Bartels	Darmstadt	65
Martin Ermrich	Reinheim	65
Helmar Görls	Jena	65
Yuri Grin	Dresden	65
Uwe Hoppe	Rostock	65
Helmut Kohl	Münster	65
Ulrich Lambert	Burghausen	65
Werner Lottermoser	Salzburg	65
Christian Robl	Jena	65
Michael Wendschuh	Bremen	65
Thomas Wroblewski	Hamburg	65

VERSTORBENE MITGLIEDER

Dr. Hans-Wilhelm Helberg

Norwegian Veterinary Institute Oslo & Georg-August-Universität Göttingen

† **24.10.2019**

EHRUNGEN UND BERUFUNGEN

Die Deutsche Mineralogische Gesellschaft hat **Herrn Professor Ekkehart Tillmanns** für seine „großen Verdienste um die Förderung der Mineralogischen Wissenschaft“ mit der Abraham Gottlob Werner-Medaille in Gold ausgezeichnet.

Zum 1. Oktober 2020 wurde **Herr Dr. Roman Gumeniuk** im direkten Anschluss an seine Juniorprofessur mit *Tenure Track* auf die Professur für Kristallphysik am Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg berufen.

MAX VON LAUE-PREIS 2019 AN MIRIJAM ZOBEL

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



Frau Juniorprofessorin Dr. Mirijam Zobel hat bei mir von 2011 bis 2015 am Lehrstuhl für Kristallographie und Strukturphysik der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg auf dem Thema „Nanopartikel-Kristallisation und Lösungsmittel-Restrukturierung anhand von ZnO-Nanopartikeln in organischen Lösungsmitteln“ promoviert. Somit kenne ich sie seit vielen Jahren und es ist mir eine große Freude, diese Laudatio für sie zu sprechen. Im Folgenden darf ich sie, wie auch während der Promotion, mit Mirijam anreden.

Mirijam hatte sich schon während ihres Studiums an der Universität Erlangen-Nürnberg in vielfältiger Weise aus der Masse der Studierenden vorteilhaft abgesetzt. Erstmals fiel sie in Zusammenhang mit der „Ferienakademie Sarntal“ auf, eine Veranstaltung, bei der ausgewählte Studierende zu einem zweiwöchigen Seminar eingeladen werden, um über aktuelle wissenschaftliche und gesellschaftliche Probleme zu diskutieren. Bereits damals hat sich Mirijam als starke Persönlichkeit, durch ihr umfangreiches naturwissenschaftliches Wissen und durch ihr rasches analytisches Verständnis von komplexen Zusammenhängen hervorgetan. Dazu kamen ihr kollegiales Verhalten und ihr Organisationstalent. Später als Mitarbeiterin an der Universität Erlangen-Nürnberg wurde dieser Eindruck verstärkt und Mirijam involvierte sich in die Organisation der „Travelling Seminars“, eine deutsch-russische Initiative, bei der Dozenten mit deutschen und russischen Studierenden in einer

zweiwöchigen Veranstaltung zu Großforschungszentren und Universitäten jährlich wechselnd zwischen Russland und Europa fahren, um über Nanomaterialien und Großforschungszentren zu lernen. Wegen ihrer außerordentlichen wissenschaftlichen und organisatorischen Fähigkeiten war Mirijam die geeignete Person, ab 2018 diese Veranstaltung von Bayreuth aus federführend zu übernehmen.

Auch während ihrer Promotion hat Mirijam an der Universität sichtbare Spuren hinterlassen, indem sie Wesentliches in der universitären Selbstverwaltung verändert hat. Auf ihre Initiative hin wurde z. B. im Senat eine Doktorandenvertretung installiert, die sie im Gründungsjahr selbst wahrnahm.

Der wissenschaftliche Inhalt der Promotionsarbeit von Mirijam war ausgerichtet auf PDF-Messungen an oxydischen Nanoteilchen. Die zentrale Fragestellung war, strukturelle Unordnung in Nanoteilchen zu erkennen, ein klassisches Gebiet der PDF-Methode. Durch ihre feine Datenanalyse weit über jeden Standard hinaus merkte sie bald, dass ihre Messungen zur atomaren Ordnung in Nanoteilchen mit dem gegenwärtigen Verständnis nicht vollständig beschrieben werden können. Aus ihrem konstruktiv-kritischem Denken heraus erwuchs die Vorstellung, dass die Daten auch Information über eine Restrukturierung der oberflächennahen Flüssigkeitsschicht enthalten. Dies mag prinzipiell nicht ungewöhnlich erscheinen, aber dieser Effekt wurde bislang als viel zu gering erachtet, um nachgewiesen werden zu können. Durch kluges Experimentieren, eine kritische Datenanalyse und basierend auf einem breiten Wissen ist es Mirijam dennoch gelungen, eine Restrukturierung der flüssigen Grenzschicht an Nanoteilchen eindeutig nachzuweisen. Damit hat sie mit ihrer Promotionsarbeit die Tür zu einem neuen Wissenschaftsfeld aufgestoßen, das weit über die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Nanomaterialien hinaus von fundamentaler Bedeutung für eine umfassende Strukturbestimmung ist.

Die Promotionsarbeit von Mirijam, die im Dezember 2015 abgeschlossen wurde, wurde von der Fakultät mit „summa cum laude“ gewürdigt, eine Beurteilung, die im Department Physik nur etwa 10 % der Dissertationen zugeteilt wird. Darüber hinaus erhielt Mirijam von der Universität den hochdotierten Staedtler-Preis, von dem jährlich an der gesamten Universität nur 10 verliehen werden (2 pro Fakultät). Damit hat die Universität Mirijam als überragende Wissenschaftlerin herausgestellt. Wegen ihrer hervorragenden wissenschaftlichen Erfolge als junge Forscherin wurde Mirijam 2017 in das Junge Kolleg der Bayerischen Akademie der Wissenschaften aufgenommen und sie wird auch von der Robert-Bosch-Stiftung im Rahmen des „Fast Track“-Programms gefördert. Zusätzlich wurde Mirijam vor kurzem zum *Visiting Scientist* am *Lawrence Livermore Laboratory* ernannt, um gemeinsam die Röntgen-PDF und Modellierungsmethoden im Umfeld dieser Methode voranzubringen. An ihrer neuen Heimatuniversität Bayreuth hat sie im Laufe der vergangenen Jahre erfolgreich Teilprojekte im SFB 840 „Von partikulären Nanosystemen zur Mesotechnologie“ und im SPP 2080 „Katalysatoren und Reaktoren unter dynamischen Betriebsbedingungen für die Energiespeicherung und -wandlung“ eingeworben. Auch methodisch ist Mirijam innovativ unterwegs. So hat sie ein neues PDF-Labordiffraktometer konzipiert, das in Zusammenarbeit mit einem industriellen Partner gebaut wurde. Das Erstgerät dieser Art wurde in ihrem Labor in Bayreuth in Betrieb genommen und erlaubt mittlerweile routinemäßig Labor-PDF-Daten hoher Qualität und bis zu einem Q-Betrag von $25 \text{ \AA}^{-1}$ zu messen.

Kurz nach ihrer Promotion schloss sich Frau Prof. Zobel als Postdoc der Arbeitsgruppe von Prof. Bo Brummerstedt Iversen an der Universität Aarhus, Dänemark, an, um dort eine Arbeitsgruppe um das Themengebiet „Oberflächenrestrukturierung und PDF-Analyse“ aufzubauen. Allerdings erhielt sie nach kurzer Zeit nach einem begeisternden Vortrag auf einem DFG-Schwerpunkttreffen eine Einladung, sich auf eine Juniorprofessur für

„Mesostrukturierte Materialien“ an der Universität Bayreuth zu bewerben. Diese Stelle konnte sie nach nur einem Jahr nach ihrer Promotion antreten.

Die Ergebnisse ihrer Promotionsarbeit und nachfolgende Erkenntnisse konnte Mirijam hochkarätig veröffentlichen und in mehreren eingeladenen Vorträgen darstellen, ein Beweis dafür, dass sie trotz ihrer kurzen Karriere bereits in der internationalen Wissenschaftsgemeinschaft angekommen ist.

Mirijam ist eine herausragende Wissenschaftlerin mit einem ganz breiten Wissen (Diplom in den Ingenieurwissenschaften, Promotion in Physik, Juniorprofessur in Chemie), mit einer exzellenten Publikationsliste (darunter ein Artikel in Science, *highly cited Paper* im *Web of Science*), bereits hoch geachtet von der wissenschaftlichen Gemeinschaft (in 2016 vier eingeladene Vorträge und eine *Keynote Lecture*, in 2017 drei Kolloquiums- und ein eingeladener Konferenzvortrag, in 2018 sechs Kolloquiums- und drei eingeladene Konferenzvorträge), erfolgreich und zielstrebig in ihrer akademischen Karriere. Ihr Arbeitsgebiet ist ganz allgemein die Restrukturierung von Grenzflächen, die sie für Fest-flüssig-Systeme erstmals an Nanomaterialen erkannt hat, die aber von allgemeiner Bedeutung ist für viele grundlegende und anwendungsrelevante Fragestellungen vom zyklischen Laden von modernen Batteriematerialien über das Verständnis von katalytischen Prozessen bis hin zum Ionenaustausch in Biosystemen. Darüber hinaus erschließt sie derzeit weitere Gebiete von aktueller Relevanz für die PDF-Methode, wie etwa die heterogene Katalyse, und sie widmet sich instrumentellen Erweiterungen wie innovativen Probenumgebungen mit kleinem Untergrund wie z. B. Free-film-SANS.

Mirijam ist sicherlich eine Ausnahmewissenschaftlerin, die neue und wesentliche Aspekte der Strukturbestimmung an Grenzflächen mit der PDF-Methode zugänglich gemacht hat und die diese Forschungsrichtung derzeit in Deutschland und darüber hinaus zielstrebig vorantreibt. Ich freue mich außerordentlich, dass sie mit dem Max von Laue-Preis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie 2019 geehrt wird.

Reinhard Neder, Erlangen

MAX VON LAUE-PREIS 2020 AN TOBIAS BECK

IN ANERKENNUNG SEINER ARBEITEN ZUR ENTWICKLUNG UND
CHARAKTERISIERUNG NEUARTIGER, HOCHGEORDNETER UND INSBESONDERE
KRISTALLINER BIOHYBRID-MATERIALIEN, DIE AUS KOMBINATIONEN VON
PROTEINCONTAINER-BAUSTEINEN UND ANORGANISCHEN NANOPARTIKELN
ZUSAMMENGESETZT SIND



Es gibt wohl nur wenige Doktoranden anderer kristallographischer Arbeitsgruppen, die mir schon seit ihrer Promotionszeit bekannt und für ihre Arbeiten bis heute in Erinnerung sind. Tobias Beck gehört dazu und ein Grund dafür liegt in dem „magischen Dreieck“. Herr Beck hat in seiner Dissertation kleine, mehrfach halogenierte Aromaten für die Phasierung von Proteinstrukturen vor allem mittels anomaler Dispersion entwickelt. Diese Arbeiten mit hoher methodischer kristallographischer Relevanz haben breites Interesse und Würdigung in der Community hervorgerufen. Herr Beck hat seine Arbeiten auf dem DGK-Meeting 2009 in Hannover in einem Posterbeitrag vorgestellt. Die Firma Jena Bioscience hat auch gleich den kommerziellen Nutzen dieser Entwicklung erkannt und man kann die Verbindung bis heute dort erwerben. Es finden sich auch eine ganze Reihe von Proteinstrukturen in der Proteindatenbank (PDB), die im Komplex mit der Verbindung bestimmt wurden. Allein im letzten Jahr waren es fünf Strukturen. Die „Dunkelziffer“ ist hier sicher beträchtlich, denn die meisten nur zur Phasierung verwendeten Strukturen werden nicht in der PDB hinterlegt.

Aber gehen wir chronologisch vor. Herr Beck stammt aus Hannover und er hat Chemie in Aachen und Göttingen studiert. Seine Diplomarbeit hat er an der Monash-Universität in Australien unter Betreuung von Peter Junk und George Sheldrick angefertigt und sich dort mit der Synthese und Charakterisierung von Lanthanoid-Hydroxy-Clusterverbindungen als Röntgenkontrastmittel beschäftigt. Auch die bereits angeführte Dissertation zu den halogenierten Substanzen zur Phasierung wurde unter Betreuung von George Sheldrick

angefertigt. Nach der Promotion war Herr Beck drei Jahre als Postdoc in der Arbeitsgruppe von Donald Hilvert an der ETH Zürich tätig und von 2014 bis Herbst 2019 als unabhängiger Nachwuchsgruppenleiter an der RWTH Aachen (Mentor Prof. Ulrich Simon). Seitdem hat er eine Tenure-Track-Juniorprofessur an der Universität Hamburg inne. In seinen weiteren Arbeiten als Postdoc und Nachwuchswissenschaftler hat Herr Beck sich mit vielfältigen Themen beschäftigt, die für Chemiker, Strukturbologen und Kristallographen gleichermaßen interessant sind, was ihn neben seinen exzellenten Forschungsergebnissen und seiner herausragenden Expertise als würdigen und außerordentlich passenden Kandidaten für den Max-von-Laue-Preis qualifiziert.

In seiner aktuellen Forschung beschäftigt sich Herr Beck mit der Konstruktion und Charakterisierung von kristallinen Biohybrid-Materialien, die aus Biomolekülen und anorganischen Nanopartikeln bestehen. Nanopartikel eignen sich aufgrund ihrer vielfältigen Eigenschaften als Bausteine für Materialien mit neuartigen optischen, magnetischen oder elektrischen Eigenschaften. Die einzelnen Partikel unterscheiden sich jedoch nach Herstellung mit traditionellen Verfahren in Größe und Form, so dass eine hochstrukturierte Anordnung dieser Bausteine in Materialien derzeit nur schwer möglich ist. Herr Beck hat eine neue Methode entwickelt, um anorganische Nanopartikel räumlich präzise im Material anzuordnen und neuartige Überstrukturen zu erzeugen. Dazu werden Proteincontainer als Bausteine aus der Natur verwendet, die eine genau definierte Größe und Form besitzen. In seinen Pionierarbeiten hat Herr Beck gezeigt, dass mit Hilfe dieser Proteincontainer anorganische Nanopartikel zu hochkristallinen, dreidimensionalen Mehrkomponentenmaterialien angeordnet werden können. Das Besondere sind hier die Proteincontainer: Herr Beck setzt zwei gegensätzlich geladene Proteincontainer-Varianten ein. In Analogie zu anorganischen Salzen werden aus diesen kationischen und anionischen Proteincontainer-Bausteinen binäre Übergitter aufgebaut.

Herr Beck verwendet für die Herstellung und Charakterisierung der neuen Hybrid-Materialien zahlreiche kristallographische Methoden. Seine Arbeiten haben neben der spannenden und aktuellen interdisziplinären thematischen Motivation dabei immer auch eine interessante kristallographische methodische Komponente. Die Assemblierung der Proteincontainer-Nanopartikel-Komposite erfolgt mit Hilfe der Proteinkristallisation. Hier hat Herr Beck erfolgreich die bestehenden Hochdurchsatz-Methoden zur Proteinkristallisation nun für die Synthese von Mehrkomponentenmaterialien adaptiert. So lassen sich optimale Bedingungen für hochkristalline Materialien mit lateralen Dimensionen von mehreren Hundert Mikrometern bestimmen, was mit vorherigen Verfahren nicht möglich war.

Die Strukturbestimmung der Proteinmatrix, die aus den Proteincontainern besteht, erfolgt mittels Einkristall-Röntgenstrukturanalyse. In den Arbeiten von Herrn Beck gelang es erstmalig, zwei verschieden geladene Varianten des gleichen Proteins in einer Struktur zusammen zu kristallisieren. Die Struktur der Proteinmatrix kann bis zu guter Auflösung ($d_{\min}$ kleiner als 1,8 Å) bestimmt werden. Die Anordnung der Nanopartikel im Übergitter wird von Herrn Beck mit Röntgenkleinwinkelstreuung (SAXS) bestimmt. Hier zeigt sich, dass die Proteincontainer die Nanopartikel zu kristallinen Übergittern anordnen, unabhängig von der Nanopartikelbeladung der Proteincontainer. Die genannten Methoden werden passend zu den neuartigen Materialien weiterentwickelt. In den Forschungsarbeiten von Herrn Beck werden außerdem noch weitere kristallographische Techniken eingesetzt, zum Beispiel bei der Charakterisierung der Nanopartikel. Hier findet neben Darstellung der Partikel mittels Transmissionselektronen-Mikroskopie auch Elektronenbeugung zur Phasenbestimmung der Nanopartikel Anwendung.

Zusammengefasst zeichnen sich die exzellenten Arbeiten von Herrn Beck durch die Verknüpfung von Methoden aus verschiedenen Teilbereichen der Kristallographie, Nanochemie und Biochemie aus. Mit seinem interdisziplinären Ansatz hat Herr Beck ein völlig neues Forschungsfeld etabliert. Für die neue Materialklasse eröffnen sich zukünftig vielfältige und vielversprechende Anwendungsmöglichkeiten, beispielsweise für die Optoelektronik und Sensorik. Die Biohybrid-Materialien bieten darüber hinaus reichhaltiges Potential für medizinische Anwendungen, bei denen die Funktionalität der Nanopartikel in der biologischen Matrix ausgenutzt werden kann. In seinen aktuellen Arbeiten gelingt Herrn Beck nun die Verheiratung von weicher und harter Materie: Mit Hilfe der exakt definierten Proteincontainer (weich) erreicht er eine kristalline Anordnung der anorganischen Materie (hart).

Die aktuellen wissenschaftlichen Arbeiten von Herrn Beck wurden bereits mit zahlreichen Preisen ausgezeichnet: 2017 erhielt er den Wissenschaftspreis 2017 des Industrie-Clubs Düsseldorf. 2018 wurde Herr Beck in das Junge Kolleg der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und der Künste aufgenommen. Aufgrund seiner exzellenten Forschungsarbeiten zur Entwicklung und Charakterisierung neuartiger, hochgeordneter und insbesondere kristalliner Biohybrid-Materialien, die aus Kombinationen von Proteincontainer-Bausteinen und anorganischen Nanopartikeln zusammengesetzt sind, wird der diesjährige Max von Laue-Preis an Herrn Tobias Beck verliehen.

Norbert Sträter, Leipzig

MAX VON LAUE-PREIS 2020 AN MATTHIAS ZSCHORNAK

IN ANERKENNUNG SEINER METHODISCHEN WEITERENTWICKLUNG DER
RESONANTEN RÖNTGENSTREUUNG ZUR SICHTBARMACHUNG VON
ORBITALEN UND SEINER ARBEITEN ZUR DEFEKTMIGRATION UND
-SEPARATION IN OXIDEN UNTER EINFLUSS EXTERNER FELDER



Sehr geehrter Herr Vorsitzender, sehr geehrte Damen und Herren!

In diesem Jahr verleiht die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie den Max von Laue-Preis an Herrn Dr. Matthias Zschornak vom Institut für Experimentelle Physik der Technischen Universität Bergakademie Freiberg für seine herausragenden wissenschaftlichen Leistungen in Forschung und Entwicklung auf dem Wissenschaftsgebiet „Moderne Methoden der Strukturaufklärung mittels Synchrotronstrahlung und Dichtefunktionaltheorie“. Es ist heute eine ehrenvolle Aufgabe für mich, stellvertretend für Herrn Dirk Carl Meyer, der Herrn Zschornak für den Preis vorgeschlagen hatte, die Laudatio zu halten. Herr Meyer kann leider aus gesundheitlichen Gründen nicht an der Tagung teilnehmen. Ich versuche nun diese Lücke zu schließen und Sie als Zuhörer müssen dafür büßen.

Lassen Sie mich zunächst den wissenschaftlichen Werdegang unseres diesjährigen Preisträgers nachzeichnen. Matthias Zschornak, Jahrgang 1981, wuchs in der Oberlausitz in Hoyerswerda auf. Es ist sorbisches Siedlungsgebiet, d. h. Sorbisch ist neben Deutsch Amtssprache im Freistaat Sachsen. Man spricht in dieser Gegend – wenn man die Sorbische Sprache beherrscht – Obersorbisch. Er hat in *Wojerecy* – so heißt Hoyerswerda auf Obersorbisch – 2001 am Lessing-Gymnasium sein Abitur mit der Note 1,0 bestanden. Bereits drei Jahre vorher, im Jahre 1998 war er als Austauschschüler für ein Jahr an der *Belmont High School* in Canterbury, New Hampshire, USA und kam mit einem Abschlusszeugnis „Mit

Auszeichnung“ zurück. Nach dem Abitur ging er für ein weiteres Jahr in die USA und arbeitete bei der *Franciscan Outreach Association* in Chicago, die sich um Obdachlose kümmert. Sein selbstloser Einsatz zeigt mir, dass es auch heute unter den jungen Leuten noch Altruisten gibt.

Zum Wintersemester 2002 begann Matthias Zschornak sein Physikstudium als Stipendiat des Cusanuswerks an der TU Dresden. Anfang des Jahres 2008 schloss er das Studium als Diplom-Physiker „mit Auszeichnung“ ab. Seine Diplomarbeit zum Thema „Röntgenbeugungsmethoden unter resonanten, anisotropen Streubedingungen zur Strukturaufklärung und Lösung des Phasenproblems“ fertigte er am Institut für Strukturphysik bei Prof. Peter Paufler (Lehrstuhl für Kristallographie) an, wobei Matthias Zschornak der Nachwuchsgruppe Nanostrukturphysik von Juniorprofessor Dirk C. Meyer angehörte.

Anschließend arbeitete er am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf in der Theoriegruppe von Frau Prof. Sybille Gemming, wo er das für seine späteren Arbeiten so wichtige Handwerkszeug der Dichtefunktionaltheorie erlernt hat. In dieser Zeit war er in die Bearbeitung von Projekten zur Bildung, Stabilität und Struktur von Defekten in ternären Oxiden und ferroischen Materialien mit eingebunden.

Im Juli 2010 wechselte Herr Zschornak an das Institut für Experimentelle Physik der Technischen Universität Bergakademie Freiberg, wo er 2015 bei Prof. Dirk C. Meyer mit der Arbeit „Defekt-induzierte lokale elektronische Strukturmodifikationen im System $\text{SrO-SrTiO}_3\text{-TiO}_2$: Symmetrie und Fehlordnung“ mit „summa cum laude“ promovierte. Seitdem leitet er die Nachwuchsforschergruppe „Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung“ am Institut für Experimentelle Physik und koordiniert die umfangreichen Synchrotronaktivitäten des Instituts. Mehr als 40 Artikel in internationalen Fachzeitschriften als Autor bzw. Koautor, neun Buchbeiträge und sieben nationale und internationale Patente belegen die erfolgreiche wissenschaftliche Arbeit von Matthias Zschornak. Mit der Verleihung des Max-von-Laue-Preises finden vor allem die Ergebnisse seiner methodischen Arbeiten zur Weiterentwicklung der resonanten Röntgenstreuung und die umfangreichen Untersuchungen zur Defektmigration und Separation in den zahlreichen oxidischen Strukturen des Systems $\text{SrO-SrTiO}_3\text{-TiO}_2$, welche er in seiner Doktorarbeit untersucht hat, eine gebührende Anerkennung.

Mit Herrn Matthias Zschornak haben wir erstmalig einen Max-von-Laue-Preisträger, dessen wissenschaftliche Leistungen bereits international gewürdigt wurden. Die *European Crystallographic Association* (ECA) verlieh ihm auf der ECM 31 in Oviedo, Spanien 2018 den 9. Erwin-Felix-Lewy-Bertaut-Preis für seine „herausragenden Beiträge zur Entwicklung der resonanten Röntgenbeugung, zu Strukturstudien von Perowskiten und zu umfangreichen elektronischen Berechnungen, die ein umfassendes physikalisches Verständnis der Eigenschaften wichtiger Materialien ermöglichen“. Lieber Herr Zschornak, Sie haben uns damals nach der Preisverleihung in Oviedo in ihrem Vortrag einen umfassenden Überblick über ihre Forschungsergebnisse geboten. Wir sind gespannt auf ihren Preisvortrag auf der DGK-Tagung im nächsten Jahr.

Herzlichen Glückwunsch zum Laue-Preis und weiterhin viel Freude und Erfolg bei der Bearbeitung ihrer neuen Forschungsprojekte.

Wolfgang Neumann, Berlin

WILL KLEBER - GEDENKMÜNZE 2020 AN ROBERT DINNEBIE

IN ANERKENNUNG SEINER AUßERGEWÖHNLICHEN LEISTUNGEN
AUF DEM FELD DER PULVERDIFFRAKTOMETRIE, IN DER FORSCHUNG
SOWIE DER WEITERBILDUNG JUNGER WISSENSCHAFTLER UND
IM DIENSTE DER FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT

Meine sehr geehrten Damen und Herren,

es ist mir eine außerordentliche Ehre und große Freude die Laudatio zur Verleihung der Will Kleber-Gedenkmünze an Robert Dinnebie, meinem Doktorvater, Kollaborateur und Freund zu halten.

Er ist ein begnadeter Wissenschaftler, dessen Leben durch die Neugier und den unermüdlich erscheinenden Einsatz für die methodische Weiterentwicklung sowie die Vermittlung der Pulverdiffraktometrie und ihre Anwendung auf spannende und herausfordernde Fragestellungen geprägt ist. Seine Arbeiten finden große Resonanz weit außerhalb des Feldes der Kristallographie. Diese zeigen seine vielen Veröffentlichungen in fachübergreifenden Journalen wie *Science*, *Nature* oder *Scientific Reports*, aber auch in traditionsreichen Journalen der Chemie und Physik wie *Angewandte Chemie*, *JACS* oder *Physical Review Letters*.

Die frühe Jugend prägte Robert Dinnebie. Wir können uns glücklich schätzen, dass er mit sechs Jahren, es muss also um die 1970 gewesen sein, im elterlichen Keller in Mannheim auf eine Kiste stieß, in denen Mineralstufen funkelten. Dieser Moment war die Katharsis welche die Zukunft des Robert Dinnebiers fest in den Dienst der Kristallographie stellte. Danach scheint sein Lebensweg vorbestimmt. Gefördert durch die Studienstiftung des Deutschen Volkes absolviert er als Jahrgangsbester das Abitur. Wie bei Will Kleber vor ihm folgte das Studium der Mineralogie in Heidelberg, das er mit Bestnoten absolvierte, um dort bei Professor Eysel zu promovieren. Selbstverständlich summa.

Darauf folgte eine einschneidende Veränderung: ein Postdoc an der *National Synchrotron Light Source* in Brookhaven bei New York City. Dort tauchte er in die internationale wissenschaftliche Exzellenz ein. An einem der ersten Synchrotronquellen für Materialforschung setzte er mit der Gruppe von Professor Peter Stephens Maßstäbe in Synchrotronpulverdiffraktometrie. Sie entwickelten Pseudo-Atom-Strukturlösungsansätze, um molekulare Strukturen mit unfassbar schwacher Hardware zu lösen. Dort machte er einen begabten, aufstrebenden jungen Forscher auf sich aufmerksam. Als Sander van Smaalen zu einer Messzeit in Brookhaven erschien, forderte er nicht nur Robert Dinnebie durch seine experimentelle Akribie, sondern begeisterte ihn gleichzeitig mit seinem Scharfsinn und seiner Persönlichkeit. Wenig später wechselte Robert Dinnebie nach Bayreuth und begann die Habilitation. Robert stürzte sich wieder in die methodische Arbeit und entwickelte nicht nur an der „Maximum Entropy Method“ für Pulverdiffraktion, sondern arbeitete auch an der Beschreibung von inkomensurabel modulierten Strukturen anhand von Pulverdaten.

Nach Ende der Habilitation im Jahr 2000 führte das verlockendste Angebot Robert Dinnebier ans Max-Planck-Institut für Festkörperforschung nach Stuttgart, wo er mit Martin Jansen ein wahres Feuerwerk an Strukturarbeiten, jetzt mit einem starken Fokus auf anorganische Materialien abfeuerte. Eine Arbeit, die mir besonders in Erinnerung geblieben ist, war die Veröffentlichung einer neuen Struktur von weißem Phosphor. Er gehört damit einem sehr kleinen Kreis von Forschern an, die eine neue Struktur eines Elementes in diesem Jahrhundert gelöst haben.

Im Jahr 2007 wurde er zum Honorar-Professor an der Universität Tübingen sowie zum außerplanmäßigen Professor an der Universität Stuttgart berufen.

Am beeindruckendsten sind für mich seine Arbeiten der letzten Dekade. Denn die ist die aus meiner Sicht spannendste und wissenschaftlich kreativste Phase in Robert Dinnebiers Wirken. Er beobachtete als erster *in situ* strukturelle Veränderungen mechanochemischer Prozesse, er klärt die strukturelle Wirkungsweise springender Kristalle auf, er beginnt mit der kunst-historisch bedeutenden Aufklärung von Korrosionsprozessen und arbeitet weiterhin mit herausragenden Physikern an der Aufklärung von Spin-Orbital-verschränkten Quantenflüssigkeiten.

Dieses wäre aber nur die halbe Geschichte, denn Robert Dinnebier ist neben seiner wissenschaftlichen Brillanz und seinem Fleiß auch ein passionierter Lehrer. Mit „Powder Diffraction: Theory and practice“ veröffentlichte Robert Dinnebier das Standardwerk der Pulverdiffraktion der 2000er. Vor Kurzem hat er ein an der Praxis orientiertes Lehrbuch (Dinnebier, Evans & Leineweber: „Rietveld Refinement“) nachgelegt, welches aus meiner Sicht eines der besten, lesbarsten und inspirierenden Bücher in der Pulverdiffraktion überhaupt ist. Auch vergeht kaum ein Jahr, in dem Robert Dinnebier nicht einen offenen Kurs in Stuttgart veranstaltet, in dem er an die hundert Studenten aus aller Welt für eine intensive und lehrreiche Woche über die Praxis der Pulverdiffraktion einlädt. Die Begeisterung, die er in diesen Vorlesungen versprüht, ist ansteckend.

Robert Dinnebier setzt sich für das übergeordnete Wohl der Kristallographie ein und ist in verschiedenen Gremien der IUCr und DGK aktiv. Auch ist er der designierte technische Direktor der ICDD, für die er schon länger im Aufsichtsrat sitzt.

Natürlich machen alle diese Dinge Robert Dinnebier zu einem herausragenden Forscher und einem Ehre gebührenden Kristallographen. Es ist mir eine besondere Freude Ihnen mitteilen zu dürfen, dass in diesem Jahr nicht nur ein exzellenter Wissenschaftler und Lehrer geehrt wird, sondern auch ein wunderbarer Mensch. Robert Dinnebier ist ein glücklicher Ehemann seit über 20 Jahren (Natasha heiratete er noch in den USA als Post Doc) sowie ein hingebungsvoller Vater von zwei Söhnen von 20 und 16 Jahren. Die eindrucksvolle Inklusion seiner Familie in seine Arbeitswelt ist schon an vielen Tagungen offensichtlich geworden. Robert genießt die Gesellschaft und nutzt jede Gelegenheit sich mit Freunden und Kollegen auszutauschen. Sein geradezu enzyklopädisches Wissen über die Pfälzer Weinregion kombiniert mit einem hingebungsvoll gepflegten Weinkeller machen diese Ereignisse zu einem Hochgenuss.

Um seine akademische Familie kümmert er sich mit ähnlicher Hingabe. Seine Absolventen sind bunt verteilt an Strahlungsquellen, Forschungsinstituten und Universitäten, sogar in der Industrie sitzt der eine oder andere. Fast alle sind der Forschung und der Pulverdiffraktion treu geblieben und stellen ein potentes Netzwerk von begeisterten Überzeugungstätern dar.

Robert Dinnebier steht für die Kristallographie, wie ich sie mir als Ideal vorstelle: weltoffen, vorwärtsgewandt und als ein respektvoll interessierter Teamplayer. So verkörpert sie das mächtigste Werkzeug im Arsenal der Wissenschaft für das Verständnis von Festkörper.

Lieber Robert, vielen Dank und Gratulation!

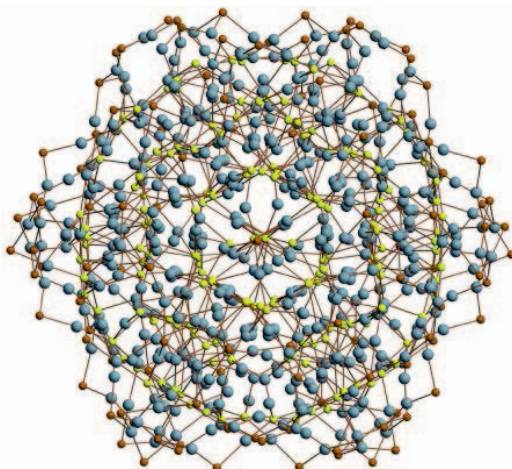
Bernd Hinrichsen, Ludwigshafen

CARL HERMANN-MEDAILLE 2020 AN DIETER FENSKE

IN ANERKENNUNG SEINES WISSENSCHAFTLICHEN LEBENSWERKES,
NAMENTLICH FÜR SEINE ANORGANISCH-CHEMISCHEN UND
KRISTALLOGRAPHISCHEN FORSCHUNGSARBEITEN, INSBESONDERE
HINSICHTLICH DER AUFKLÄRUNG HOCHKOMPLEXER KRISTALLSTRUKTUREN
UND DER WEITERENTWICKLUNG VON METHODEN DER
KRISTALLSTRUKTURANALYSE

Am 24.02.2020 wurde auf der gemeinsamen polnisch-deutschen kristallographischen Tagung in Wrocław, Polen, dem anorganischen Chemiker Prof. Dr. Dieter Fenske die Carl Hermann-Medaille verliehen. Sie ist die höchste Auszeichnung auf dem Gebiet der Kristallographie der DGK.

Dieter Fenske ist eine Forscherpersönlichkeit, die in vorbildlicher Art und Weise die Kompetenzen eines innovativen anorganischen Syntheschemikers mit denen eines engagierten Kristallographen verbindet. Es ist gerade diese Synergie, die seinen Erfolg begründet. Als Koordinationschemiker verbindet er Hauptgruppen-zentrierte Liganden mit polynuklearen Übergangsmetall-Clustern und erzeugt gigantische molekulare selbst-organisierte Käfige, die immer wieder an die Grenzen der Einkristall-Strukturanalyse stoßen (siehe Abbildung des $\text{Ag}_{490}\text{S}_{188}(\text{StC}_5\text{H}_{11})_{114}$). So ergab sich zwangsläufig die Notwendigkeit, die Techniken der Diffraktometrie kontinuierlich nach außen zu schieben. Dieter Fenske befeuert die Entwicklung von Diffraktometern, Detektoren, Röntgenquellen usw. für die Laboranwendung, aber auch die von Großforschungseinrichtungen. In dieser Hinsicht ist sein Einsatz für die gesamte chemische und kristallographische Community gar nicht hoch genug einzuschätzen. Wir allen profitieren noch immer von seinem unermüdlichen Einsatz, das Gute durch das Bessere zu ersetzen.



$\text{Ag}_{490}\text{S}_{188}(\text{StC}_5\text{H}_{11})_{114}$

Der Laureat studierte Chemie in Münster und promovierte dort 1973 bei Prof. Becher. Im Jahr 1978 schloss sich am gleichen Standort die Habilitation an und 1981 folgte Dieter Fenske seinem ersten Ruf auf eine C3-Professur an das Anorganisch Chemische Institut nach Karlsruhe. 1982 erhielt er einen Lehrauftrag an der Universität Strasbourg bei Jean Marie Lehn und 1986 einen Ruf auf eine C4-Professur an die Universität Frankfurt. Nach nur zwei Jahren in Frankfurt wurde er 1988 zurückberufen auf einen Lehrstuhl in Karlsruhe, den er bis zu seiner Emeritierung im Jahre 2008 innehatte. Dieter Fenske bekleidete in seiner Laufbahn viele Ämter, u. a. Direktor des Instituts für Nanotechnologie am Forschungszentrum Karlsruhe, Dekan der Fakultät für Chemie, Prorektor für Forschung der Universität Karlsruhe, DFG-Fachgutachter und Senator.

Nicht nur dies zeigt die Hochachtung und das Vertrauen, das ihm die Community entgegenbringt, sondern es wird auch von zahlreichen Auszeichnungen belegt, u. a. durch den Leibniz-Preis der DFG, den Wilhelm-Klemm-Preis der GDCh, die Mitgliedschaften in der Heidelberger Akademie der Wissenschaften und der Leopoldina und vieles mehr.

Mit der Carl Hermann-Medaille der DGK wird also ein überragender Wissenschaftler geehrt, der den Brückenschlag zwischen den Disziplinen nicht nur vollzog, sondern auch lebt: Kristallographie nicht nur als Instrument, sondern als ebenbürtige Wissenschaft. Wir gratulieren von Herzen.

Dietmar Stalke, Göttingen

WALTRUDE UND FRIEDRICH LIEBAU-
PREIS ZUR FÖRDERUNG DER
INTERDISZIPLINARITÄT DER
KRISTALLOGRAPHIE 2020
AN JULIAN VOSS-ANDREAE

IN ANERKENNUNG SEINER BEDEUTENDEN KÜNSTLERISCH-GESTALTENDEN
ARBEITEN, MIT DENEN ES IN BESONDERS BEEINDRUCKENDER WEISE
GELUNGEN IST, MIT ORIGINELLEN KÜNSTLERISCHEN MITTELN METHODEN
UND FORSCHUNGSERGEBNISSE DER KRISTALLOGRAPHIE ÜBER KREISE
KUNSTLIEBENDER FACHWISSENSCHAFTLER HINAUS EINEM BREITEN
PUBLIKUM ZU VERMITTELN

Lieber Herr Voss-Andrae, lieber Julian,

heute und hier in Breslau bekommst Du Im Rahmen der gemeinsamen Jahrestagung der polnischen und deutschen Gesellschaft für Kristallographie den *Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis* zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verliehen. Da der Preis die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen wissenschaftlichen und auch künstlerischen Bereichen sowie die Sichtbarmachung derselben zum Thema hat, ist es meine feste Überzeugung, dass Du mit Deinem Schaffen und Deinem Werk die Preiskriterien vollkommen erfüllst. Ich freue mich daher sehr, dass die deutsche Gesellschaft für Kristallographie Deine Nominierung für den Preis durch den Arbeitskreis 1 „Biologische Strukturen“ als preiswürdig erachtet hat und Dich als Preisträger 2020 ausgewählt hat.

Da Du heute leider nicht persönlich anwesend sein kannst und uns nur per Skype zugeschaltet bist, möchte ich kurz den Text der Verleihungsurkunde vorlesen: „Das für die Vergabe des *Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises* zuständige Komitee der DGK verleiht Ihnen den Preis für Ihre bedeutenden künstlerisch-gestaltenden Arbeiten, mit denen es durch Ihren physikalischen und nicht zuletzt kristallographischen Hintergrund in besonders beeindruckender Weise gelungen ist, mit originellen künstlerischen Mitteln Methoden und Forschungsergebnisse der Kristallographie über Kreise kunstliebender Fachwissenschaftler hinaus einem breiten Publikum zu vermitteln und so im Sinne der Stifter des Preises die transdisziplinäre Bedeutung der Kristallographie, ihrer Methoden und erzielten Forschungsergebnisse auch über die Grenzen der Naturwissenschaften hinaus für ein interessiertes Publikum sichtbar werden zu lassen.“ Der Preis der Stiftung zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie soll dazu beitragen, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen. Prämiert werden Arbeiten, in denen entweder Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie auf Probleme einer anderen Wissenschaft oder umgekehrt erfolgreich angewendet wurden. Naturwissenschaftliche Erkenntnisse haben durch Ihre Arbeiten eine Sublimation in den geisteswissenschaftlich-künstlerischen Bereich erfahren, was wiederum über das hierdurch angesprochene Publikum eine positive Rückwirkung für die gesellschaftliche Akzeptanz der Kristallographie erwarten lässt.

Kommen wir nun in aller Kürze zu Deiner Biographie: Du wurdest am 15.08.1970 in Hamburg geboren und Du hast Physik in Berlin, Edinburgh und Wien studiert. In Wien hast Du im Rahmen Deiner Diplomarbeit mit Anton Zeilinger gearbeitet und warst maßgeblich am C₆₀-Quantenexperiment beteiligt [1]. Danach hast Du die Wissenschaft verlassen und Dich der Kunst zugewandt und bist nach Portland (Oregon, USA) gezogen, wo Du 2004 einen *Bachelor of Fine Arts in Sculpture* vom *Pacific Northwest College of Art* erworben hast.

Noch als Physiker hatte Dir Deine Frau Adriana, die Biologin ist, die bunte und vielfältige Welt der Bio-Moleküle eröffnet. Nun, als junger Künstler auf der Suche nach Motiven hast Du Dich daran erinnert und bist auf das grün fluoreszierende Protein (GFP) gestoßen. GFP kommt in Quallen vor, und dient als Lichtemitter in der dunklen Tiefsee. Forscher haben schnell das Potential erkannt und heutzutage wird GFP (bzw. unzählige Varianten davon) in der Zellbiologie als Marker-Protein eingesetzt. Die Struktur von GFP ist sehr markant; sie besteht aus einem 11-strängigen β -Fass mit dem Fluorophor im Zentrum (siehe Abb. 1, links). Diese Struktur bildete die Vorlage für deine Skulptur *Steel Jellyfish* („Stahlqualle“) (siehe Abb. 1, rechts).

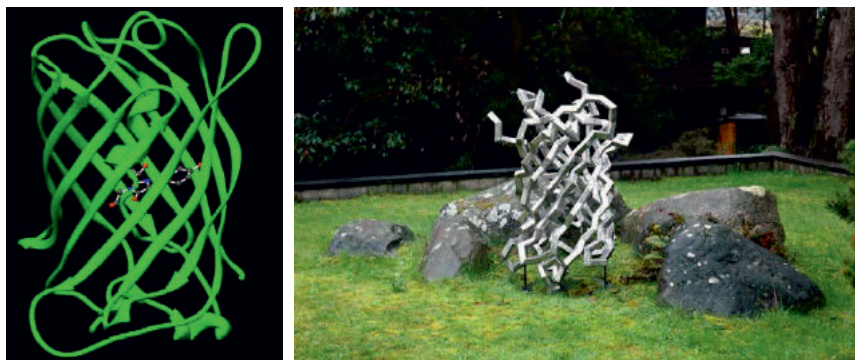


Abbildung 1: Ribbon-Darstellung der 3D-Struktur des grün fluoreszierenden Proteins (GFP) (links) und die Skulptur *Jelly Fish* (rostfreier Stahl, Höhe, 1,40 m) aus dem Jahr 2006, welche an der University von Washington (WA, USA) in San Juan Island ausgestellt ist (rechts).

Aus der gleichen Zeit stammt die Skulptur *Heart of Steel* (siehe Abb. 2). Sie ist dem Hämoglobin-Molekül, welches für den Sauerstofftransport im Blut verantwortlich ist, nachempfunden. Sauerstoff ist lebensnotwendig, entfaltet aber auch eine zerstörerische Kraft, wie man an dem langsamen Rosten der Skulptur unter dem Einfluss der Elemente verfolgen kann.

Die Skulptur *Angel of the West* (siehe Abb. 3) stellt eine Referenz zu der 10 Jahre früher entstandenen Skulptur *Angel of the North* von Antony Gormley dar. Sie porträtiert ein Antikörper-Molekül, welches in einem Ring platziert ist. Aufgrund der ähnlichen Proportionen des Antikörper-Moleküls und eines menschlichen Körpers entsteht eine Verbindung zu Leonardo da Vincis *Vitruvianischem Menschen*.



Abbildung 2: Skulptur *Heart of Steel (Hemoglobin)* aus dem Jahr 2005. Die Bilder zeigen die 1,60 m hohe Skulptur unmittelbar nach der Installation, nach 10 Tagen und mehrere Monate danach dem Einfluss der Elemente ausgesetzt.



Abbildung 3: Skulptur *Angel of the West* aus dem Jahr 2008. Die Skulptur ist einem Immunglobulin-Molekül nachempfunden und am Scripps Research Institute in Jupiter (FL, USA) ausgestellt.

Im Gegensatz zu den bisher gezeigten Biologie-inspirierten Skulpturen *Jelly Fish*, *Heart of Steel* und *Angel of the West* ist die Skulptur *Quantum Man* eher physik-inspiriert (siehe Abb. 4). *Quantum Man* zeigt das Bild eines wandelnden Mannes, der als Quantenobjekt gesehen wird. Je nachdem, aus welcher Richtung man ihn betrachtet, sieht er entweder massig und solide oder transparent und nahezu nichtexistent aus.

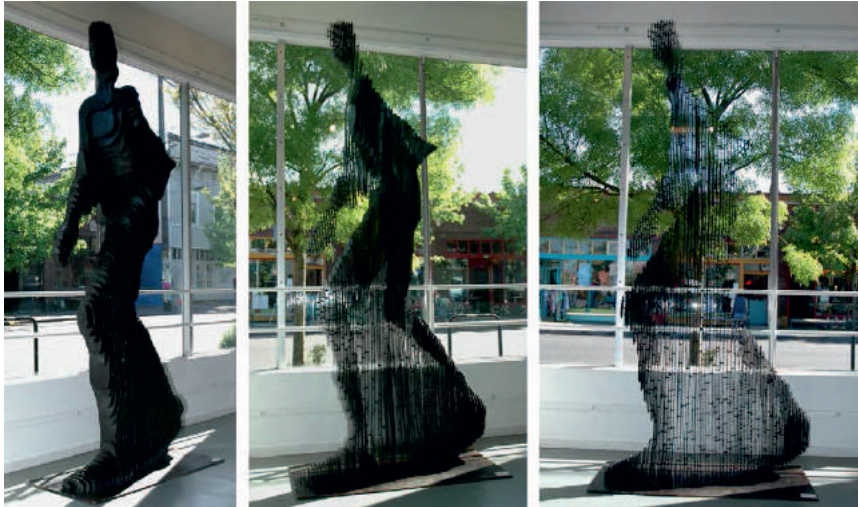


Abbildung 4: Verschiedene Ansichten der Skulptur *Quantum Man* aus dem Jahr 2006. Die 2,50 m hohe Skulptur ist aus Stahl hergestellt und befindet sich in City of Moses Lake (WA, USA).

Die Skulptur *Receptor* beinhaltet sowohl etwas Quantenquantenphysikalisches als auch etwas zentral Menschliches (siehe Abb. 5). Sie besteht aus zwei Teilen: Einer Kugel, die an einem Ast hängt (ein dreidimensionales Positiv) und einem sitzenden Quantenmensch mit einem hohlen Kopf (das dreidimensionale Negativ), die perfekt ineinanderpassen. Betrachtet man *Receptor* stellt sich einem die zentrale menschliche Frage, was ist es letztlich, das uns ganz macht?

Julian, Du hast mal gesagt: „Ich designe und erschaffe mit meinem Team Skulpturen, die oft mit unserem Körper, mit unserem Erleben der Welt, insbesondere durch die Brille der Wissenschaft, zu tun haben“. Daher ist es meine feste Überzeugung, dass Du, Julian Voss-Andreae, den *Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis* der DGK für Dein einzigartiges, Wissenschaft-inspiriertes, künstlerisches Werk verdient hast.

Ganz herzlichen Glückwunsch Julian!

Manfred Weiss, Berlin



Abbildung 5: Skulptur Receptor (Die bange Frage) aus dem Jahr 2019. Die 3,10 m hohe Stahlskulptur besteht aus zwei Teilen, von denen eines an einem Baum hängt, welcher Teil des Gesamtwerks ist, und ist in San Diego (CA, USA) ausgestellt.

Literatur und Weiterführendes

- [1] Arndt *et al.*: Nature 401 (1999) 680–682
- [2] julianvossandreae.com
- [3] [@JulianVossAndreae](https://www.instagram.com/JulianVossAndreae)

80. GEBURTSTAG VON PETER PAUFLER



Zur Vollendung seines 80. Lebensjahres am 18. Februar 2020 möchten die Unterzeichnenden im Namen zahlreicher Weggefährten und Schüler Herrn Prof. (i. R.) Dr. Dr. h. c. Peter Paufler herzlich gratulieren und ihm für die Zukunft das Allerbeste wünschen.

Peter Paufler wurde in Dresden geboren, wo er auch sein Studium der Physik an der Technischen Universität 1958 begann. In seiner Diplomarbeit 1963 befasste sich Peter Paufler mit der Züchtung von Einkristallen intermetallischer Verbindungen, es folgten Promotion 1967 und Habilitation 1971. Dabei erarbeitete er grundlegende Beiträge zum plastischen Verhalten der Laves-Phase MgZn_2 als Mitarbeiter von Gustav E. R. Schulze. Sein Mentor und wissenschaftlicher Lehrer G. E. R. Schulze war es auch, der ihn gegen verschiedene politisch motivierte Angriffe abschirmte und damit auch dazu beitrug, den Einstieg in die Hochschullehrerlaufbahn zu ermöglichen, was sonst unter den damaligen Umständen wohl nicht möglich gewesen wäre.

Ab 1963 war Peter Paufler wissenschaftlicher Assistent und Oberassistent am gleichen Institut, in dieser Zeit befasste er sich in Zusammenarbeit mit Herrn Schulze auch mit Fragen der Systematik von Kristallstrukturen intermediärer Phasen. In diese Zeit fallen auch zeitweilige Arbeitsaufenthalte im Kernforschungszentrum Grenoble und im Institut für Kernforschung Dubna sowie 71/72 ein Zusatzstudium an der Physikalischen Fakultät der Moskauer Staatlichen Universität. 1970 wurde Peter Paufler zum Hochschuldozenten für Experimentalphysik ernannt, 1973 übernahm er nach der Emeritierung von Professor Schulze die Leitung des Lehrkollektivs Festkörperphysik, das die Ausbildung aller Physikstudenten der TU zu gewährleisten hatte.

1968 wurden Peter Paufler Mitglied der Vereinigung für Kristallographie der DDR (VfK), in der er auch bald aktiv mitwirkte. 1972 übernahm er die Leitung der Arbeitsgruppe Gitterphysik, seit 1974 gehörte er der Leitung der VfK und dem Nationalkomitee für Kristallographie der DDR an, von 1983 bis 1985 war er Vorsitzender der VfK. 1978 wurde

Peter Paufler als Nachfolger von H. Neels auf den Lehrstuhl für Kristallographie an der Universität Leipzig berufen. Diese Position war verbunden mit der Leitung des Instituts für Kristallographie, Mineralogie und Materialwissenschaften. Während seiner Tätigkeit konzentrierte er sich besonders auf die Untersuchung halbleitender III-V-Verbindungen. 1992 nahm Peter Paufler einen Ruf auf den Lehrstuhl für Kristallographie an der TU Dresden an, bis er im Jahre 2006 in den Ruhestand trat. Besondere Aufmerksamkeit hat Peter Paufler neben seiner Mitwirkung in Universitätsgremien und nationalen und internationalen kristallographischen Organisationen sowohl in Leipzig als auch in Dresden der Lehre gewidmet. Dass er auch auf diesem Gebiet sehr erfolgreich war, haben seine Schüler und auch diejenigen Studenten, die seine Vorlesungen besuchten, immer wieder betont.

Sein wissenschaftliches Werk umfasst mehr als 200 Publikationen; Peter Paufler ist Autor mehrerer Lehrbücher, von denen besonders die 1986 erschienene „Physikalische Kristallographie“ zu erwähnen ist – ein Buch, das Generationen von Studenten mit den Grundlagen der Kristallphysik und den physikalischen Eigenschaften von Kristallen vertraut gemacht hat.

Peter Paufler ist Mitglied in einer ganzen Reihe von wissenschaftlichen Vereinigungen, war maßgeblich beteiligt an der Gründung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK), der Nachfolgeorganisation von VfK und der Arbeitsgemeinschaft für Kristallographie (AGKr), war Mitglied des Vorstands und Vorsitzender und wurde 2014 zum Ehrenmitglied ernannt. 2006 wurde er Ehrenmitglied der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG), deren Vorsitz er ebenfalls innehatte, im selben Jahr verlieh ihm die Universität Leipzig die Ehrendoktorwürde, 1993 wurde er zum Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina – Nationale Akademie der Wissenschaften gewählt, seit 1998 ist er auch Mitglied der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig.

Die Unterzeichnenden wünschen Peter Paufler, dass er gemeinsam mit seiner Frau Ursula und ihren Kindern noch viele erfüllte Jahre mit Freude am Leben und besonders an seiner Wissenschaft verbringen kann.

Ekkehart Tillmanns, Wien und Dirk C. Meyer, Freiberg

ANKÜNDIGUNGEN

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN MAX VON LAUE-PREIS 2021

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

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

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

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

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie 2021 in Hamburg statt.

Einsendeschluss: **30. November 2020**

Alexandra Friedrich, Würzburg

Preiskomitee für den Max von Laue-Preis:

- Dr. Alexandra Friedrich – Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- Dr. Manuel Hinterstein – Karlsruhe Institut für Technologie
- Prof. Dr. Hermann Schindelin – Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- Prof. Dr. Björn Winkler – Goethe Universität Frankfurt am Main
- *Vorsitzender der DGK (ex officio):* Prof. Dr. Ralf Ficner – Georg-August-Universität Göttingen

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL KLEBER - GEDENKMÜNZE 2021

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

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

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2020** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

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

Preiskomitee für die Will Kleber-Gedenkmünze:

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

Bisherige Preisträger:

- 2020 Robert Dinnebier
- 2019 Michael Ruck
- 2018 Hermann Gies
- 2017 Peter Gille
- 2016 Sander van Smaalen
- 2015 Reinhard Neder
- 2014 Bernd Müller
- 2013 Helmut Klapper
- 2012 Helmuth Zimmermann
- 2010 Hans Boysen und Friedrich Frey
- 2009 Rudolf Allmann
- 2008 Joachim Bohm

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL HERMANN-MEDAILLE 2021

Sehr geehrte Kolleginnen und Kollegen,

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

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2020** zuzusenden.

Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

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

Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille:

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

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

Der Preis der „Stiftung des Waltrude und Friedrich Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie“ soll dazu beitragen, die Verknüpfung der Kristallographie mit anderen Wissenschaften in Lehre und Forschung zu fördern und diese Verknüpfung in der Öffentlichkeit stärker sichtbar zu machen. Es werden Arbeiten ausgezeichnet, in denen entweder Methoden und Betrachtungsweisen der Kristallographie auf Probleme einer anderen Wissenschaft (Partnerwissenschaft) oder Methoden und Betrachtungsweisen einer Partnerwissenschaft auf Probleme der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden.

Der Waltrude und Friedrich Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie ist mit 2000 € dotiert. Er wird auf dem Ehrenabend im Rahmen der Jahrestagung der DGK in Hamburg überreicht.

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

Vorschläge mit kurzer Begründung werden bis Montag, den 30. November 2020, erbeten und sind per E-Mail bei dem Vorsitzenden der Preiskommission (Prof. Dr. Wulf Depmeier, Universität Kiel, wulf.depmeier@ifg.uni-kiel.de) einzureichen.

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

Wulf Depmeier, Kiel

TAGUNGEN UND TERMINE

September 2020

- ~~30.08. — 01.09.2020~~ **Workshop on electron Pair Distribution Function (ePDF)**
 14.08. — 22.08.2021 in Kutna Hora (Tschechische Republik)
Verschohen nach 2021
 Kontakt: <https://www.uni-ulm.de/einrichtungen/hrem/epdf/>
- 31.08. — 11.09.2020 **24th JCNS Laboratory Course – Neutron Scattering 2020**
 in Jülich (Deutschland)
Online-Format
 Kontakt: https://www.fz-juelich.de/jcms/EN/Leistungen/ConferencesAndWorkshops/LabCourse/_node.html
- 31.08. — 04.09.2020 **CMD2020GEFES: Condensed Matter General Conference**
 in Madrid (Spanien)
Online-Format
 Kontakt: <https://eventos.uam.es/28512/detail/2020-joint-conference-of-the-condensed-matter-divisions-of-eps-cmd-and-rsef-gefes.html>
- 01.09. — 05.09.2020 **Modern Trends in Computational Material Discovery – 18th USPEX workshop**
 in Isfahan (Iran)
 Kontakt: <https://uspex-team.org/en/uspex/workshops>
- 02.09. — 05.09.2020 **VIII-th Crystallographic Symposium (NCS-2020)**
 in Varna (Bulgarien)
 Kontakt: <http://bgcryst.com/symp20>
- 07.09. — 11.09.2020 **DMSRE30 – 30th Joint Seminar Development of Materials Science in Research and Education**
 in Pavlov (Tschechische Republik)
 Kontakt: <https://dms.fzu.cz/30>
- ~~09.09. — 19.09.2020~~ **8th South American Macromolecular Crystallography School**
 in Montevideo (Uruguay)
Verschohen nach 2021
 Kontakt: <http://pasteur.uy/novedades/mx2020>

- ~~13.09.—18.09.2020~~
12.09. – 17.09.2021 **15th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP 2020)**
in Minsk (Weißrussland)
Verschohen nach 2021
Kontakt: <https://www.xtop2020.atomicus.by>
- ~~13.09.—16.09.2020~~
12.09. – 15.09.2021 **9th International Conference on Electron Tomography**
in Egmond aan Zee (Niederlande)
Verschohen nach 2021
Kontakt: <https://tomo2020.org>
- 17.09. – 18.09.2021 **9th German-French Workshop on Oxide, Dielectric and Laser single crystals (WODIL)**
in Berlin (Deutschland)
Kontakt: <https://www.ikz-berlin.de/~oxide/2020>
- ~~20.09.—24.09.2020~~
19.09. – 23.09.2021 **23rd EuroQSAR – 23rd European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationship Integrative Data-Intensive Approaches to Drug Design**
in Barcelona (Spanien)
Verschohen nach 2021
Kontakt: <https://www.euroqsar2020.org>
- ~~21.09.—25.09.2020~~ **Sommerschule „Kristallographie“ – 11. Intensivkurs „Grundlagen der Einkristallstrukturbestimmung“**
in Hardehausen (Deutschland)
Verschohen nach 2021
Kontakt: <https://dgk-home.de/meetings/workshops/>
- 23.09. – 25.09.2020 **ILL and ESS European Users Meeting**
in Lund (Schweden)
Online-Format
Kontakt: <http://neutrons4europe.com/>
- ~~24.09.—26.09.2020~~
16.09. – 18.09.2021 **23rd Heart of Europe Bio-Crystallography Meeting (HEC23)**
in Vierzehnheiligen (Deutschland)
Verschohen nach 2021
Kontakt: <https://www.hec23.uni-bayreuth.de>
- 28.09. – 02.10.2020 **ICDD Clinic – Rietveld Refinement & Indexing**
in Newton Square (Vereinigte Staaten von Amerika)
Kontakt: <http://www.icdd.com/rietveld>

Oktober 2020

- 01.10. – 02.10.2020 **Italian Crystal Growth – Crystal growth: from Theory to Application**
in Torino (Italien)
Kontakt: <https://www.icg2020.net>
- 03.10. – 05.10.2020 **10th International Conference of the Hellenic Crystallographic Association**
in Athen (Griechenland)
Kontakt: gkontopidis@vet.uth.gr
- 04.10. – 06.10.2020 **2nd Joint Meeting of the “Young Crystallographers“ (DGK) and the “Young Crystal Growers” (DGKK)**
in Freiberg (Deutschland)
Kontakt: <https://dgk-home.de/aks/jkyc/freiberg-2020>
- 12.10. – 16.10.2020 **ITMNR-9: 9th International Conference on Neutron Radiography**
in Buenos Aires (Argentinien)
Kontakt: <https://itmnr-9.sciencesconf.org>
- 19.10. – 23.10.2020 **Crete 2020 – 1st International CryoEM Symposium/Workshop**
in Heraklion (Kreta)
Kontakt: <https://cryoemcrete.com>

November 2020

- 01.11. – 05.11.2020 **Crystallography for Space Sciences**
in Addis Abeba (Äthiopien)
Kontakt: letaeyasu@yahoo.com

Überblick 2021

- ~~18.01. – 23.01.2021~~ **Third Pan African Conference on Crystallography**
~~17.01. – 22.01.2021~~ in Nairobi (Kenia)
Verschoben nach 2022
Kontakt: <https://pccr3africa.org>
- 15.03. – 19.03.2021 **28th Annual meeting of the German Crystallographic Society (DGK)**
in Hamburg (Deutschland)
Kontakt: <https://www.dgk-conference.de>
- 17.03. – 19.03.2021 **Deutsche Kristallzüchtungskonferenz DKT-2021**
in Berlin (Deutschland)
Kontakt: <https://www.dgkk.de>

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

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

<http://dgk-home.de>

Verantwortlich für die Gestaltung der DGK Homepage ist Herr Dr. Götz Schuck (Berlin). Anregungen, Informationen etc., aber auch kritische Anmerkungen sind willkommen.

WWW-Redakteur:

Dr. Götz Schuck – goetz.schuck@dgkristall2.de

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

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

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

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

WWW-Redakteur:

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

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

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

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

<http://www.dgkk.de>

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

WWW-Administratoren:

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

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

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

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

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

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

Name: Vorname(n):

Geburtsdatum:

Dienstanschrift*:

Universität/Firma:

Institut/Abteilung:

Straße:

Ort: PLZ: Land (falls ≠ D):

Telefon: E-Mail:

Privatanschrift*:

Straße:

Ort: PLZ: Land (falls ≠ D):

Telefon: E-Mail:

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

Jahresbeitrag :

Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung.

Die Bankverbindung der DGK ist:

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

Bevorzugt sollte die Beitragszahlung über Bankeinzug erfolgen.

Füllen Sie dazu bitte die umseitige Einzugsermächtigung aus.

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

Ort, Datum: Unterschrift:

Einzugsermächtigung

Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK: DE48ZZZ00001148361

Mandatsreferenz: wird separat mitgeteilt

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

Kontoinhaber Name:
(wie bei der Bank angegeben)

Bankinstitut:

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

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

Ort, Datum: Unterschrift:

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

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

BEITRAGSORDNUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

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

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

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

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

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

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

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

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

Die Mitgliedsbeiträge für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. (Steuernummer 162/141/20724) sind mit Steuerbescheid vom 29.05.2019 des Finanzamts Jena als steuerbegünstigte Zuwendungen anerkannt. Dieser Hinweis, zusammen mit dem Überweisungsbeleg ist für Zuwendungen bis zu einer Höhe von 200 € für die steuerliche Geltendmachung ausreichend.

Diese Beitragsordnung wurde von der Mitgliederversammlung der DGK am 25. Februar 2020 in Breslau, Polen beschlossen.

DATENSCHUTZERKLÄRUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE BEZÜGLICH PERSONENBEZOGENER MITGLIEDERDATEN

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

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

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

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

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

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