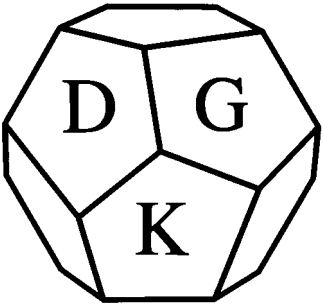

D
G
K

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

Dieses Heft enthält bezahlte Anzeigen der Firmen: AXO Dresden GmbH, Bruker AXS GmbH, Crystal Impact GbR, Crystal Maker Software Ltd., Dectris Ltd., ELDICO Scientific AG, Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, Malvern Panalytical Ltd., Rigaku Europe SE, STOE & Cie GmbH.

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:
Prof. Dr. Dirk C. Meyer oder Dr. Hartmut Stöcker
Technische Universität Bergakademie Freiberg
Institut für Experimentelle Physik
Leipziger Straße 23, 09596 Freiberg
Tel.: 03731 39 2773, Fax: 03731 39 4314
E-Mail: *dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de* oder *hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de*

Redaktionsbereiche:
Anzeigen und Werbung: Dr. Tilmann Leisegang, *tilmann.leisegang@physik.tu-freiberg.de*
Veranstaltungshinweise: Dr. Melanie Nentwich, *melanie.nentwich@desy.de*
Herstellung: Dr. Hartmut Stöcker, *hartmut.stoecker@physik.tu-freiberg.de*

Druck und Bindung:
UNIdruckerei.de, Inh.: Dipl.-Kfm. (FH) Bert Buschmann
Reichenbachstraße 19, 01069 Dresden, Tel.: 0351 3299696

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

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

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

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

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

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

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

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

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

kaum vorstellbar, wie groß die Enttäuschung gewesen sein muss, als Prof. Wolfgang Schmahl und sein Organisationsteam erfuhren, dass die 30. DGK-Jahrestagung vom 14. bis 17. März 2022 in München aufgrund der Corona-Pandemie erneut nur im Internet als Online-Konferenz stattfinden sollte. Alles war bereits für eine *Onsite*-Tagung vorbereitet, als die bayerischen Universitäten für den Frühling ein Verbot zur Ausrichtung von Konferenzen vor Ort erhielten, obwohl man in der nahe gelegenen Allianz-Arena bereits wieder Fußball vor Zuschauern spielen und die 25. IUCr-Tagung vom 14. bis 22. August 2021 in Prag als Hybrid-Konferenz mit immerhin 350 von insgesamt über 1600 Teilnehmern *onsite* von Statten gehen durfte. Nichtsdestotrotz schafften es die engagierten Mitstreiter von Wolfgang Schmahl an der LMU ausgesprochen gut, den knapp 300 eingetragenen Online-Teilnehmern den Charakter einer echten Tagung zu vermitteln. Viel mehr Glück hatten die Ausrichter des 33. *European Crystallographic Meeting* vom 23. bis 27. August 2022 in Versailles, denn sie konnten bei sommerlichem Wetter ihre Tagung als komplette Präsenzveranstaltung mit über 900 Teilnehmern abhalten. Erneut hat die DGK dafür Reisestipendien ausgelobt, damit fünf junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler daran teilhaben konnten. Entgegen nunmehr veralteten Terminfindungsversuchen wird die nächste, also 31. DGK-Jahrestagung vom 27. bis 30. März 2023 in Frankfurt am Main hoffentlich als Vollpräsenzveranstaltung stattfinden, nicht weit von meiner hessischen Heimat in der Wetterau nämlich, was mich ganz besonders freut. Lassen Sie mich Herrn Prof. Stefan Knapp samt seinem Organisationsteam in unser aller Namen alles Gute für dieses Unterfangen wünschen. Im März so nah, im August so weit entfernt, liegt im Jahre 2023 der Austragungsort der 26. IUCr-Konferenz vom 22. bis 29. August 2023 in Melbourne. Zum zweiten Mal seit 1987 in Perth werden wir uns zum *26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography* nun also auf dem australischen Kontinent einfinden und sehen einer großartigen Zeit im Land „Down Under“ entgegen.

Die schon von meinen Amtsvorgängern Prof. Dr. Susan Schorr und Prof. Dr. Ralf Ficner auf den Weg gebrachte und weitergeführte Idee einer modernen DGK-Broschüre ist Wirklichkeit geworden, denn sie liegt nun interaktiv und zweisprachig (Deutsch und Englisch) auf insgesamt 16 Seiten vor. Zum Gelingen dieser jahrzehntelangen Anstrengung haben vor allem die beiden schon genannten Protagonisten (Susan Schorr, Berlin, und Ralf Ficner, Göttingen) mit Ausdauer und Willen zur Kontinuität beigetragen, doch nicht zuletzt auch der wissenschaftliche Input von Gert Weber (Berlin), Sebastian Bette und Robert Dinnebier (Stuttgart), Tina Sorgenfrei und Andreas Danilewsky (Freiburg i. Br.), Wolfgang Schmahl (München), Marie Münchhalfen und Jürgen Schreuer (Bochum), Jan Wollenhaupt (Berlin), Anna-Lena Hansen (Karlsruhe) und Susan Schorr (Berlin). Namentlich ungenannt, aber dennoch sehr hilfreich, sollen darüber hinaus die zahlreichen Sponsoren aus Industrie und Akademie erwähnt werden, die den finanziellen Aufwand abgemildert haben. Ein weiteres Langzeitprojekt stellt die Umorganisation und Verschlankung der Arbeitskreise innerhalb der DGK von derzeit knapp 20 auf eine eher einstellige Zahl hin dar. Dieser Prozess ist allerdings noch zu stark im Fluss, um erste Erfolge vermelden zu können. Wie üblich sind zu guter Letzt die alljährlich ausgeschriebenen und von der DGK zu vergebenden Preise im Jahre 2023, namentlich die Carl-Hermann-Medaille, der Max-von-Laue-Preis, die Will-Kleber-Gedenkmünze und der Lieselotte-Templeton-Preis, zu erwähnen, für die der 30. November 2022 als Einreichungsfrist zum Vorschlag geeigneter Kandidaten gilt.

Nachdem mein letztjähriger Wunsch, dass die Corona-Pandemie global abebben und in die Nähe einer schlichten Grippe geraten möge, so gut wie in Erfüllung gegangen ist, bereitet mir nun vor allem der seit Ende Februar 2022 andauernde Russisch-Ukrainische Krieg als Folge der imperialistischen Invasion der Ukraine durch Putin-Russland große Sorge. Weltweite Sanktionen gegenüber Russland haben für eine Energiekrise von gewaltiger Dimension gesorgt, so dass ich Ihnen an dieser Stelle viel Resilienz wünschen muss. Kommen Sie gut und gesund durch den Winter!

Ihr Thomas Schleid (DGK-Vorsitzender)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 17.03.2022 9

Anlage zu Punkt 6.2: Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees 17

Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters 21

Zum Stand der Reform der Arbeitskreise der DGK 25

Rückblick auf die 30. Jahrestagung der DGK 31

Bericht vom 25. IUCr-Kongress in Prag 33

2022 – Internationales Jahr des Glases 37

Sonderausgabe der Zeitschrift für Kristallographie von und mit den Jungen Kristallographen der DGK 41

Kristallographie im Alltag – Wie kommt Schokolade zu ihrem unverwechselbaren Geschmack? 47

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht des AK 7 „Neutronenstreuung“ 55

Bericht des AK19 56

Symmetrie-Workshop 2022 in Dresden 58

Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“ 61

Personalia:

Jubilare 2022 67

Verstorbene Mitglieder 69

Max-von-Laue-Preis 2022 an Andrea Thorn 70

Will-Kleber-Gedenkmünze 2022 an Holger Kohlmann 72

Carl-Hermann-Medaille 2022 an Wulf Depmeier 75

Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2022 an Juan Manuel Garcia-Ruiz 79

Lieselotte-Templeton-Preis 2022 87

Ehrenmedaille der TU Dresden für Peter Paufler 92

Herbert Pöllmann 93

Ankündigungen:

Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2023 99

Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2023 100

Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2023 101

Ausschreibung Lieselotte-Templeton-Preis 2023 103

Tagungen und Termine 105

Homepages von DGK, DMG und DGKK 107

Aufnahmeformular 109

Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 111

Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten 112

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 17.03.2022

Die Mitgliederversammlung wurde im Zuge der Umstellung der Jahrestagung von einer Präsenz- in eine Onlinekonferenz relativ kurzfristig von ihrem ursprünglich geplanten Termin verschoben. Sie fand am Donnerstag, dem 17.03.2022, von 13:45 Uhr bis 15:15 Uhr als Videokonferenz statt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Thomas Schleid, eröffnet die Sitzung um 13:45 Uhr.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit ist gegeben. Es sind 73 Mitglieder anwesend. Nach §9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 1040 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 52 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird ohne Veränderungen, wie versandt angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls

Das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 16.03.2021, welche als Videokonferenz im Rahmen der letzten Jahrestagung abgehalten wurde, wird – wie in Heft 51 der DGK-Mitteilungen ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

In Gedenken an die verstorbenen Mitglieder wird eine Schweigeminute eingelegt. Thomas Schleid erinnert auch an die Opfer des gegenwärtigen Krieges in der Ukraine.

6 Berichte

6.1 Bericht des Vorsitzenden

Thomas Schleid dankt Wolfgang Schmahl für die Vorbereitung der Jahrestagung, die aufgrund der notwendigen kurzfristigen Umplanung von Präsenz auf Online besonders arbeitsaufwendig war. Er weist drauf hin, dass schon 2021 die ECM als Hybridtagung mit lokaler Präsenz stattfinden konnte und in diesem Jahr eine ganze Reihe internationaler Kristallographentagungen als Präsenztagung geplant sind; insbesondere das *33rd European Crystallographic Meeting*, 23.–27. August in Versailles, Frankreich.

6.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Thorsten Gesings Bericht liegt schriftlich vor; er ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Thomas Schleid weist darauf hin, dass Deutschland in den Kommissionen der IUCr auch in Zukunft gut vertreten sein wird. In das *Executive Committee* wurde Manfred Weiss gewählt.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet: Die DGK hat derzeit 1056 Mitglieder, davon 28 % Frauen und 72 % Männer. Dieser Anteil steigt zu den jüngeren Jahrgängen nur langsam an; eine Ausnahme bildet hier die Kohorte der Mitglieder im Ruhestand, welche fast vollständig männlich ist.
Erfreulicherweise konnte die DGK im vergangenen Jahr nach längerem Rückgang wieder einen starken Anstieg der Mitgliederzahlen verbuchen. Dies ist insbesondere auch der aktiven Bewerbung eines Beitritts bei der Anmeldung zur Jahrestagung zu verdanken, die durch den Ausrichter Wolfgang Schmahl erfolgt ist. Ob dies nachhaltig ist, wird sich erst zeigen, es sollte aber auf jeden Fall beibehalten werden.
Allerdings ist von einer nicht geringen Anzahl an Mitgliedern keine gültige Adresse bekannt; die Mitgliederliste wird demnächst in Kooperation mit dem Schatzmeister bereinigt.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann ist verhindert; er berichtet mittels einer Videoaufzeichnung. Die Finanzaufstellung ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Signifikante irreguläre Ausgaben waren die Organisation der Online-Mitgliederversammlung durch Conventus, welche zur Abhaltung einer rechtssicheren Wahl des Vorstands notwendig war, sowie die Erstellung des Videos für die IUCr-Vorbewerbung. Da aufgrund banktechnischer Probleme der Jahresbeitrag für 2020 erst in 2021 abgebucht werden konnte, erfolgte dies im vergangenen Jahr doppelt.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) und Ullrich Pietsch (Universität Siegen) erläutern ihren schriftlich vorliegenden Kassenprüfungsbericht: Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie für das Geschäftsjahr 2021 wurde am 10. März 2022 durchgeführt. Der Schatzmeister der DGK, Herr Christian Lehmann, hatte dafür die zur Prüfung erforderlichen Unterlagen, d. h. sämtliche Kontoauszüge mit Buchungsbelegen und Rechnungsabschlüssen aller vorhandenen Unterkonten, die Auflistung der Bankeinzüge der Mitgliederbeiträge, eine detaillierte Aufstellung der Umsätze aller Unterkonten und eine Gesamtbilanz, in elektronischer Form vorgelegt. Die Kassenprüfung erfolgte im Rahmen eines Zoom-Meetings.

Die Prüfung der vorgelegten Belege und Übersichten hat die Stimmigkeit der Aufstellung und Bilanzen in der Buchführung ergeben. Die anhand der Bankauszüge geprüften Kontostände zu Jahresbeginn und Jahresende stimmen mit den von Herrn Lehmann für das Geschäftsjahr 2021 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

Als Besonderheit ist zu vermerken, dass unter „Einnahmen“ die Mitgliederbeiträge für 2020 und 2021 verbucht sind. Das erklärt sich aus der Tatsache, dass der Einzug im Jahr 2020 aus banktechnischen Gründen nicht möglich war. Daraus ergibt sich ein sehr hoher Einnahmenüberschuss. In Anbetracht der Höhe des Guthabens und der positiven Bilanzen befürworten die Kassenprüfer ausdrücklich die Aufstockung der zweckgebundenen Rücklage zur Unterstützung der deutschen Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr2029 um weitere 15.000 €.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Claudia Weidenthaler berichtet in Vertretung von Jürgen Schreuer: Die IMA begeht das Jahr 2022 als Internationales Jahr der Mineralogie. Ebenfalls ist die diesjährige Jahrestagung der DMG die 100ste. Die Deutsche Mineralogische Gesellschaft hat die Doris-Schachner-Medaille eingeführt, welche die Abraham-Gottlob-Werner-Medaille in Gold ersetzt.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

David Rafaja berichtet: Die DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) wurde auf den 4. bis 9. September 2022 verschoben, findet aber als Präsenztagung statt.

6.8 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Dirk Meyer berichtet: Die DGK-Mitteilungen können weiter in der inzwischen gewohnten Form einmal pro Jahr erscheinen und auch den Weg gedruckt in die Briefkästen der Mitglieder finden. Wir mussten bezüglich der Werbebeiträge, welche Berichte, insbesondere auch unseres Nachwuchses einrahmen, sogar „bremsen“. Also: Genau so weiter aus Freiberger Sicht, falls gewünscht. Ansonsten: Alle Unterstützung für Weiterentwicklung an anderer Stelle.

Hartmut Stöcker weist auf die Wichtigkeit hin, die DGK-Mitteilungen auch in Zukunft in gedruckter Form herauszugeben und ruft zur Einreichung von Beiträgen auf.

6.9 Bericht des Redakteurs der Homepage

Es liegt kein Bericht des Redakteurs der Homepage vor.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird ohne Gegenstimmen entlastet.

8 Annahme der Beitragsordnung

Die von ordentlichen Mitgliedern und Mitgliedern im Ruhestand erbetene Spende in Höhe von 5 € wird für die Verleihung des Liebau-Preises verwendet. Der Beitrag für eine unpersönliche Mitgliedschaft kommerzieller Firmen in der DGK wird festgelegt. Ansonsten bleibt die Beitragsordnung unverändert:

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 € auf Antrag (+ 5€ Spende*)
G Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand

Für eine unpersönliche Mitgliedschaft kommerzieller Firmen in der DGK gilt derzeit ein Beitragssatz von 200 Euro.

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

* Die Spende wird für die Verleihung des Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen, und nicht spenden möchten, müssen Widerspruch einlegen.

Diese Beitragsordnung wird ohne Gegenstimmen angenommen.

9 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Die bisherigen Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch erklären ihre Bereitschaft, dies Amt erneut zu übernehmen. Sie werden ohne Gegenstimmen wiedergewählt.

10 Satzungsänderungen

10.1 Streichung des Amtes des Redakteurs der „Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK“

Die „Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK“ waren eine von der DGK herausgegebene gedruckte Schriftenreihe. Diese war für die Publikation von Beiträgen gedacht, welche den Charakter von Übersichtsartikeln haben, die interessierten Studenten und Wissenschaftlern einen Einblick in aktuelle Forschungsgebiete und mögliche zukünftige Entwicklungen vermitteln. Hierbei wurde insbesondere ausgearbeitetes Begleitmaterial zu Workshops der DGK ins Auge gefasst. Zwischen 1998 und 2004 sind in dieser Reihe 14 Hefte erschienen, von denen einige in elektronischer Form auf der Webseite der DGK erhältlich sind. Seither sind die Publikation und damit auch das Amt des Redakteurs inaktiv. Eine Wiederbelebung nach 18 Jahren ist nicht zu erwarten, auch da diese Form der Publikation unzeitgemäß ist. Material dieser Art wird heutzutage in der Regel als Tutorial im Internet veröffentlicht. Berichte über Veranstaltungen der Arbeitskreise erscheinen in den „Mitteilungen“.

Es wird deswegen vorgeschlagen, das Amt des Redakteurs der „Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK“ aus der Satzung der DGK zu streichen. Das Amt wird in der Satzung der DGK an drei Stellen genannt; die im Folgenden kursiv gesetzten Abschnitte sind zu streichen:

§10, Abs. 7:
Der Vorstand benennt folgende Mitglieder des Beirates:
… die Redakteurin / den Redakteur der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK.

§14, Abs. 2:
Dem Beirat gehören an:
… die Redakteurin / der Redakteur der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK.

§14, Abs. 10:
Die Redakteurinnen / Redakteure der Berichte aus den Arbeitskreisen der DGK geben im Auftrag des Vorstandes der DGK die Berichte aus den Arbeitskreisen heraus. Eingereichte Manuskripte werden von ihnen hinsichtlich des Inhaltes und der Form geprüft und bei Eignung in einheitlicher Form zum Druck gegeben und zum Vertrieb bereitgestellt.

Abs. 10 ist der letzte Absatz des §14; eine Anpassung nachfolgender Nummerierungen ist deswegen nicht notwendig.

Dieser Antrag wird ohne Gegenstimmen angenommen.

10.2 Eintragung des Lieselotte-Templeton-Preises in die Satzung

Nachdem auf der Mitgliederversammlung 2021 die Einrichtung des Lieselotte-Templeton-Preises und dessen Preisordnung beschlossen wurden, muss dieser noch in die Satzung der DGK eingetragen werden. Hierzu müssen ein neuer Paragraph eingefügt und die Nummerierung der folgenden Paragraphen angepasst werden:

§20 Lieselotte-Templeton-Preis
Der Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie ist dem Andenken an Lieselotte Templeton gewidmet und soll dazu beitragen, die Attraktivität der Kristallographie insbesondere bei Studierenden zu erhöhen. Einzelheiten werden durch eine Ordnung geregelt.

Die nachfolgenden Paragraphen §20 (Änderung des Statutes und Auflösung der DGK) und §21 (Haftung) bleiben inhaltlich unverändert, werden aber als §21 und §22 renummeriert.

Dieser Antrag wird ohne Gegenstimmen angenommen.

11 Assoziierung mit GDCh

Um die Möglichkeiten einer formalen Assoziierung der DGK mit der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) auszuloten wurde auf der Herbstsitzung des Vorstandes Oliver Oeckler beauftragt, Kontakt zur Fachgruppe Festkörperchemie & Materialforschung in der GDCh aufzunehmen. Dabei stellte sich allerdings heraus, dass die internen Strukturen der GDCh Probleme aufwerfen, die es so bei unserer Assoziierung mit DMG und DPG nicht gibt:

Der eigentliche Vorstand der GDCh ist ein eng gefasstes Gremium, an dessen Sitzungen nur die Vorstandsmitglieder teilnehmen. Eine wechselseitige Entsendung von Vertretern in den Vorstand, wie in der Satzung der DGK vorgesehen, ist in der GDCh unbekannt

und wäre auch der sehr unterschiedlichen Größe der Gesellschaften nicht angemessen. Dies wurde von unserer Seite auch zu keiner Zeit angestrebt. Stattdessen wurde Kontakt mit der Fachgruppe Festkörperchemie & Materialforschung in der GDCh aufgenommen. Aber auch die Fachgruppenvorstände in der GDCh kennen keine festen Vertreter anderer Gesellschaften, nur je nach Tagesordnung eingeladene Gäste. Ein dauerhafter Vertreter der DGK würde implizit die vielen anderen wissenschaftlichen Gesellschaften, mit denen die Fachgruppe der GDCh kooperiert, zurücksetzen. Weitere Komplikationen ergeben sich daraus, dass es neben der Fachgruppe Festkörperchemie & Materialforschung in der GDCh auch noch den Arbeitskreis ChemKrist in der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie gibt, welcher bei diesem Modell nicht berücksichtigt würde. Zwischen diesem Arbeitskreis und unserem AK 6 „Molekülverbindungen“ besteht bereits eine langjährige und enge Zusammenarbeit.

Aus diesen Gründen passt eine informelle Regelung für eine Kooperation mit der GDCh besser als die formellen Assoziierungsabkommen, welche mit DMG und DPG bestehen.

Bis auf weiteres wird Oliver Oeckler als Berichterstatter aus der GDCh zu den Sitzungen des Vorstands eingeladen.

12 Neustrukturierung der Arbeitskreise

Die Planungen für eine komplette Neustrukturierung und eventuelle Änderungen der Ordnung für die Arbeitskreise wurden lange und lebhaft diskutiert. Es ist allgemeiner Konsens, dass eine solche Reform notwendig ist. Auch dass die Anzahl der Arbeitskreise reduziert werden soll, wird von den allermeisten Wortmeldungen anerkannt. Der Vorstand soll in Absprache mit dem Beirat, insbesondere den derzeitigen Vorsitzenden der Arbeitskreise und den Mitgliedern die Einzelheiten ausarbeiten und die neue Struktur implementieren. Eine Darstellung des Zwischenstands erscheint als eigener Artikel ab Seite 25.

13 Sonstiges

Das Wissenschaftskolleg der DGK wird auf der nächsten Vorstandssitzung neu berufen werden. Alle Mitglieder sind aufgefordert, dem Vorstand geeignete Kandidaten vorzuschlagen.

Die Fachkollegien der DFG werden ebenfalls in 2022 neu gewählt. Im Frühjahr 2022 beginnt die DFG mit der Erstellung der Kandidatenliste. Die Vorschläge müssen bis zum 31.10.2022 bei der DFG eingehen. Noch ist aber nicht einmal der Zuschnitt der Fächer publiziert. Alle Mitglieder sind aufgefordert, dem Vorstand geeignete Kandidaten vorzuschlagen. Hierzu wird aufgerufen werden, nachdem die DFG über die Vorschlagsrechte entschieden hat.

Das Amt der Verantwortlichen für die Öffentlichkeitsarbeit der DGK ist weiterhin unbesetzt. Interessenten werden gebeten, sich beim Vorstand zu melden.

Es wurde der Wunsch geäußert, bei zukünftigen Tagungen eine Möglichkeit zur Online-Teilnahme beizubehalten.

14 Jahrestagung 2024

Es liegt ein Angebot vor, die Jahrestagung 2024 in Bayreuth auszurichten, welches von Sander van Smaalen dargelegt wird. Organisation und Tagungsleitung würden von Natalia Dubrovinskaia, Leonid Dubrovinsky und Sander van Smaalen übernommen werden. Tagungsort wäre das Arvena-Kongress-Hotel in Bayreuth. Dieser Vorschlag findet allgemeine Zustimmung.

15 Jahrestagung 2023

Die nächste Jahrestagung wird in der Zeit 27.–30. März 2023 in Frankfurt stattfinden. Der Tagungsleiter Stefan Knapp berichtet und lädt herzlich zur Teilnahme ein.

Der Vorsitzende schließt die Sitzung um 15:21 Uhr.

Daniel Többens
(Schriftführer)

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DES VORSITZENDEN DES NATIONALKOMITEES

IUCR

- Die Mitglieder der Kommissionen der IUCr wurden bei der IUCr-Tagung in Prag 2021 für die Periode 2020–2023 gewählt (Liste siehe unten).
- Die übernächste IUCr-Tagung findet 2026 in Calgary, Kanada, statt.
- Es gibt eine breite Unterstützung für die Bewerbung Berlins als Tagungsort 2029.
- Manfred Weiss wurde in das *Executive Committee* der IUCr gewählt.

ECA

- Beim *ECA Council Meeting* am 28.04.2021 wurden Änderungen der ECA-Satzung vorgestellt und erläutert. Der Beschluss über die Änderungen der ECA-Satzung wurde beim *Council Meeting* im Rahmen der IUCr-Tagung am 16. und 18.08.2021 in Prag gefasst. Die aktuelle Version ist einsehbar unter: *https://ecanews.org/about-eca/statutes-and-by-laws/*
- Das neue *ECA Executive Committee* wurde bei der IUCr-Tagung in Prag gewählt. Die aktuelle Zusammensetzung ist einsehbar unter: *https://ecanews.org/about-eca/executive-committee/*
- Die drei wählbaren *Individual Member Representatives* brauchen für die Nominierung mindestens sechs Unterschriften von *Affiliated or Individual Members*. Das NK hat keinen Überblick über Individuelle Mitglieder (IM) und kann deshalb nicht helfend tätig werden. Die Frage ist, inwieweit der Status der deutschen IM innerhalb der DGK bekannt ist oder ermittelt werden kann.
- Die ECA feiert 2022 Ihren 25. Geburtstag, das *European Crystallographic Committee* seinen 50. Geburtstag.

TAGUNGEN UND WORKSHOPS

- ACA2022: Portland, OR, USA, 29.07.–03.08.2022
- ECM-33: Versailles, Frankreich, 23.–27.08.2022
- AsCA2022: Jeju, Südkorea, 30.10.–02.11.2022
- IUCr-26: Melbourne, Australien, 22.–29.08.2023
- ECM-34: Padua, Italien, 20.–24.08.2024
- ECM-35: Lviv, Ukraine, August 2025
- IUCr-27: Calgary, AB, Kanada, 11.–18.08.2026

BEWERBUNG IUCR 2029 BERLIN

- Manfred Weiss berichtet dem NK regelmäßig über die Vorbereitungen. Details unter: *https://iucr2029.org/*
- NK-Mitglieder unterstützten den Ausstellungsstand bei der IUCr-Konferenz in Prag.

Thorsten M. Gesing, Bremen

Commission	**Commission members 2020–2023**	**Consultants 2020–2023**
Aperiodic Crystals	Tilmann Leisegang (Freiberg)	Sander van Smaalen (Bayreuth)
Biological Macromolecules	Norbert Sträter (Leipzig)	
Crystal Growth and Characterization of Materials		Christo Guguchev (IKZ Berlin)
Crystallographic Computing	Andrea Thorn (Hamburg)	Kay Diederichs (Konstanz)
Crystallographic Nomenclature*	Ulrich Müller (Marburg)	
Crystallographic Teaching		
Crystallography in Art and Cultural Heritage	Sebastian Bette (Stuttgart)	
Crystallography of Materials		
Diffraction Microstructure Imaging	Ulrich Lienert (Hamburg)	
Electron Crystallography	Tatjana Gorelik (Ulm)	Ute Kolb (Mainz), Peter van Aaken (Stuttgart)
High Pressure	Natalia Dubrovinskaia (Bayreuth)	
Inorganic and Mineral Structures		Thorsten M. Gesing (Bremen)
Magnetic Structures		
Mathematical and Theoretical Crystallography		Michael Fischer (Bremen)
Neutron Scattering	Martin Meven (München)	
NMR Crystallography and Related Methods	Jürgen Senker (Dortmund)	
Powder Diffraction		Bernd Hinrichsen (Stuttgart)
Quantum Crystallography	Wolfgang Scherer (Augsburg)	
Small-Angle Scattering	Emmanuel Kentzinger (Jülich)	Daniel Clemens (Berlin), Dmitri Svergun (Hamburg)
Structural Chemistry		
Synchrotron and XFEL Radiation	Thomas Tschentcher (Hamburg)	
XAFS	Edmund Welter (Hamburg)	

* The Commission on Crystallographic Nomenclature comprises an elected Chairperson and *ex officio* members, namely the editors of the Union's journals and International Tables, the Chairman of the IUCr/OUP Book series Committee, the Chairman of the Teaching Commission, the Chairman of the Committee for the Maintenance of the Crystallographic Information File Standard, the President, and the General Secretary of the IUCr.

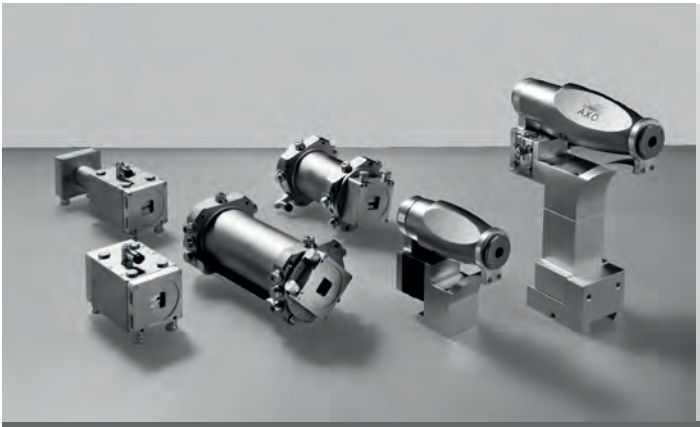
AXO DRESDEN: X-ray sources, coatings & multilayer optics

Primux 50 microfocus X-ray sources
high brilliance, water-cooled, easy alignment, low running and maintenance costs

Tailored multilayer X-ray optics
all wavelengths, focusing or collimating, focal length, bandwidth, convergence and other parameters on demand

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

Complete systems and upgrades
for all common instruments, tailored solutions



www.axo-dresden.de

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2021 der DGK			
Einnahmen 2021			
Mitgliedsbeiträge inkl. Laue-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2021	21.825,00 €	48.551,84 €
	Barzahler 2021	740,00 €	
	Einnahme Dauermitglieder	166,84 €	
	Bankeinzug rückwirkend	25.180,00 €	
	Beiträge rückwirkend	640,00 €	
Zinsen und Gebühren	Laue-Sparbuchauflösung	0,00 €	0,00 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Umbuchung Liebau-Preisgeld			2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	500,00 €	500,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			5.000,00 €
Summe Einnahmen			**56.051,84 €**
Ausgaben 2021			
Mitteilungen			-7.442,00 €
Mitgliedsbeiträge	Rücklastschriften 2020	-985,00 €	-1.315,00 €
	Rücklastschriften	-330,00 €	
Administration	Bankgebühren	-404,09 €	-8.153,60 €
	Stornokosten	-87,68 €	
	Ehrungen und Preise	-103,80 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-2.797,47 €	
	Webseite	-214,76 €	
	IUCr2029	-4.545,80 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-975,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-2.500,00 €	-6.203,35 €
	Ausgaben	-103,35 €	
Reisestipendien	IUCr Prag	-1.600,00 €	
Liebau-Preisgeld		-2.000,00 €	
Max-von-Laue-Preisgeld		0,00 €	
Summe Ausgaben			**-24.088,95 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2021			
Einnahmen	0 neue Dauermitglieder	0,00 €	0,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2020		-166,84 €
Überschuss 2021			**-166,84 €**
Rücklage IUCr 2029			
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin			15.000,00 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2020			**31.796,05 €**

Kontoführung 2021 der DGK			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Giro	4.389,55 €	5.016,85 €	627,30 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.085,55 €	1.918,71 €	-166,84 €
Sonderkonto AK 21	1.909,77 €	2.306,32 €	396,55 €
Rücklage IUCr 2029	15.000,00 €	15.000,01 €	0,01 €
DKG-Cash 085	4.016,50 €	34.016,50 €	30.000,00 €
Sparkasse	0,00 €	939,04 €	939,04 €
Guthaben der DGK	**27.401,37 €**	**59.197,43 €**	**31.796,06 €**

Jahresabrechnung 2021 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2021			
Zinsen	Laue-Kapital 930		0,00 €
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			**0,00 €**
Ausgaben 2021			
Laue-Preis 2021	Dr. Dorothee Liebschner		0,00 €
Summe Ausgaben (Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen)			**0,00 €**
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2021			**0,00 €**
Kontoführung 2021			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Laue-Sparbuch 920	0,00 €	0,00 €	0,00 €
Laue-Kapital 930	60.000,00 €	60.000,00 €	0,00 €
Kapital	**60.000,00 €**	**60.000,00 €**	**0,00 €**

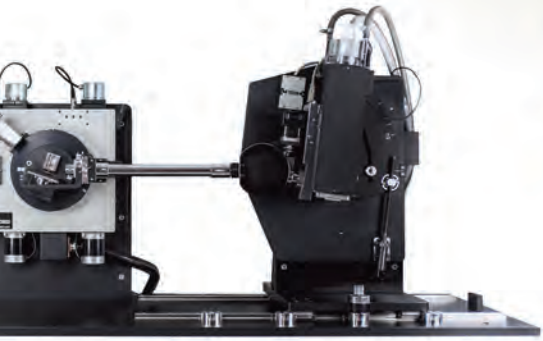
Jahresbilanz 2021 Liebau-Stiftung			
Einnahmen 2021			
Zinsen	Stiftungskapital 870		0,00 €
Spenden für Preisgeld			0,00 €
Summe Einnahmen			**0,00 €**
Ausgaben 2021			
Liebau-Preis 2021	Prof. Dr. G. Artioli		-2.000,00 €
Kosten Preisverleihung			0,00 €
Summe Ausgaben			**-2.000,00 €**
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2021			**-2.000,00 €**
Kontoführung 2021			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Stiftungskapital 870	32.311,82 €	30.311,82 €	-2.000,00 €
Kapital der Stiftung	**32.311,82 €**	**30.311,82 €**	**-2.000,00 €**

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

STOE
SINCE 1887

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

Zum Stand der Reform der Arbeitskreise der DGK

Die Aktivitäten der Arbeitskreise in der DGK sind ein zentraler und wichtiger Teil der Arbeit der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie. Die Satzung stellt ihnen eine große Aufgabe: Die Arbeitskreise sollen die wissenschaftliche Entwicklung auf ihrem Gebiet eigenverantwortlich vorantreiben. Die Arbeitskreisordnung füllt dies aus, ohne dabei von dem hohen Anspruch abzugehen: Die Arbeitskreise sollen den wissenschaftlichen Erfahrungs- und Gedankenaustausch fördern, Weiter- und Fortbildung auf ihren Gebieten der Kristallographie betreiben und der Förderung von Forschung und Lehre der Kristallographie dienen. Um dies tun zu können, stellt die DGK den Arbeitskreisen eine ganze Reihe an Mitteln zur Verfügung. Die Arbeitskreise können selbstständig Workshops, Foren oder Kolloquien durchführen und dazu finanzielle Mittel von der Gesellschaft erhalten. Sie werden im Beirat zu den Sitzungen des Vorstands eingeladen, können Vorschläge für Schwerpunktthemen der Jahrestagungen unterbreiten und sogar Mikrosymposien auf den Jahrestagungen durchführen. Auch Zeit für Arbeitskreissitzungen soll auf den Jahrestagungen eingeräumt werden. Und jedes Mitglied wird bei der Anmeldung und bei jeder Aktualisierung seiner persönlichen Daten gebeten, seine Interessen in Bezug auf die Arbeitskreise anzugeben.

Leider lässt die Arbeitskreisaktivität derzeit einiges zu wünschen übrig. Viele Arbeitskreise der DGK sind seit Jahren inaktiv und nur wenige organisieren regelmäßig Veranstaltungen. Diese Situation konnte durch einfache Maßnahmen wie zum Beispiel Aufrufe zur verstärkten Aktivität oder leichteren Zugang zu finanziellen Mitteln nicht signifikant behoben werden. Möglichkeiten zur Wiederbelebung der Arbeitskreise werden schon seit mehreren Jahren in Vorstand und Beirat diskutiert. Als eine zentrale Ursache des Problems schälte sich dabei heraus, dass viele Arbeitskreise von einer einzelnen Person abhängen, häufig dem langjährigen Sprecher des Arbeitskreises. Wenn diese ihr Engagement reduziert und kein Nachfolger gefunden werden kann, dann versandet die Aktivität. Dies wird weiter dadurch begünstigt, dass die meisten Arbeitskreise sich über ein relativ enges inhaltliches Thema definieren. Sprecher und andere aktiv beitragende Mitglieder sind ja in der Regel Wissenschaftler, in deren Arbeit das Thema des Arbeitskreises einen breiten Raum einnimmt. Von diesen gibt es naturgemäß umso weniger, je enger das Thema des Arbeitskreises gefasst ist.

Natürlich bietet die Satzung die Möglichkeit, Arbeitskreise nicht nur neu einzurichten, sondern bei nicht mehr vorhandenem Bedarf auch zu schließen. Dies ist aber nicht unproblematisch. Das irgendwann kein besonders engagiertes Mitglied der DGK die Leitung eines Arbeitskreises übernehmen möchte, bedeutet ja noch lange nicht, dass das Thema des Arbeitskreises nicht für die Kristallographie von Bedeutung ist oder sich niemand dafür interessiert. Viele von uns haben zwar eine oder zwei Methoden, mit denen wir primär arbeiten, und konzentrieren uns auf ein oder zwei Materialklassen. Aber wir schauen auch immer über den Tellerrand, was das Fach sonst noch an Nützlichem bietet. Ein ersatzloses Wegfallen einer experimentellen Methode oder eines Themas aus dem Kreis der Arbeitskreise ist deshalb wohl kaum der richtige Weg. Dennoch ist grundsätzlich klar, dass die Flexibilität der Arbeitskreisstruktur erhalten werden sollte. Die Anzahl der Arbeitskreise muss weiterhin ohne unnötigen Aufwand verändert werden können. Möglicherweise wäre sogar ein Zustand wünschenswert, in dem Neugründung und Auflösung von Arbeitskreisen der Normalzustand ist.

Gemeinsam ist aber all den vorstehenden Betrachtungen, dass sie auf eines hinauslaufen: Aktuell benötigen wir Arbeitskreise, die größer und weniger spezialisiert sind. Die Organisation von Workshops erfordert eine Mindestgröße. Und mindestens zwei oder drei Leute sollten im Arbeitskreis institutionell aktiv sein, damit nicht durch den Ausfall eines Einzelnen die Aktivität abreißt. Dass die wenigen großen Arbeitskreise in der DGK, allen voran der AK Biologische Kristallographie, auch die aktivsten sind, bestärkt diese Annahme.

Im Umkehrschluss heißt dies, wir benötigen weniger Arbeitskreise. Die DGK hat eine im Vergleich zur Größe der Gesellschaft sehr hohe Anzahl an Arbeitskreisen, derzeit 19 bei etwa 1000 Mitgliedern. Im Vergleich der fachnahen Gesellschaften ist dieses Verhältnis von 1:53 das höchste:

- Die DGKK hat 6 Arbeitskreise bei 400 Mitgliedern (1:66).
- Die DMG hat insgesamt 9 Sektionen, Arbeitskreise und Projektgruppen bei 1400 Mitgliedern (1:155).
- Die Deutsche Gesellschaft für Materialkunde DGM hat 32 Fach- und Gemeinschaftsausschüsse bei 2200 Mitgliedern (1:69).
- Die Gesellschaft für Biochemie und Molekularbiologie GBM hat insgesamt 26 Studiengruppen, Arbeitskreise und Junior-GBM bei 5200 Mitgliedern (1:200).
- Die GDCh hat insgesamt 41 Fachgruppen & Arbeitsgemeinschaften bei 30.000 Mitgliedern (1:732). Allerdings haben in der GDCh Fachgruppen zumindest teilweise wieder eigene Arbeitskreise in der Fachgruppe.
- In der DPG sind die Fachlichen Vereinigungen ihrerseits zu drei Sektionen zusammengeschlossen; insgesamt bestehen 29 Fachliche Vereinigungen bei 50.000 Mitgliedern (1:1724).

Der Vergleich mit den fachnahen Gesellschaften legt eine Anzahl von höchstens 14 Arbeitskreisen als für die DGK geeignet nahe. Dies wäre in etwa dasselbe Verhältnis 1:70 von Arbeitskreisen zu Mitgliedern wie bei den anderen kleinen Gesellschaften. Allerdings zeigt die Erfahrung, dass die Anzahl der Arbeitskreise mit der Zeit eher zunimmt, dass Neugründungen häufiger sind als Schließungen oder Zusammenlegungen. Es sollten deswegen zunächst mit weniger, etwa zehn, Arbeitskreisen begonnen werden.

Vor diesem Hintergrund ist der Vorstand zu der Entscheidung gekommen, dass eine vollständige Neustrukturierung der Arbeitskreise der DGK sinnvoll und notwendig ist. Ein Entwurf hierfür wurde im Rahmen der letzten Jahrestagung vorgestellt und von den Mitgliedern diskutiert. Es ist geplant, die neue Struktur auf der Jahrestagung 2023 zu installieren. Im Folgenden möchte ich den vorläufigen Entwurf der Arbeitskreisstruktur und die noch offenen Fragen vorstellen, wie sie sich in der bisherigen Diskussion herausgeschält haben:

AK 1	Junge Kristallographen
AK 2	Kristallographie in der Lehre
AK 3	Biologische Kristallographie
AK 4	Materialwissenschaftliche Kristallographie
AK 5	Molekülverbindungen und Kristallchemie
AK 6	Physikalische und Theoretische Kristallographie
AK 7	Spektroskopie
AK 8	Streu- und Beugungsmethoden
AK 9	Elektronenkristallographie
AK 10	Computergestützte Kristallographie

Diese Struktur ist heterogen. Die Arbeitskreise 1 und 2 sind allgemeiner Natur und könnten als „General Interest Group“ besonders hervorgehoben werden. Die Arbeitskreise 3 bis 5 beziehen sich auf Materialklassen. Die Arbeitskreise 7 bis 10 dagegen sind über Methoden definiert. Der AK 6 hat Aspekte von beidem. Es stellen sich natürlich Probleme der Vollständigkeit und der Abgrenzung. Zum einen auf ganz grundlegender Ebene. So gibt es Einwende, dass die methodischen Arbeitskreise 7 bis 10 eigentlich unnütz seien: Wenn die Methoden auf konkrete Materialien angewendet werden, dann wird das durch die entsprechenden Arbeitskreise abgedeckt. Und wenn es um die Entwicklung der Methode geht, dann fällt dies unter Theorie. Dies würde allerdings den AK 6 sehr aufblähen. Alternativ wäre deswegen auch ein Arbeitskreis „Instrumentierung und Methoden“ denkbar. Umgekehrt gibt es allerdings auch Stimmen, die eine Konzentration auf methodisch definierte Arbeitskreise wünschen, mit Themen wie computergestützte Kristallographie, Datenanalyse, Diffraktion, Kristallphysik. Dahinter steht die Annahme, dass ein Verzicht auf die materialbasierten Arbeitskreise den interdisziplinären Austausch stärken und verhindern würde, dass sich vereinzelte Gruppen bilden, die untereinander keinen Kontakt mehr pflegen.

Bei neueren Methoden, deren Bedeutung für die Kristallographie in Zukunft eher noch steigen wird, stellt sich die Frage, ob diese eines eigenen Arbeitskreises bedürfen. Besonders häufig taucht in der Diskussion der Ruf nach einer stärkeren Stellung für Computational Methods und Elektronenkristallographie auf. In der oben angeführten Liste sind sie deswegen als eigene Arbeitskreise aufgeführt und nicht mehr in Theoretischer Kristallographie beziehungsweise Beugungsmethoden integriert. Diese Gewichtung bedarf sorgfältiger Abwägung. Weder sollen Arbeitskreise gebildet werden, die wieder zu klein für eine effektive Arbeit sind, noch dürfen einzelne Arbeitskreise zu dominierend sein.

Ein weiteres Problem ist die gewünschte Detailliertheit der Namen der Arbeitskreise. Hier hat sich vor allem am Thema der Molekülverbindungen eine Debatte entzündet. Denn Molekülverbindungen sind sowohl Thema der chemischen als auch der biologischen Kristallographie. Sollten sie also im Namen beider Arbeitskreise ausdrücklich genannt werden, nur bei einem oder gar nicht? In jedem Fall wird Über-, Unter- oder Fehlrepräsentation bemängelt. Ähnliche Fragen stellen sich bei der Verortung klassischer kristallographischer Bereiche, wie Mineralogie, Geowissenschaften, Symmetrielehre oder Kristalloptik und Mikroskopie, die früher eine sehr große Rolle in der Kristallographie spielten. Generell besteht auch hier ein Spannungsfeld. Einerseits soll die Breite der Arbeitskreise nicht durch Einzelthemen zerredet werden. Andererseits muss aber auch die Vielfalt der Methoden in einem Arbeitskreis dargestellt werden.

Die Struktur der Arbeitskreise muss einerseits an die Aktivitäten der Mitglieder der Gesellschaft angepasst sein, soll andererseits aber auch derzeit zu schwache Aktivitäten beleben. Dieses Spannungsfeld wird vor allem beim Thema „Kristallographie in der Lehre“ sichtbar. Es gibt allgemeine Zustimmung, dass die Frage, wie heute Kristallographie unterrichtet und Nachwuchswissenschaftler und Jugendliche für die Kristallographie interessiert werden können, für die Zukunft des Faches von entscheidender Bedeutung ist. Und trotzdem sind konkrete Aktivitäten zu diesem Fragenkomplex sowohl auf den Jahrestagungen als auch in der sonstigen Arbeit der Gesellschaft kaum wahrzunehmen.

Als Nebeneffekt der Diskussion zur Reform der Struktur der Arbeitskreise ergaben sich auch einige Vorschläge, wie deren Aktivität dauerhaft gesichert werden kann. Zum einen sollte verhindert werden, dass die Aktivität eines Arbeitskreises von einem einzelnen, dauerhaften Sprecher abhängt. Dazu wäre zum Beispiel eine regelmäßige Neuwahl des Sprechers zu überlegen, um zu erreichen, dass weitere Personen aktiv werden müssen. Zwar ist auch jetzt

schon die Amtszeit als Sprecher auf maximal drei Jahre beschränkt, in der Praxis hat sich die Möglichkeit einer Wiederwahl als Dauerinstitution herausgestellt. Allerdings würde sich ohne diese Möglichkeit die Herausforderung stellen, die Nachfolge sicherzustellen. Eine Aufwertung des stellvertretenden Sprechers wäre hierfür sicherlich sinnvoll. Ein weiterer Ansatzpunkt böte der Vorschlag, dass Arbeitskreise in Zukunft automatisch Mitglieder des Programmkomitees der Jahrestagung stellen, anstatt nur das Recht für Vorschläge zu haben. Diese Funktion müsste nicht unbedingt der Vorsitzende übernehmen.

Ein weiterer Aspekt ist die Sichtbarkeit der Arbeitskreise auf der Jahrestagung. Hier herrscht eine scharfe Konkurrenz um Zeitfenster. Plenarvorträge, Mikrosymposien und Postersessions müssen untergebracht werden. Unsere Sponsoren aus der Industrie wünschen sich immer mehr Lunchtime-Symposien und natürlich Zeiten, in denen Tagungsteilnehmer die Industrieausstellung besuchen können. Die Veranstaltungen der Gesellschaft, Preisverleihungen und -vorträge, Vorstands- und Mitgliederversammlung sind Kernelemente – es ist immerhin die Jahrestagung der Gesellschaft für Kristallographie, nicht einfach eine x-beliebige Tagung. In diesem Umfeld haben die Arbeitskreise bislang den Kürzeren gezogen. Gerade weil ihre Aktivität zu wünschen übrigließ, wurde dadurch freiwerdende Zeit für anderes verplant. Arbeitskreissitzungen sollten idealerweise in einem eigenen, exklusiven Zeitfenster liegen, in dem sie nicht mit anderen Veranstaltungen konkurrieren müssen. Nur auf den ersten Blick einfacher wäre es, die Sprecher der Arbeitskreise wie früher wieder auf der Mitgliederversammlung berichten zu lassen – dies würde die Dauer der Versammlung deutlich erhöhen. Die verlorene Zeit wieder für die Arbeitskreise zurückzugewinnen, wird sicher nicht ohne Abstriche an anderer Stelle des Tagungsprogramms möglich sein.

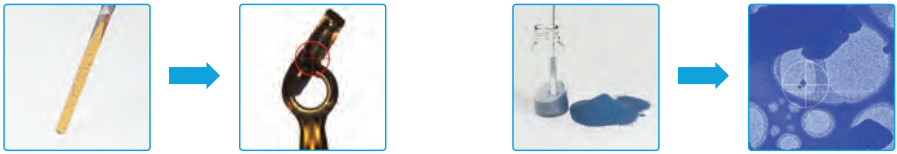
Ich denke, es gibt noch einiges zu tun. Aber wir sind auf einem guten Weg zu einer Wiederbelebung.

Daniel Többens, Berlin

WHATEVER THE SIZE OF YOUR CRYSTALS, WE HAVE A DIFFRACTOMETER FOR YOU

- A full range of diffractometers in every performance class
- HyPix technology for noise-free direct detection
- CrysAlis^{Pro} software powers all of our diffractometers

XtaLAB Mini II | XtaLAB Synergy-S | XtaLAB Synergy-Flow | XtaLAB Synergy-ED



Rigaku oxford diffraction

CrysAlis^{Pro}

As a researcher, you might not be able to choose the size of crystals you can grow, but you can choose the diffractometer you use to study them. At Rigaku Oxford Diffraction, we have developed a diffractometer in every performance class, from the XtaLAB mini II, the world's most compact diffractometer, to the XtaLAB Synergy-ED, the world's first commercially available electron diffractometer. Choose your diffractometer to fit your research. Choose Rigaku.

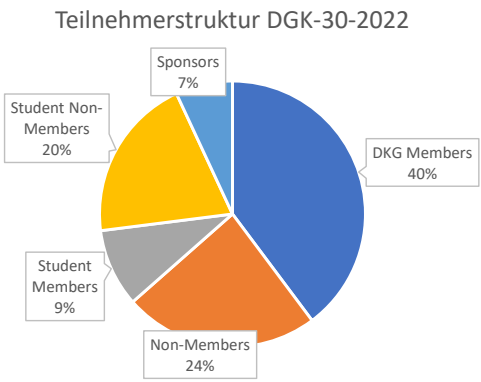
Rigaku

© 2022 Rigaku Corporation and its Global Subsidiaries. All rights reserved.

Rigaku Europe SE | Hugenottenallee 167 | 63263 Neu-Isenburg | Germany | rigaku.com | info@rigaku.com

Rückblick auf die 30. Jahrestagung der DGK

Die 30. DGK-Jahrestagung vom 14. bis 17. März 2022 war die zweite vollständig *online* veranstaltete DGK-Jahrestagung in Zeiten der Covid-19-Pandemie. Die Federführung der wissenschaftlichen Planung und Durchführung lag gemeinsam bei der LMU Kristallographie im Department für Geowissenschaften und der Strukturforschungs-Gruppe der Forschungs-neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) und selbstverständlich gab es eine rege Beteiligung der DGK-Arbeitskreise. Allen Befürchtungen über Online-Tagungen zum Trotz hatten wir am Ende 275 Teilnehmende aus allen Bereichen der Kristallographie und ein reich facettiertes Programmangebot mit zehn Plenarvorträgen und 18 Mikrosymposien. Nicht zuletzt konnte auch einer unerwartet großen Zahl von der DGK treuen Sponsoren aus der Industrie ein gewünschtes Forum geboten werden. Wir danken besonders Herrn Detlef Körner und Prof. Dr. Guntram Jordan für die innovative Konzeption eines sehr lebendigen digitalen *Meetings* auf der Softwareplattform *Zoom* der LMU. Durch die Gliederung des digitalen Raums in ein Foyer mit *Break-out Rooms* für die Sessions, aber auch „Cafés“ für Diskussionen in kleineren Gruppen und den digitalen Pub der *Young Crystallographers* blieb die Veranstaltung bis zum späten Abend sehr lebhaft. Björn Pedersen vom FRM-II setzte die Erfassung und Verwaltung der wissenschaftlichen Beiträge mit der Softwareplattform *Indico* am FRM-II um, logistische Unterstützung bei der digitalen Umsetzung der Poster-Session mit *Big Blue Button* erhielten wir auch vom Forschungszentrum Jülich. Insgesamt lief die Online-Tagung damit sehr rund und stand nach unserem Eindruck kaum einem „Live“-Treffen nach. Durch eine geeignete Struktur der Anmeldegebühren gelang es uns 26 neue DGK-Mitglieder zu werben.

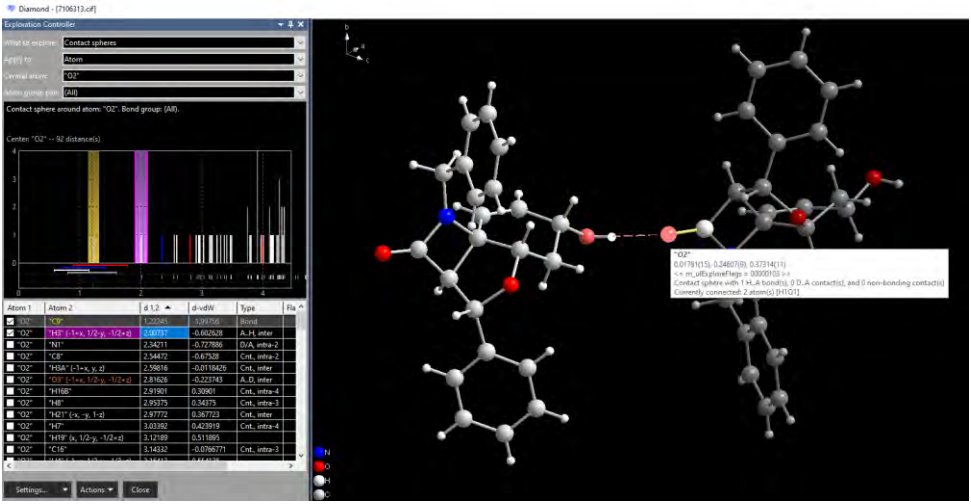


Wir danken allen Teilnehmerinnen und Teilnehmern sowie den insgesamt 50 Helferinnen und Helfern bei Organisation und Durchführung, die zum Erfolg der Tagung beigetragen haben. Der Abstractband ist sowohl auf den Webseiten der LMU als auch der DGK veröffentlicht.

Wolfgang Schmahl, Martin Meven, Tobias Schrader, München

DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Version 5

Die demnächst verfügbare Diamond Version 5 wird eine Reihe von neuen Features beinhalten:

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, Abstandshistogramm und einer Tabelle der Nachbaratome lassen sich gewünschte Verknüpfungen durch Anklicken leicht einfügen bzw. unerwünschte entfernen.

Weitere neue Funktionen:

Verbesserter *Workflow* bei der Erstellung mehrerer Bilder für einen Strukturdatensatz durch *Take Picture* und *Continue With New Picture*.

Vereinfachte Übersicht der Bilder (als Thumbnails) durch *More Pictures*-Docking-Fenster oder durch *Caption Bar*. (Die Reiter (Tabs) aus Version 4 sind weiterhin verfügbar.)

Import der Einstellungen aus Version 4.

Eine neuere Version der Crystallography Open Database (COD; www.crystallography.net)..

Mit Version 5 ersetzen wir das bisherige System kostenpflichtiger Updates durch das **"Update Permission Time"-Modell**, siehe: **https://www.crystalimpact.de/subscription.htm**.

Version 5 von Diamond wird in der zweiten Jahreshälfte 2022 erscheinen. Sie ist für lizenzierte Nutzer der aktuellen Version 4.x kostenlos.

https://www.crystalimpact.de/diamond/v5preview.htm

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

Bericht vom 25. IUCr-Kongress in Prag

Vom 14. bis 22.08.2021 fand in Prag, Tschechische Republik, der 25. IUCr-Kongress statt. Die Konferenz war als Hybrid-Veranstaltung mit Teilnahme in Person im Prager Kongresszentrum und virtuell über eine eigens dafür entwickelte Plattform organisiert. Dadurch, dass ein Großteil der insgesamt 1638 Teilnehmer virtuell an der Konferenz teilnahm, überzeugte die Konferenz für die Teilnehmer vor Ort vor allem durch den familiären Charakter und eine sehr gute Organisation.

Mit eindrucksvollem Blick über die Prager Stadt fanden im Kongresszentrum jeden Tag mehrere Sessions parallel, mit Beiträgen aus 104 Mikrosymposien aus allen Bereichen der Kristallographie statt. Während der neuntägigen Konferenz gab es insgesamt über 600 Vorträge und Poster. Durch die pandemiebedingte Hybrid-Variante der Konferenz wurde ein Großteil der Vorträge und Poster online präsentiert. Dafür wurden die Sprecher, die Online teilnahmen per Video oder Live während den Sessions dazu geschaltet. Für die Poster gab es Leinwände auf denen man die virtuellen Beiträge ansehen konnte. Trotz des hohen technischen Aufwandes lief alles reibungslos ab. Die Gesellschaftsabende der Konferenz hatten durch die geringere Teilnehmeranzahl in Person einen sehr familiären Charakter und man hatte die Möglichkeit schnell mit anderen Teilnehmern ins Gespräch zu kommen. Für den akademischen Nachwuchs wurde außerdem eine Bootsfahrt auf der Moldau, mit bestem Blick auf die nächtlich beleuchtete Prager Burg, organisiert. Das Konferenzdinner fand am vorletzten Abend im Nationalhaus Vinohrady statt. Kulinarische Köstlichkeiten wurden auf der Veranstaltung durch Live-Musik umrahmt.

Ich selbst hatte die Möglichkeit mit einem Posterbeitrag zum Thema „Structure of the ferroelectric low temperature phase of yttrium manganate YMn_2O_5 revisited“ meine aktuellsten Forschungsergebnisse vorzustellen. Dies war eine wunderbare Gelegenheit, mich mit anderen Forschenden über meine Arbeit auszutauschen, neue Erkenntnisse zu gewinnen und Kontakte zu knüpfen. 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. Außerdem habe ich als Vorstandsmitglied des Arbeitskreises „Junge Kristallographen“ auch am Werbestand der DGK für die Bewerbung der Austragung der IUCr 2029 in Berlin geholfen. Hier haben wir in Zweier-Teams andere Konferenzteilnehmer angesprochen und das Vorhaben der DGK beworben sowie Fotos mit den Teilnehmern vor dem offiziellen Werbebanner gemacht. Aus diesen Fotos ist eine schöne Collage für Werbezwecke entstanden.

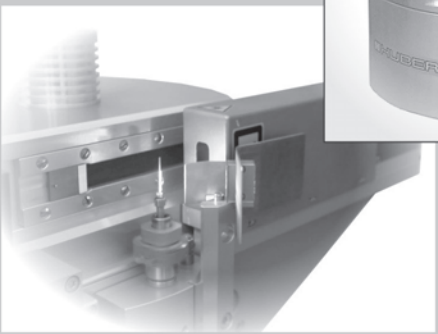
An dieser Stelle möchte ich mich bei der DGK für die großzügige finanzielle Unterstützung bedanken, mit der mir die Teilnahme an der IUCr-Konferenz ermöglicht wurde. Ein großes Dankeschön geht auch an die Organisatoren der Konferenz, welche diese zu einer äußerst lehrreichen, informativen und spannenden Veranstaltung für mich machten und trotz aller pandemiebedingten Einschränkungen eine schöne und familiäre Konferenz auf die Beine gestellt haben.

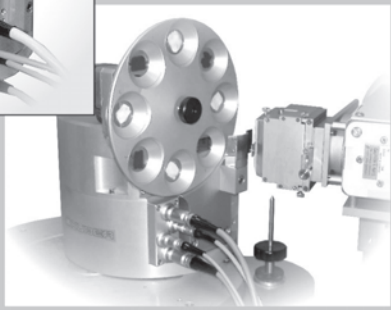
Tina Weigel, Freiberg

Mitglieder des Arbeitskreises Junge Kristallographen (von links: Melanie Nentwich, Constantin Buyer, Tina Weigel) mit Werbung für die IUCr 2029 und Blick über die Dächer von Prag

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry





HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

- ☑ A factor of more than100 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

2022 – Internationales Jahr des Glases

Die Generalversammlung der Vereinten Nationen erklärte das Jahr 2022 zum „Internationalen Jahr des Glases“, wodurch auf die Bedeutung und Wichtigkeit des Werkstoffes Glas für die Menschheit aufmerksam gemacht werden soll (*www.iyog2022.org*). Ausführliche Beschreibungen zum Werkstoff Glas, seinen Einsatzmöglichkeiten und jährlichen Produktionsmengen sind auf der genannten Webseite der Organisatoren des Internationalen Jahres des Glases zu finden. Es gibt wohl keinen Lebensbereich, in dem nicht der Werkstoff Glas in irgendeiner Form verwendet wird. Manche bezeichnen deshalb unsere Zeit auch als das „Zeitalter des Glases“. Der feierliche Eröffnungskongress fand am 10.02.2022 in Genf statt.

Wer einmal achtsam seinen Tagesablauf hinsichtlich des Werkstoffes Glas betrachtet, wird erstaunt sein, wann, wo und zu welchen Zwecken wir alles Glas anwenden und benutzen:

- Einmal schon, wo einfach der Begriff Glas ein Behältnis bezeichnet, wie z. B. Wasserglas, Bierglas, Weinglas über Sektglas bis Einweck- und Konservenglas. Haushaltsglas begegnet uns beim Backen, Kochen, Braten, allgemein auch einfach „Jenaer Glas“ benannt.
- Die Brille mit ihren Gläsern führt zum optischen Glas mit seinen Anwendungen in Mikroskopen, Ferngläsern und Teleskopen, auch in der Optoelektronik.
- Das chemisch beständige Behälterglas begleitet uns als Bier-, Wein-, Milchflaschen, aber auch als Arzneiflaschen und -ampullen, speziell auch als Laborglas für Laborgeräte.
- Flachglas in seinen vielfältigen Anwendungen und Eigenschaften findet sich als Fensterglas in Häusern und Autos, als Gebäudeverglasung, auch zur Wärmedämmung, als Bildschirm für Fernseher, Monitore für PCs und Laptops, als Berührungsglas in Smartphones usw.
- Bioglas wird vielfältig in der Endoprothetik und in der Zahnprothetik eingesetzt.
- Glasfasern sind das Grundmaterial von optischen Lichtleitern, welche die Kommunikation revolutioniert haben, aber auch von sehr stabilen Werk- und Verbundmaterialien.
- Nicht vergessen soll die Glaskunst sein, mit der uns die Glaskünstler die besonderen Möglichkeiten der Glasformung aufzeigen. Ebenfalls soll hierbei auch auf den gläsernen Weihnachtsbaumschmuck hingewiesen werden.

Hervorzuheben ist die sehr bedeutende Nachhaltigkeit des Werkstoffes Glas, der in hohem Maße recyclebar und somit umwelt- und energiebilanzschonend ist. Ohne alle Einsatzmöglichkeiten des Werkstoffes Glas aufzuzählen, kann zusammenfassend festgestellt werden: Ohne den Werkstoff Glas wären viele unserer heutigen Techniken, Technologien, Kommunikationen und auch die Benutzung täglicher Gebrauchsgegenstände nicht möglich.

Auch soll die Historie nicht vergessen werden, da Glas schon seit über 9000 Jahren von den Menschen hergestellt und genutzt wird.

Konträr zum Handeln des Kristallographen und Kristallzüchters besteht die Kunst – auch heute noch muss dieser Begriff dafür benutzt werden – des Glasmachers darin, die Keimbildung und das Kristallwachstum in seinem Material zu verhindern. Der Werkstoff Glas ist nichtkristallin, besitzt somit keine Raumgruppe, ist isotrop, sein Übergang aus dem Zustand der Schmelze in den festen Zustand erfolgt kontinuierlich und wird durch einen sogenannten Glasübergang gekennzeichnet, seine Struktur entspricht – meiner Meinung nach – derjenigen der Pränukleationsphase. Dadurch befindet sich das Glas in einem metastabilen Zustand und unterliegt einer möglichen Relaxation in den kristallinen Zustand. Der kontinuierliche Übergang in den festen Zustand ergibt die großartigen Möglichkeiten der Bearbeitung und Formung des Glases als Werkstoff. Infolge der Isotropie des Glases ist seine Quasi-gleichgewichtsform kein Polyeder mit ebenen Flächen (Habitus) wie beim Kristall, sondern die einfachste gekrümmte Fläche, die Kugelform. Der Glasübergang stellt noch eines der wesentlichen, ungelösten Probleme der Physik dar. Wegen des Fehlens einer Raumgruppe im Glas beträgt die Korrelationslänge nur einige Nanometer. Die atomare Struktur ist deshalb auch nur im Nahbereich bestimmbar, wobei diese meist mit der in der Kristallphase übereinstimmt, und die konkreten Verknüpfungen dieser lokalen Bereiche, welche die eigentliche Glasstruktur determinieren, sind nur modellierbar. Auch ist es wissenschaftlich noch umstritten, ob jedes nichtkristalline Material auch ein Glas ist, d. h. einen Glasübergang durchmacht. In der Natur kommt Glas nur selten vor, da alle natürlichen Materialien das Bestreben haben, in den stabilen, kristallinen Zustand unter Export von Entropie überzugehen.

Um das Internationale Jahr des Glases auch für sich zu nutzen, sollte, wer Zeit und Muse hat, die Initiative ergreifen und ein Glasmuseum aufsuchen, in welchem meist Historie, Werkstoff und Glaskunst sehr anschaulich dargestellt sind. In der Wikipedia sind unter dem Stichwort „Liste von Glasmuseen“ fast alle Glasmuseen Deutschlands aufgezählt, mit Anschrift usw. Ich persönlich empfehle das Glasmuseum in Jena (*http://museen.de/schott-glasmuseum-und-schott-villa-jena.html*), das sich in der ehemaligen Villa von Otto Schott befindet, an einem Entstehungsort der wissenschaftlichen Glasforschung und -produktion, aber auch das Museum für Glaskunst Lauscha (*www.glasmuseum-lauscha.de*), das die Bedeutung und Historie der Glasindustrie und -kunst insbesondere Lauschas und Thüringens erklärt, einschließlich des Entstehungsortes des gläsernen Christbaumschmuckes.

Da das Internationale Jahr des Glases auch die Glaswissenschaft und -forschung fördern soll, haben in Deutschland einige wenige Universitäten und Glasgesellschaften Veranstaltungen dem Internationalem Jahr des Glases gewidmet, wobei der Internationale Glaskongress in Berlin die Hauptveranstaltung sein soll:

- 73. BHT Kolloquium 3: Glas – ein transformativer Werkstoff, TU Bergakademie Freiberg, 08.06.2022
- 26. Internationaler Glaskongress, Berlin, 03.–08.07.2022
- Lebende Glasoberflächen XI, TU Ilmenau, 14.–15.09.2022
- Glasstec, Düsseldorf, 20.–23.09.2022

Über weitere Angebote zu Veranstaltungen zum Internationalen Jahr des Glases sollte man sich in der lokalen Presse usw. informieren.

Es soll noch angemerkt sein, dass die UNESCO außerdem das Jahr 2022 zum „Internationalen Jahr der Grundlagenforschung für nachhaltige Entwicklung“ erklärt hat (*www.unesco.de*). Die Generalversammlung der Vereinten Nationen betonte beim Beschluss des Internationalen Jahres, dass Anwendungen der Grundlagenwissenschaften für Fortschritte in Medizin, Industrie, Landwirtschaft, Wasserwirtschaft, Energieplanung, Umwelt, Kommunikation und Kultur von entscheidender Bedeutung sind. Insbesondere sollten auch die Kristallographen sich hinsichtlich dieses Beschlusses wiederfinden.

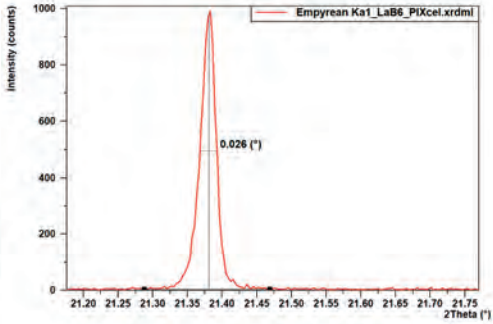
Innerhalb dessen wurde durch die *International Mineralogical Association* für 2022 ein Internationales Jahr der Mineralogie ausgerufen (*www.iybssd2022.org/en/2022-a-year-to-celebrate-mineralogy*), mit welchem einer der Begründer der modernen Kristallographie und Mineralogie, René Just Haüy, anlässlich seines zweihundertsten Todestages sowie des Erscheinens seines Hauptwerkes „Traité de cristallographie“ im Jahre 1822 geehrt werden soll.

Bernd Müller, Jena

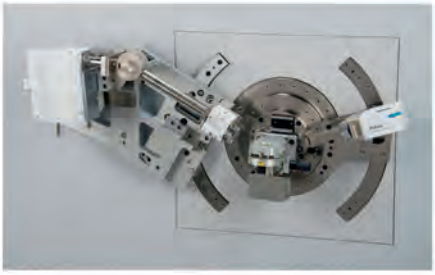
HIGH-RESOLUTION CRYSTALLOGRAPHY

Crystallographic analysis requires the highest quality diffraction data for accurate determination of atom positions and lattice dimensions, including:

- High resolution, expressed by the FWHM.
- Symmetrical peak shapes.
- High peak-to-background ratio.
  - Excluding scatters not related to the sample.
  - Excluding sample fluorescence by 1Der the high energy resolution detector.
- Excellent linearity of data across the 2-theta range.



The Empyrean Alpha-1 provides the highest quality diffraction data, second only to the best synchrotron beam line diffractometers.



1Der detector

Malvern Panalytical
a spectris company

www.malvernpanalytical.com/empyrean

Sonderausgabe der Zeitschrift für Kristallographie von und mit den Jungen Kristallographen der DGK

Unser Ziel war es, eine informative und interaktive Plattform für „junge“ Wissenschaftler zu schaffen, sowohl für die akademisch jungen als auch die „jung gebliebenen“. Weiterhin wollten wir auch möglichst alle Bereiche der Kristallographie abdecken. Und das ist uns durchaus gelungen: Wir haben 13 Beiträge erhalten, darunter sind sowohl die Endergebnisse einer Masterarbeit, als auch viele Erkenntnisse aus Doktor- und PostDoc-Forschung. Die Artikel umfassen verschiedene theoretische Überlegungen, Kristallzüchtung und -synthese sowie Strukturlösungen von Isolatoren, Pillarplexen und Co-Kristallen. Nur die Biologen haben sich vor uns versteckt. Bevor wir nun die kurze Geschichte dieser Ausgabe und einige ehrliche Kommentare unserer Mitwirkenden präsentieren, möchten wir uns bei allen bedanken, die diese Ausgabe möglich gemacht haben! Wir danken allen Autoren, die den Abgabetermin einhalten konnten! Vielen Dank an unsere internen Gutachter, die trotz ihres jungen Alters die Herausforderung angenommen haben, die Arbeiten anderer zu beurteilen! Wir wissen euer Engagement sehr zu schätzen! Wir danken den Editoren und Co-Editoren von ZKrist, die das offizielle Begutachtungsverfahren geleitet haben. Großer Dank gilt auch unseren Industriepartnern STOE, Anton Paar und Jena Bioscience, die durch ihre finanzielle Unterstützung eine kleine Überraschung für alle Beteiligten ermöglicht haben. Und schließlich möchte ich mich bei meinem Initiatorenteam Tina Weigel, Constantin Buyer und Jan Philipp Wöhrle bedanken. Nur als Team haben wir dieses Projekt zu einem erfolgreichen Ende gebracht!

Die Geschichte in Kurzform

von Melanie Nentwich, Hamburg

Im Jahr 2020 planten die Jungen Kristallographen ein Treffen, das im Oktober in Freiberg stattfinden sollte. Leider mussten wir es kurzfristig wegen Corona absagen. Was könnten wir sonst tun, um uns wissenschaftlich zusammenzubringen? Der damalige Betreuer von mir und Tina (Prof. Dirk C. Meyer, TU Bergakademie Freiberg) hatte die Idee, die Beiträge der Möchtegern-Teilnehmer zu sammeln und eine Sonderausgabe zu erstellen. Wir begannen, diese Idee im YC-Vorstand zu diskutieren und beschlossen, daran zu arbeiten. Im Januar 2021 schickten wir Briefe an verschiedene kristallographische Zeitschriften und entschieden uns schließlich für die Zeitschrift für Kristallographie, die perfekt zu den jungen Kristallographen in Deutschland passt. Im April haben wir das Projekt über Mailinglisten und auch persönliche Mails bekannt gemacht. Bis Oktober gingen insgesamt 13 Beiträge ein, die spätestens Ende November von unserem internen Review-Prozess freigegeben wurden. Diese interne Begutachtung wurde von insgesamt 12 Jungen Kristallographen durchgeführt und sollte zum einen den Autoren eine erste Einschätzung ihrer Arbeit geben und zum anderen die jungen Wissenschaftler an die anspruchsvolle Arbeit eines Gutachters heranführen. Im März 2022 wurde schließlich der letzte Beitrag angenommen und wir können nun mit Stolz unsere gemeinsame Arbeit präsentieren.

Die Sicht eines Initiators

von Tina Weigel, Freiberg

Als Initiator der Sonderausgabe hatte ich die Möglichkeit, den gesamten Entstehungsprozess zu überblicken. Das war sehr interessant, aber auch ein großer organisatorischer Aufwand. Der Einreichungs- und interne Begutachtungsprozess war für mich die größte Herausforderung. Dieser Teil umfasste:

- die Sicherstellung, dass die Autoren ihre Beiträge rechtzeitig einreichen,
- die Weiterleitung der Artikel an die internen Gutachter,
- die Sicherstellung, dass die internen Gutachter uns ihre Kommentare rechtzeitig zukommen lassen,
- die Weiterleitung der Kommentare an die Autoren,
- bei Bedarf die Begleitung der Autoren durch die ersten Schritte der Einreichung.

Außerdem waren wir die Ansprechpartner für verschiedenen Probleme oder Frage der Autoren, bis sie ihr Manuskript bei ZKrist offiziell eingereicht hatten. Das war nicht immer ganz einfach, denn manchmal hatten wir mit den gleichen Problemen zu kämpfen, z. B. mit der Generierung des LaTeX-Dokuments aus der Vorlage oder damit, dass wir E-Mails mit wichtigen Informationen nicht erhielten. Die Rolle als Initiator einer Sonderausgabe war sehr aufregend und ich habe wirklich viel gelernt, vor allem, wie ich meine Kommunikations- und Organisationsfähigkeiten verbessern konnte, denn all diese Arbeit wurde neben meiner normalen Arbeit als Doktorandin erledigt. Manchmal waren wir Initiatoren ein wenig frustriert über Dinge, die uns erst mit der Zeit klar wurden, und nach jedem Problem, das wir gelöst hatten, gab es ein neues. Die Früchte unserer harten Arbeit zu sehen, macht uns jedoch sehr stolz, vor allem weil wir all diese Herausforderungen gemeistert haben. Wir sind sehr glücklich darüber, dass all diese fantastischen Artikel veröffentlicht wurden.

Die Sicht eines Autors

von Alexandra Heidecker, München

Als ich zum ersten Mal von der Sonderausgabe der Jungen Kristallographen hörte, wollte ich unbedingt einen Artikel beisteuern. Und das Timing war perfekt, da ich vor kurzem eine schicke neue Kristallstruktur erhalten hatte. Meine Forschung ist auf dem Gebiet der supramolekularen Chemie angesiedelt, und es ist ziemlich schwierig, hervorragende Kristalldaten zu erhalten. Die erhaltenen Strukturdaten des Wirt-Gast-Systems waren außergewöhnlich, so dass ich mich sehr gefreut habe, die Kristalldaten, die auftretenden nicht-kovalenten Wechselwirkungen und vor allem die Art und Weise, wie sie analysiert werden, zu veröffentlichen.

Als Doktorandin betreue ich oft kurze Forschungspraktika im Masterstudium. In den letzten zwei Jahren mussten wir kreativ sein und Themen finden, an denen die Studierenden von zu Hause aus arbeiten konnten. Eine Idee war, Methoden zur Untersuchung von Kristallstrukturen im Hinblick auf die auftretenden nicht-kovalenten Wechselwirkungen und deren Visualisierung und Quantifizierung zu finden. Dieses Praktikum lieferte viele Informationen über die oben erwähnte Struktur. Bald beschlossen mein Betreuer und ich, einen Artikel für die Sonderausgabe mit der Struktur und den gewonnenen Informationen zu schreiben. Der Schreibprozess war relativ langwierig, da es die erste Arbeit war, die ich alleine geschrieben habe. Aber in dieser Zeit habe ich viel darüber gelernt, wie man schöne Abbildungen erstellt, wie man interessante Einleitungen schreibt und wie man die Ergebnisse auswertet.

Nachdem ich den Entwurf der Arbeit eingereicht hatte, fand die interne Begutachtung durch die Jungen Kristallographen statt. Die Gutachter hatten nur positive Kommentare zu meinem Artikel und viele gute Vorschläge, wie man die Qualität des Artikels verbessern kann und vor allem, wie man mehr Kristalldaten zur Verfügung stellen kann, was den Artikel für die Einreichung in der „Zeitschrift für Kristallographie“ besser geeignet macht. Außerdem erhielten wir positive Kommentare von den Gutachtern der Zeitschrift und mussten nur geringfügige Überarbeitungen vornehmen. Alles in allem war es eine schöne Erfahrung, und ich bin wirklich glücklich, nicht nur meinen ersten Artikel als Erstautor, sondern auch meinen ersten Artikel als Korrespondenzautor veröffentlicht zu haben.

Die Sicht eines internen Gutachters

anonym, so wie es ein Gutachter sein sollte

Dies ist ein sehr inspirierendes Projekt. Als Melanie mich kontaktierte und mich bat, dieses Projekt mit der Begutachtung einer Arbeit zu unterstützen, war ich hocherfreut über die Gelegenheit, eine Gruppe junger Kristallographen zu unterstützen. Für mich persönlich war es das erste Mal, dass ich eine Arbeit begutachtet habe, und es war eine neue und natürlich sehr inspirierende Erfahrung. Ich habe mich auch mit meinen damaligen Betreuern beraten und sie nach den Erfahrungen und spezifischen akademischen Details des Begutachtungsprozesses gefragt. Sie haben mich sehr ermutigt und beraten. Ich denke, dass diese Gelegenheit für junge Forscher sehr wertvoll ist. Zum einen können die jungen Forscher ihre Fähigkeiten zum kritischen Denken trainieren, und zum anderen können sie durch den Rollentausch die Perspektiven und Denkweisen der Gutachter verstehen, was für die spätere Versuchsplanung, die Positionierung der Einreichung und den Schreibstil von Vorteil ist. Ich unterstütze dieses Programm sehr und hoffe, dass Programme wie dieses langfristig fortgesetzt werden, um die jüngere Generation von Wissenschaftlern zu ermutigen und ihnen zu helfen, sich besser an die Arbeit in der akademischen Gemeinschaft anzupassen.

STOE since 1887 Anton Paar Jena Bioscience Building Blocks of Life

Die Sicht eines Editors

von Ulli Englert, Aachen

Als 2013 in Freiberg die deutsche Interessengemeinschaft der Jungen Kristallographen gegründet wurde, war ich sehr froh dabei zu sein: Zum einen waren junge Wissenschaftler meiner Heimatuniversität RWTH Aachen von Anfang an aktiv dabei, zum anderen wurde ich eingeladen, als *Senior Advisor* und Mentor zu helfen.

Lassen Sie mich kurz von meinen Erfahrungen mit dem jüngsten JK-Vorhaben berichten, dem Sonderheft in ZKrist, das ausschließlich auf Beiträgen junger Kristallographen basiert. Als Co-Editor musste ich jedes Manuskript mehr als einmal lesen. Im ersten Durchgang bestand die Hauptaufgabe darin, geeignete Gutachter zu finden. Bei der zweiten Lektüre wurden die Berichte der Gutachter dem eingereichten Artikel gegenübergestellt, um die Rückmeldung an die Autoren vorzubereiten, die sich hauptsächlich auf die Meinung der Gutachter stützte, aber gegebenenfalls auch meine Kommentare enthielt. Die überarbeitete Version des Manuskripts, zusammen mit einer Liste von Änderungen oder Widerlegungen, schloss den Prozess ab – alle ursprünglich eingereichten Arbeiten konnten schließlich angenommen werden.

Wie lassen sich meine Erfahrungen mit der JK-Sonderausgabe mit herkömmlichen redaktionellen Aufgaben vergleichen, an denen Autoren aller physikalischen und wissenschaftlichen Altersgruppen beteiligt sind? Lassen Sie mich hier zwei Punkte anführen: a) Der wissenschaftliche Teil, der von den jungen Autoren eingereicht wurde, war fast fehlerfrei. b) Hilfe von den Gutachtern und gelegentlich von meiner Seite war vor allem in Bezug auf die Kommunikation erforderlich. Der zweite Aspekt war keine wirkliche Überraschung: Effiziente Wege, Ergebnisse in einen breiteren Kontext zu stellen und Vorteile

und Grenzen des zu veröffentlichenden Ansatzes zu erläutern, werden weitgehend durch Erfahrung gewonnen. Der erste Punkt – hohe Qualität durch ausschließlich junge Wissenschaftler – fiel dagegen positiver aus als erwartet. Beide Aspekte zeigen mir – wieder einmal (!) – dass Studierende bereits in einer frühen Phase ihrer akademischen Laufbahn, idealerweise auf Bachelor-Ebene, in den Publikationsprozess eingebunden werden sollten. (Das „wieder“ im vorangehenden Satz hat einen persönlichen Hintergrund und ist eine Hommage an zwei meiner akademischen Lehrer, die sich dieser Tatsache schon vor Jahrzehnten bewusst waren.) Der Beitrag zu einem von Fachkollegen begutachteten Artikel kann in vielerlei Hinsicht lohnend sein, abgesehen von den offensichtlichen Aspekten des Prestiges und der Sichtbarkeit. Eine Veröffentlichung ist meist ein Gemeinschaftsprojekt, das die Verantwortung stärken und das Gefühl für Qualität fördern kann; kompetentes Feedback eines Gutachters kann den Horizont der Autoren erweitern; und schließlich fordert eine Leserschaft außerhalb des eigenen Instituts oder der eigenen Gruppe jene Kommunikationsfähigkeiten heraus, die man nur durch Training erwerben kann.

Lassen Sie mich meine persönliche Erklärung mit einer einfachen Analogie abschließen: Wir bilden Masterstudenten und Doktoranden in Sommerschulen aus, oft im Rhythmus von zwei oder drei Jahren. Wie wäre es mit regelmäßigen Sonderheften für junge Kristallographen in ähnlichen Abständen?

ELDICO SCIENTIFIC
THE ELECTRON DIFFRACTION COMPANY

What if crystal size **WAS NOT AN ISSUE ANYMORE?**

SHAPING THE FUTURE OF CRYSTALLOGRAPHY

A cutting-edge instrument for the analysis of solid compounds. Characterising hitherto unmeasurable nano-crystalline samples.

Produce accurate atom structures from your nano-sized samples in minutes. Easy with ELDICO's electron diffractometer, a smart combination of a 5-axis, 140° rotation, nanometer-precise goniometer and an electron beam. With a customer-centric portfolio, including leasing and individual measurements on demand.

Invented by crystallographers, for crystallographers.

- **As easy-to-use as single-crystal X-ray diffraction**
- **Straightforward to install – no special requirements**
- **Sample size from 10 to 1000 nm**
- **Radically simplified EM design**
- **Improved goniometer**
- **R_1 below 10 %**

AVAILABLE NOW!

ELDICO Scientific AG, PSI West, 5234 Villigen, Switzerland | www.eldico-scientific.com | info@eldico.ch | +49 173 7000 615

Kristallographie im Alltag – Wie kommt Schokolade zu ihrem unverwechselbaren Geschmack?

Schokolade ist nicht gleich Schokolade. Es gibt sie in unzähligen Sorten von einer Vielzahl von Herstellern. Die Hauptbestandteile, wie Kakaomasse und Kakaobutter, Zucker, Milchprodukte, Gewürze und weitere Fette, sind dabei bis auf Unterschiede in der Zusammensetzung allerdings gleich. Dass, was den typischen aber auch sortenspezifischen Charakter ausmacht, sind jedoch die Kristalle!

Bei der Schokoladenherstellung, dem sogenannten „Conchieren“, wird die Schokoladenmasse, ähnlich wie bei der Kristallzüchtung, über mehrere Stunden unter Temperatureinfluss gerührt. Dies reduziert die Feuchtigkeit, erschließt die Aromen und sorgt insbesondere dafür, dass die Kakaobutter in der richtigen kristallinen Modifikation auskristallisiert [1–4]. Dadurch entwickelt Schokolade ihren Glanz, ihr charakteristisches Knacken, ihr gleichmäßiges Aufschmelzen und angenehm kühlendes Gefühl im Mund sowie ihr beliebtes und erwünschtes Aroma.

Schokolade ist sehr empfindlich gegenüber Zutatenvariationen, Herstellungsbedingungen und besonders Temperaturschwankungen [3]. So ist die in ihr enthaltene Kakaobutter bei ca. 5 °C fest und beginnt sich danach mit steigender Temperatur strukturell und morphologisch zu verändern, wobei sie oberhalb von ca. 36 °C komplett flüssig vorliegt. Bei Raumtemperatur ist etwa ein Viertel der Kakaobutter in Schokolade bereits in einem flüssigen Zustand, wobei der andere Teil in einer festen Phase vorliegt. Diese feste Phase wiederum kann amorph sein oder aus mehreren unterschiedlichen Modifikationen der Kakaobutter bestehen, den sogenannten Polymorphen. Die Kakaobutter kann in insgesamt sechs verschiedenen Polymorphen vorliegen, die alle eine unterschiedliche Schmelztemperatur besitzen. Das Polymorph V ist das für Schokolade am besten geeignete, da es bei Raumtemperatur stabil ist und für optimale Konsistenz, Haptik und Aussehen der Schokolade sorgt, bei Körpertemperatur im Mund dann aber aufschmilzt und sich die Aromen entfalten. Mit Röntgenbeugungsmethoden (siehe Abb. 1) können die einzelnen Polymorphe unterschieden und damit auch die Qualität der Schokolade quantifiziert [2–5] werden.

Röntgenbeugungsuntersuchungen können dabei helfen den Herstellungsprozess zu optimieren oder beispielsweise Lösungen für die Fettreifentstehung für die Lebensmittelindustrie zu finden [1]. Insbesondere können die sich während der Herstellung der Schokolade einstellenden kristallinen Phasen der Kakaobutter aufgeklärt und der Kristallisationsprozess wissenschaftlich untersucht werden (siehe Abb. 2). Denn am Ende zählt Aussehen, Haptik und Geschmacks-erlebnis der Schokolade, die alle durch die Mikrostruktur maßgeblich beeinflusst werden.

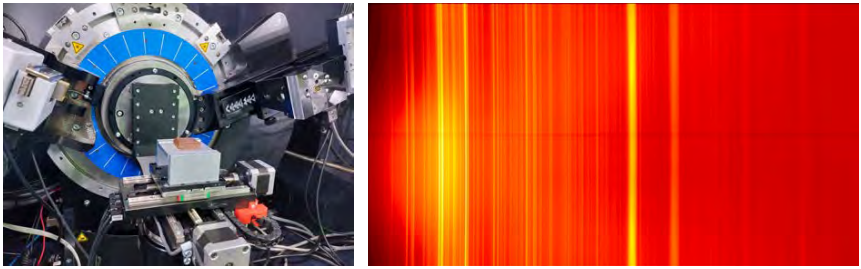


Abbildung 1: Mit Röngenbeugung können die kristallinen Bestandteile untersucht werden. Dafür wurde u. a. ein Stück dunkler Schokolade mit einem Pulverdiffraktometer Bruker AXS Discover (Cu-Kα-Strahlung) mit Flächendetektor Dectris Eiger 2 untersucht (links). Das resultierende Beugungsbild auf dem Detektor (rechts) zeigt einen Ausschnitt der Debye-Scherrer-Ringe über 2θ, die neben den intensitätsstarken Reflexen der enthaltenen Saccharose die schwächeren Reflexe der unterschiedlichen Polymorphe der Kakaobutter nachweisen.

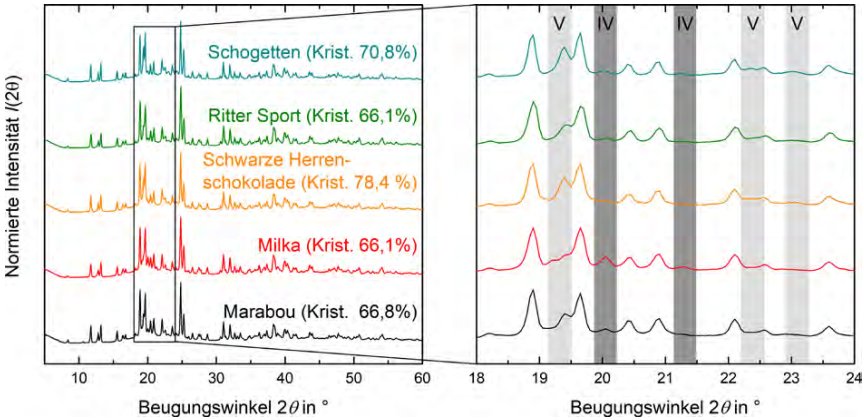


Abbildung 2: Die Röntgenpulverdiffraktogramme verschiedener Schokoladensorten zeigen die Lagen der Reflexe der Polymorphe IV und V der Kakaobutter. Die Kristallinität der jeweiligen Schokoladensorte ist in Klammern angegeben. Es ist erkennbar, dass die Reflexe der Saccharose für alle Sorten gleich sind (links), man jedoch beim genaueren Hinsehen (rechts) Unterschiede im Anteil der Polymorphe IV und V sowie in deren Kristallinität feststellt.

Leider können sich die Anteile der Polymorphe mit der Zusammensetzung der Schokolade, z. B. dem Vorhandensein von Kristallisationskeimen, der thermischen Vorgeschichte und der Umgebungstemperatur verändern. Damit ändern sich dann auch Aussehen und physikalische Eigenschaften der Schokolade. Und so können auch weiße Verfärbungen an der Oberfläche auftreten, eines der wichtigsten Qualitätsmängel in der Lebensmittelindustrie, der sogenannte Fettreif. Dieser Fettreif ist zwar unansehnlich, aber harmlos. Ursache hierfür ist die Mikrostruktur der Schokolade und die besonderen Eigenschaften der Kakaobutter. Er wird durch die flüssigen Anteile der Kakaobutter verursacht, die durch Poren im Nanometerbereich und Risse in der Schokolade an die Oberfläche wandern und dort im noch stabileren Polymorph VI auskristallisieren [2, 3]. Dies führt gleichzeitig zu einer teilweisen Auflösung der kristallinen Kakaobutter im Inneren der Schokolade und damit zu einer Erweichung. Unterdrückt werden kann dies durch eine geeignete, zeitintensive thermische Behandlung, geringere Porosität der Schokolade, Lagerungstemperaturen um die 18 °C oder spezielle Zusätze, die eine Erhöhung der Kristallinität der Kakaobutter ermöglichen und so der Verflüssigung der Kakaobutter und Erweichung der Schokolade entgegenwirken. Damit ist klar: Der weiße Belag kann nicht nur als ein Zeichen von alter Schokolade gedeutet werden, sondern auch als ein Zeichen einer zu schnellen Abkühlung bei der Herstellung (siehe Abb. 3), einer fehlenden thermischen Behandlung oder einer zu hohen Lagertemperatur. Schokolade ist durch kurzzeitige Erwärmung nicht verdorben, jedoch sind ihre Eigenschaften verändert.

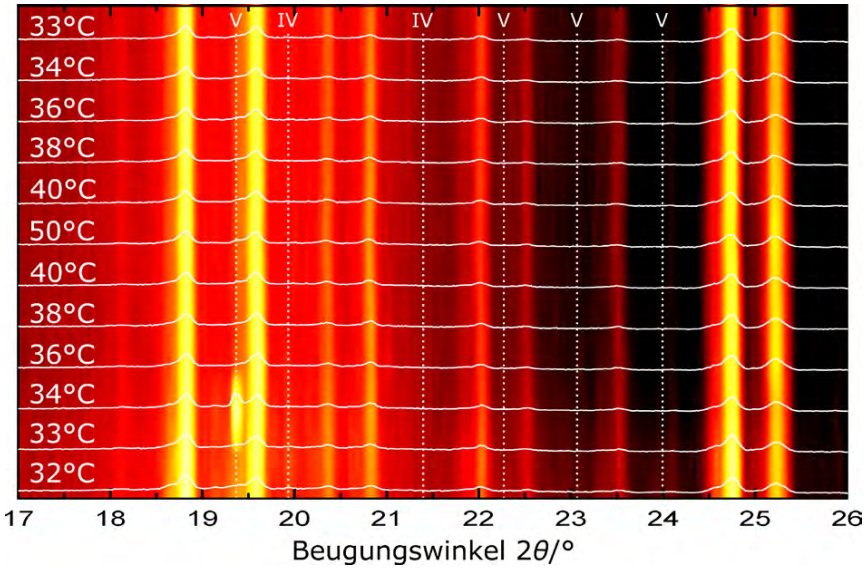


Abbildung 3: In-situ-Röntgenpulverdiffraktometrie an einem Bruker AXS Discover (Cu-Kα) mit Hochtemperaturkammer Anton Paar DHS 1100 während der Erwärmung und Abkühlung von dunkler Schokolade. Demnach führt Aufwärmen und schnelles Abkühlen (im Bild von unten nach oben) dazu, dass die Polymorphe IV und V der Kakaobutter nicht mehr auskristallisieren und so nur noch die Reflexe der Saccharose sichtbar sind.

Schokolade ist aber nicht nur für ihren guten Geschmack bekannt, sondern auch für die Verbesserung der kognitiven Leistungen. Beispielsweise fand Messerli [6] einen linearen Zusammenhang zwischen dem Schokoladenkonsum in einem Land und der Gesamtzahl der NobelpreisträgerInnen pro Einwohner. Demnach war die Schweiz sowohl bei der Zahl der Nobelpreistragenden als auch beim Schokoladenkonsum Spitzenreiter. Ein Zufall?! Es braucht etwa 0,4 kg Schokolade pro Einwohner und Jahr, um die Zahl der Nobelpreistragenden in einem Land um 1 zu erhöhen. Die minimal wirksame Schokoladendosis scheint bei 2 kg pro Jahr und Einwohner zu liegen. Es handelt sich hier allerdings nur um eine Korrelation; weitere Einflussfaktoren müssen sicherlich in Betracht gezogen werden. Aber gibt es denn eine bessere Motivation für das Genießen von Schokolade als damit die Qualität der eigenen wissenschaftlichen Arbeiten zu erhöhen und vielleicht sogar einmal einen Nobelpreis zu gewinnen? Mit diesem Gedanken im Hinterkopf hat man zukünftig sicherlich kein schlechtes Gewissen mehr, wenn die Tafel Schokolade auf dem Schreibtisch plötzlich mal wieder im Ganzen verschwunden ist!

Dieser Artikel wurde für den *World Chocolate Day* am 7. Juli 2022 angefertigt.

Tilmann Leisegang und Tina Weigel, Freiberg

LITERATUR

[1] K. Smith: Chocolate tempering, originally presented at the Confectionery Manufacturing Expo, Brüssel, Belgien, Juni 2006.

[2] S. K. Reinke, S. V. Roth, G. Santoro, J. Vieira, S. Heinrich, S. Palzer: ACS Applied Materials and Interfaces 7 (2015) 9929.

[3] B. J. D. le Reverend: Modelling of the phase change kinetics of cocoa butter in chocolate and application to confectionery manufacturing, Dissertation, University of Birmingham (2009).

[4] B. J. D. le Révérend, P. J. Fryer, S. Coles, S. Bakalis: Journal of the American Oil Chemists' Society 87 (2010) 239.

[5] S. E. Guthrie, G. Mazzanti, S. H. J. Idziak: European Journal of Lipid Science and Technology 107 (2005) 656.

[6] F. H. Messerli: New England Journal of Medicine 367 (2012) 1562.

SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

IμS DIAMOND II Microfocus X-ray Source

Legendary Reliability, Ultimate Stability,
Now Two Times the Intensity

- Faster data collection from smaller crystals
- Maintenance free — always there when you need it
- Ten times lower power consumption than rotating anodes
- Instantaneous wavelength switching in dual source systems
- Available for all D8 QUEST and D8 VENTURE diffractometers

For more information, visit bruker.com/sc-xrd

Innovation with Integrity

Die Arbeitskreise der DGK berichten

Bericht des AK 7 „Neutronenstreuung“

Anlässlich der diesjährigen Jahresversammlung der DGK in München hat der Arbeitskreis 7 „Neutronenstreuung“ einen *Satellite Workshop* vom 17. bis 18. März 2022 angeboten.

Aufgrund der Covid-19-Lage zum Zeitpunkt der Veranstaltung konnte diese – wie auch die Konferenz selbst – lediglich in einem Online-Format angeboten werden. Die ursprünglich geplanten Führungen durch die Forschungsneutronenquelle FRM II in Garching bei München mussten entfallen. Dennoch nahmen mehr als 20 Personen an dem Workshop teil, denen die engagiert Vortragenden spannende Vorträge zu den verschiedenen Anwendungen präsentierten. Mit „Basics of Neutron Scattering/Neutron Sources“ und „Nuclear Diffraction“ (A. Senyshyn, TUM und M. Meven, RWTH), „Magnetic Diffraction“ (M. Braden, Universität zu Köln), „Inelastic Scattering (Phonons & Magnons)“ (A. Schneidewind, JCNS), „Materials Science – Strain and Texture“ (M. Hofmann, TUM), „Small Angle Scattering with Neutrons“ (S. Mühlbauer, TUM), „Neutron Imaging“ (M. Schulz, TUM) sowie „Neutrons for Biology“ (T. Schrader, JCNS) wurden zahlreiche aktuelle Forschungsthemen mit kristallographischem Bezug und darüber hinaus bedient und lebhafte Diskussionen zwischen den Teilnehmern und Beitragenden angestoßen.

Der Arbeitskreis bedankt sich bei den Teilnehmern für ihr großes Interesse und bei den oben genannten Kollegen und ihren Einrichtungen für ihre Unterstützung.

Martin Meven, Aachen

Bericht des AK19

Von Atomen zu Netzen: Zur Systematisierung von kristallographischen Strukturdaten

Unter dem obigen Titel fand am 8. September 2022 ein *Ad-hoc*-Kolloquium an der TU Dresden, am Lehrstuhl für Anorganische Chemie II und unter Kooperation mit dem Institut für Experimentelle Physik der TU Bergakademie Freiberg im Rahmen des Arbeitskreises 19 der DGK statt.

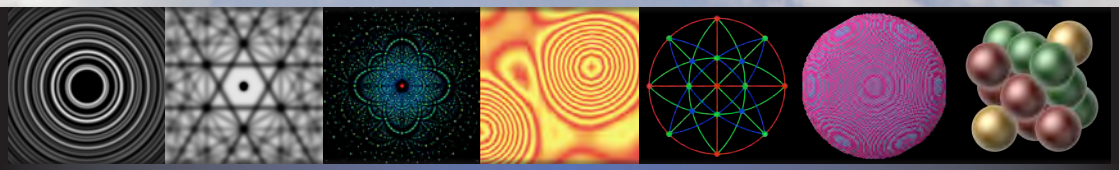
Für viele Forschungsbereiche bilden Sammlungen und Datenbanken eine wesentliche Grundlage für die tägliche Arbeit und sind zugleich die Basis für wissenschaftlichen Fortschritt und Innovationen. Diese entstehen oft durch den Rückgriff auf bestehende Sammlungen und Objekte, die durch neue methodische Zugänge überarbeitet und interpretiert werden können. Wissenschaftliche Sammlungen und Datenbanken sind als unverzichtbare Forschungsinfrastrukturen zu betrachten – ihre Erhaltung, Pflege und Nutzbarkeit als Basis für die Forschung ist eine Kernaufgabe der sie tragenden Institutionen. Das *Ad-hoc*-Kolloquium stellte nun die *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD) als unverzichtbare Grundlage für die Forschung mit und an kristallinen anorganischen Verbindungen und Materialien in den Fokus.

In Vertretung von Thomas Doert eröffnete Michael Ruck (TU Dresden) gemeinsam mit Tilmann Leisegang (TU Bergakademie Freiberg) das Kolloquium. Der erste Vortrag mit dem Titel „From atoms to nets: On the systematization of crystallographic structure data“ wurde von Professor Davide M. Proserpio (Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Mailand, Italien) gehalten. Davide Proserpio ist ein weltweit anerkannter Forscher für die Topologie von Kristallstrukturen, insbesondere von metallorganischen Architekturen. Mehr als 1000 kristalline Strukturen und ihre physikalisch-chemischen Eigenschaften wurden von ihm untersucht. Viele seiner bahnbrechenden Artikel gehören zu den meistzitierten Artikeln in den einschlägigen Fachzeitschriften. Mehrere Jahre lang arbeitete er mit Chemie-Nobelpreisträger Roald Hoffmann zusammen. In seinem kurzweiligen und sehr anschaulichen Vortrag stellte Davide Proserpio den Netzformalismus, einen weiteren Zugang zur Systematisierung und Erfassung von Kristallstrukturen mit eindrücklichen Beispielen und Anwendungsmöglichkeiten vor. Der Netzformalismus zur Kategorisierung von Kristallstrukturen soll zukünftig in einer neuen Version der ICSD nutzbar werden.

Der geplante zweite Vortrag mit dem Titel „Einführung in die ICSD und neue Entwicklungen“ von Dr. Stephan Rühl (FIZ Karlsruhe, Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur GmbH, Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland) musste leider aus Krankheitsgründen kurzfristig abgesagt werden. Dafür wurde die Zeit für intensive wissenschaftliche Diskussionen der mehr als 50 Zuhörenden vor Ort und weiteren 10 Teilnehmenden im Livestream genutzt.

Thomas Doert, Dresden und Tilmann Leisegang, Freiberg

CrystalMaker®



S O F T W A R E

Innovation *in* Teaching *&* Research

Native on Apple Silicon and Intel

CrystalMaker Software
28 Years of Innovation

Mac

Windows11 Compatible

Free Demo Software
Video Tutorials

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTALMAKER.COM

Symmetrie-Workshop 2022 in Dresden

Vom 29. August bis 1. September 2022 fand am Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe (MPI-CPfS) in Dresden ein viertägiges Intensiv-Seminar zu „Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie“ statt. Der Einladung von PD Dr. Ulrich Schwarz (Forschungsbereich Chemische Metallkunde am MPI CPfS) und Prof. Dr. Thomas Doert (Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie der TU Dresden) waren 45 ausgewählte Nachwuchswissenschaftlerinnen und Nachwuchswissenschaftler aus ganz Deutschland gefolgt.

In den sieben mehrstündigen Vorträgen (entsprechend 20 Vorlesungsstunden) wurden Grundlagen, Anwendungen und Beispiele vorgestellt, wie man mit Hilfe gruppentheoretischer Werkzeuge komplexe kristallographische Herausforderungen lösen und die Beschreibung von Kristallstrukturen systematisieren kann. Zur Einübung und Vertiefung des erlernten Stoffs wurden ausgewählte Übungsaufgaben zu allen Vorlesungsthemen in mehrstündiger gemeinschaftlicher Arbeit unter Anleitung der Referenten bearbeitet. Als Vortragende konnten renommierte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler gewonnen werden, die durch ihre didaktisch klug aufgebauten Beiträge und ihr großes Engagement bei den Übungen wesentlich zum Erfolg der Veranstaltung beigetragen haben.

Mit der Einführung in kristallographische Grundlagen und in die Symmetrieinformationen in den *International Tables for Crystallography* (Thomas Doert) sowie zu Matrixoperationen und kristallographischen Transformationen (Prof. Dr. Michael Ruck, Dresden) wurden am ersten Tag die Grundlagen für die vertieften Lehrinhalte im weiteren Verlauf des Workshops geschaffen. Am zweiten Tag wurden detailliert Untergruppen von Raumgruppen und Symmetrieverwandtschaften vorgestellt (Prof. Dr. Caroline Röhr, Freiburg) und anhand von Beispielen intermetallischer Verbindungen (Dr. Theresa Block, Münster) vertieft. Der dritte Tag brachte mit kristallographischen Verzwillingungen (Prof. Dr. Oliver Oeckler, Leipzig) und strukturellen Phasentransformationen (Prof. Dr. Holger Kohlmann, Leipzig) weitere praxisnahe Beispiele und Anwendungen. Abschließend wurde die große Breite kristallographischer und strukturchemischer Werkzeuge des *Bilbao Crystallographic Server* (Dr. Gemma de la Flor Martin, Karlsruhe) kompetent und anschaulich vorgestellt.

Der hohen Informationsdichte und den anspruchsvollen Übungsaufgaben begegneten die Teilnehmerinnen und Teilnehmer durchweg mit hoher Motivation und Konzentration, die sich während der vier Tage auch in vielen lebhaften Diskussionen innerhalb und außerhalb des Seminarraums widerspiegelten. Teilnehmer und Dozenten verließen den Veranstaltungsort bereichert durch vielfältige neue Erkenntnisse, Eindrücke und persönliche Kontakte und beeindruckt vom Erfolg des Seminars.

Dank der großzügigen finanziellen Unterstützung durch die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie und die Gesellschaft Deutscher Chemiker war der Workshop für die Teilnehmer kostenfrei. Wir bedanken uns auch herzlich bei Prof. Juri Grin für die Einladung und Mitarbeitern des MPI CPfS für die Bereitstellung der Infrastruktur sowie die stets freundliche, kompetente und unkomplizierte Unterstützung im Vorfeld und während der Veranstaltung!

Ulrich Schwarz und Thomas Doert, Dresden

SDCOM

Smart Diffractometer for Crystal Orientation Measurements

a desktop XRD device for material research, production and quality control of single crystals (Ingots & Wafers)

Si | SiC | Diamond | AlN | GaAs | Quartz | $LiNbO_3$ | BBO | GaN and 100s more

Features of SDCOM

Compact design
manual handling of very small crystals down to ~1 mm diameter

Customized for industrial crystals
fully automated analysis and orientation determination of more than 100 different materials

Typical standard deviation tilt
(example: Si 100): **< 0.0025°, minimum < 0.003°**

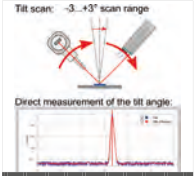
Ultra-fast measurements
all desired crystal orientation parameters are captured in one sample rotation i.e. **within 5 seconds**

Repeatability > 99.5%

Theta-scan capability
for sophisticated research and material characterization

Transfer technology
up to 10 orientated crystals on one slicing beam

XRDStudio – operating and evaluation software

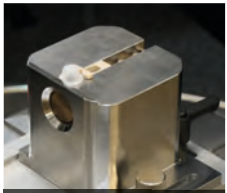


Theta-scan

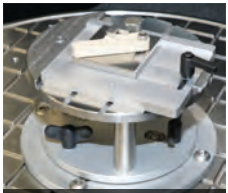
Mapping

Multiple ingot stacking unit

Mapping stage



Horizontal holder for small samples



Vertical holder for small samples

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

Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ wächst seit der Gründung 2013 von Jahr zu Jahr und zählt aktuell 254 Mitglieder aus verschiedenen Ländern Europas und der Welt, wobei die meisten aus Deutschland kommen. Neben dem Austausch in Präsenz, wie auf der DGK-Jahrestagung oder auf den Internationalen Kristallographie-Tagungen wie der IUCr-Konferenz in Prag 2021 haben wir auch im Herbst 2021 eine eigene Veranstaltung in Darmstadt bei der Firma STOE & Cie abgehalten. Neben Industrie-Vorträgen von Anton Paar und STOE selbst gab es auch drei akademische Vorträge vom Vorsitzenden der DGK Prof. Dr. Thomas Schleid, von Dr. Manfred Weiss, welcher Mitglied im IUCr-Exekutivkomitee ist, und von Dr. Matthias Zschornak. Die studentischen Teilnehmer:innen (sowohl Master- als auch Promotions-Studierende) hielten *Lightning Talks* über ihre aktuelle Forschung und vertieften den Austausch in der anschließenden *Poster Session*. Nach 2015 und 2017 war dies das dritte Treffen der jungen Kristallographen bei STOE. Nach dem erfolgreichen ersten gemeinsamen Treffen mit den jungen Kristallzüchtern der DGKK 2019 in Köln, planten wir auch für 2022 wieder ein gemeinsames Treffen, diesmal in Freiberg in Sachsen. Dieses fand vom 3. bis zum 5. Oktober mit mehr als 30 Personen statt.

Um unser Netzwerk noch weiter auszubauen, präsentieren sich die Jungen Kristallographen in verschiedenen Netzwerken im Internet (wie ResearchGate, LinkedIn und XING), aber auch in den sozialen Medien (Facebook und Twitter). Im August 2021 ist auch ein Instagram-Account dazu gekommen.

Die DGK-Homepage *http://dgk-home.de/aks/jkyc* des Arbeitskreises bietet eine perfekte Übersicht über vergangene und zukünftige Veranstaltungen, sowie Blog-Beiträge beispielsweise darüber, wie sich Forschung und Lehre während der Pandemie verändert haben. Auch über die Online-DGK-Tagung im März oder über die IUCr-Tagung im vergangenen Jahr in Prag haben Promovierende Blog-Beiträge geschrieben, die von Bildern unterstützt werden. Beiträge für den Blog über Kristallographie-bezogene Themen jeder Art sind herzlich willkommen und können an Melanie Nentwich gesendet werden.

Im letzten Jahr wurde der Lieselotte-Templeton-Preis ins Leben gerufen, so dass er erstmals in diesem Jahr während der DGK-Jahrestagung an die drei herausragendsten Abschlussarbeiten im Bereich der Kristallographie verliehen werden konnte. Die 11 eingegangen Vorschläge wurden eingehend bewertet, wobei sich Alexander Feige (Leipzig), Kristopher Nolte (Hamburg) und Noah Nachtigall (Aachen) gegen ihre Mitbewerber durchsetzen konnten. Neben den gewählten Mitgliedern des Preiskomitees haben auch die jungen Kristallographen eine Stimme zu vergeben.

In alter Tradition gab es auf der diesjährigen DGK-Tagung auch wieder eine *Lightning-Talk-Session*, in der ein fünfminütiger Vortrag auf das Poster der anschließenden *Poster Session* neugierig machen sollte. Wie in den Jahren zuvor, wurden die Preise für die beste Präsentation von STOE gesponsert. Diese gingen an Nield Lefeld (Bremen), Maria Annette Herz (Dresden) und Helena Butkiewicz (Warschau, Polen) und wurden während des *Get Together* verliehen. Während dieses virtuellen AK-Treffens wurden die vergangenen Aktivitäten des Arbeitskreises zusammengefasst sowie kommende Events und Aktivitäten angekündigt. Außerdem wurde die

bisherige Sprecherin Tina Weigel (TU Bergakademie Freiberg) von Constantin Buyer (Universität Stuttgart) abgelöst, der nun durch Jakob Möbs (Universität Marburg) unterstützt wird. Wie Jan Philipp Wöhrle (Vorstand bis März 2020) bleibt auch Tina Weigel vorerst den Jungen Kristallographen in der Organisation verschiedener Aktivitäten erhalten. Der *Social-Media*-Posten wurde von Doriana Vinci (European XFEL, Schenefeld/ Hamburg) neu besetzt. Darüber hinaus waren die Jungen Kristallographen zweimal die virtuellen Gastgeber der Gesellschaftsabende der Konferenz, die über die Plattform *Gather Town* stattfanden.

Ebenfalls in diesem Jahr ist eine Sonderausgabe mit dem Titel „Spotlight on Germany's Young Crystallographers" in der Zeitschrift für Kristallographie (Band 237, Heft 4–5) mit 13 Artikeln und einem Vorwort erschienen, in denen junge Kristallograph:innen die Erstautorschaft für ihre Ergebnisse übernahmen. Mit dieser Ausgabe wollten wir die Vielseitigkeit und Möglichkeiten der kristallographischen Forschung in Deutschland zeigen. Drei Artikel aus dieser Ausgabe wurden auch auf der diesjährigen DGK-Jahrestagung präsentiert.

Um die geknüpften Kontakte weiterhin pflegen zu können, hat sich der AK dazu entschlossen, ein regelmäßiges *Online-Pub-Meeting* auf der Plattform *Gather Town* für alle Arbeitskreismitglieder zu initieren, welches einmal im Monat stattfindet und bereits reges Interesse von bekannten wie auch neuen Gesichtern hervorgerufen hat.

Constantin Buyer (Stuttgart) und Jakob Möbs (Marburg)

LabMeeting der Jungen Kristallographen @ STOE vom 28. bis 30. September 2021

PERSONALIA

JUBILARE 2022

Name	Ort	Alter
Prof. Dr. Karl-Friedrich Seifert	Bonn	95
Prof. Dr. Hans Burzlaff	Erlangen	90
Helmut Weidner	Berlin	90
Prof. Dr. Herbert Boller	Linz	85
Dr. Walter Gonschorek	Aachen	85
Prof. Dr. Helmut Klapper	Aachen	85
Prof. Dr. Peter W. Mirwald	Innsbruck	85
Prof. Dr. Robert R. Reeber	Chapel Hill	85
Prof. Dr. Hans Jörg Scheel	Goldswil b. Interlaken	85
Dr. Herbert Thurn	Stuttgart	85
Prof. Dr. Georg Amthauer	Salzburg	80
Prof. Dr. Alfonso Castineiras	Santiago de Compostella	80
Prof. Dr. Panayiotis C. Christidis	Thessaloniki	80
Prof. Dr. Heinz-Dieter Fenske	Karlsruhe	80
Prof. Dr. Dieter Freude	Leipzig	80
Prof. Dr. Friedrich Frey	München	80
Prof. Dr. Hans-Reiner Höche	Halle	80
Prof. Dr. Rolf Köhler	Berlin	80
Prof. Dr. Jürgen Kopf	Hamburg	80
Prof. Dr. Albrecht Mewis	Düsseldorf	80
Prof. Dr. Werner Press	Kiel	80
Dr. Julius Schneider	München	80
Prof. George M. Sheldrick	Göttingen	80
Ingrid Svoboda	Darmstadt	80
Dr. Christoph Teske	Kiel	80
Herbert Wawra	Berlin	80
Dr. Rolf Arnold	Erlangen	75
Dr. habil. Jürgen Härtwig	Jena	75
Dr. Wolfgang Johannes Hönle	Ettlingen	75
Dr. Wolfgang Jauch	Berlin	75
Prof. Dr. Bogdan Palosz	Warschau	75

Dr. Mois Aroyo	Bilbao	70
Prof. Dr. Ulrich Bismayer	Hamburg	70
Prof. Dr. Heinz-Günter Brokmeier	Geesthacht	70
Dr. Ulrich Flörke	Paderborn	70
Prof. Dr. Hermann Gies	Bochum	70
Prof. Dr. Wolfgang Hofmeister	Dannenfels	70
Dr. Berthold Kastner	Göttingen	70
Prof. Dr. Werner F. Kuhs	Göttingen	70
Prof. Dr. Ullrich Pietsch	Siegen	70
Dr. Klaus Piontek	Freiburg	70
Steffen Sachsenröder	Thale	70
Dr. Jutta Töpel-Schadt	Erftstadt	70
Dr. Bernd Breidenstein	Garbsen	65
Prof. Dr. Arne Cröll	Huntsville	65
Prof. Dr. Kay Diederichs	Konstanz	65
Prof. Dr. Ullrich Englert	Aachen	65
Dr. Lothar Fink	Frankfurt	65
Prof. Dr. Walter Frank	Düsseldorf	65
Dr. Michael Hagelstein	Karlsruhe	65
Utz Heinemann	Diemelstadt	65
Dr. Eric Robert Hovestreydt	Karlsruhe	65
Dr. Klaus-Jürgen Hünger	Cottbus	65
Andreas Janke	Dresden	65
Dr. Paul Bernd Kempa	Pfinztal	65
Dr. habil. Detlef Klimm	Berlin	65
Dr. Andrea Lenz	Berlin	65
Dr. Peter Möck	Portland	65
Prof. Dr. Werner Paulus	Rennes	65
Dr. Manfred Reehuis	Berlin	65
Prof. Dr. Thomas Schleid	Stuttgart	65
Dr. Peter Schmid-Beurmann	Münster	65
Prof. Dr. Wolfgang Schnick	München	65
Dr. habil. J. Christian Schön	Stuttgart	65
Prof. Dr. Henry Strasdeit	Stuttgart	65
Dr. Gerd Teichert	Gräfinau-Angstedt	65
Dr. Hans Torsten Weichert	Ratingen	65
Dr. Nikolay Zotov	Bochum	65

Verstorbene Mitglieder

Prof. Dr. Jürgen Felsche
Fakultät für Chemie der Universität Konstanz
† 22. Januar 2021

Prof. Dr. Hermann Irngartinger
Organisch-Chemisches Institut der Universität Heidelberg
† 8. Juni 2021

Dr. Kyozaburo Kambe
Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin
† 30. September 2021

Dr. Martin Gomm
Institut für Angewandte Physik der Universität Erlangen
† 5. Oktober 2021

Prof. Dr. Horst Saalfeld
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Hamburg
† 31. März 2022

Prof. Dr. Herbert Pöllmann
Institut für Geowissenschaften und Geographie der Universität Halle
† 5. Mai 2022

Max-von-Laue-Preis 2022 an Andrea Thorn

in Anerkennung ihrer Arbeiten zur verbesserten Analyse von Diffraktionsdaten makromolekularer Kristalle und der Erkennung von Strukturelementen biologischer Makromoleküle in Elektronen-Cryo-Mikroskopie-Karten mittels neuronaler Netzwerke

Liebe Andrea,

zuallererst meinen herzlichsten Glückwunsch zum Max-von-Laue-Preis 2022. Ich bin sehr froh, dass das Preiskomitee Dich als Preisträgerin ausgewählt hat, und es ist mir eine besondere Ehre, heute die Laudatio für Dich halten zu dürfen.

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

einigen von Ihnen wird der Name unserer Preisträgerin bereits ein Begriff sein. Zumal wenn sie Fernsehzuschauer sind und regelmäßig Sendungen wie Terra-X, Nano, ZDF Wiso oder Planet e verfolgen. Frau Thorn hatte Auftritte in all diesen Sendungen, um über ihre Arbeit in der *Coronavirus Structural Task Force* zu berichten. Dieses von Frau Thorn vor zwei Jahren gegründete und koordinierte Netzwerk von mittlerweile 26 meist jüngeren Wissenschaftlern aus verschiedenen Ländern hat es sich zum Ziel gesetzt, die öffentlich zugänglichen strukturellen Daten zu SARS-CoV-2 kritisch zu beleuchten, und die jeweiligen Strukturen zu optimieren. Letztendlich um bessere Voraussetzungen für die Medikamentenentwicklung basierend auf diesen Strukturen zu schaffen und damit einen Beitrag für den Kampf gegen Covid-19 zu leisten. Vielleicht erinnert sich auch der eine oder der andere in diesem Zusammenhang an die *Keynote Lecture* von Frau Thorn bei der IUCr-Tagung in Prag im letzten August.

Aber gehen wir erst einmal ein paar Schritte in die Vergangenheit zurück. Frau Thorn begann ihre Laufbahn mit dem Studium *Molecular Life Science* in Erlangen. Anschließend ging sie nach Göttingen, wo sie bei George Sheldrick (auch kein Unbekannter in der DGK, Preisträger der Carl-Hermann-Medaille 1999) promovierte. Ihr Thema dabei war: „Angewandte Methoden zur Röntgenstrukturbestimmung von Makromolekülen“. Also Methodenentwicklung im weitesten Sinn. Das ist auch der rote Faden, der hier beginnt und der sich durch ihr gesamtes weiteres wissenschaftliches Werk ziehen wird. Nach der Promotion ging sie nach England und zwar nach Cambridge, um dort erst mit Randy Read, und dann unabhängig mit Hilfe eines Marie-Curie-Stipendiums zu forschen. Wieder an kristallographischen Methoden und immer mit dem Ziel, bessere Daten zu bekommen, um bessere Strukturen generieren zu können. Über die *Diamond Light Source* und die *University of Oxford* ging es dann zurück nach Deutschland, wo sie 2019 Juniorgruppenleiterin an der Universität Würzburg wurde. Seit Oktober 2020 ist sie nun an der Universität Hamburg und am PETRA III Synchrotron tätig.

Wie bereits mehrfach angedeutet, Frau Thorn ist eine Methodenentwicklerin im Bereich makromolekulare Kristallographie und seit einiger Zeit schon auch im Bereich Cryo-Elektronenmikroskopie von biologischen Makromolekülen. Sie hat wesentliche Beiträge zu den weithin bekannten Programmen *SHELXE*, *SHELXL* und *Phaser* geleistet und sie hat die

Programme *ANODE*, *AUSPEX* und *HARUSPEX* geschrieben. Sie hat sich auch schon sehr früh mit dem Einsatz von künstlicher Intelligenz in der experimentellen Strukturbiologie beschäftigt. Sie sagt von sich selbst, dass sie eine Methodenentwicklerin ist, der auch die andere Seite nicht fremd ist, die auch mal ins Labor geht, die eine Klonierung durchführen kann, oder eine Inertgassynthese, oder die auch schon mal beim Polieren einer Anode mit Hand anlegt.

Frau Thorn unterrichtet auch leidenschaftlich gerne. Bereits während ihrer Doktorarbeit lehrte sie als Dozentin auf einem *CCP4 Workshop* in Osaka. Ich möchte an dieser Stelle auch nicht unerwähnt lassen, dass sie die bislang jüngste Dozentin auf einem der äußerst renommierten *Cold Spring Harbour Workshops* ist. Sie hat insgesamt an über 30 Workshops mitgewirkt und diverse Vorlesungen in Oxford, Würzburg und Hamburg gehalten.

Last but not least: Öffentlichkeitsarbeit. Durch ihre Arbeit in der *Coronavirus Structural Task Force* steht Frau Thorn in nicht unerheblichem Maße im Licht der breiten Öffentlichkeit. Die Fernsehauftritte hatte ich ja bereits eingangs erwähnt. Dazu kommen natürlich Interviews im Radio, in Zeitungen und in Magazinen. Viel passiert auch in den sozialen Medien, wo sie auch sehr aktiv ist. Die Webseite *www.insidecorona.net* ist vielleicht auch dem einen oder anderen ein Begriff. Falls nicht, kann ich sie an dieser Stelle nur jedem empfehlen, der sich über Coronaviren informieren möchte. Neben der wissenschaftlichen Arbeit in der *Task Force* werden auch Animationen, Illustrationen und Übersichtsartikel zur Konsolidierung des Wissens über die Strukturbiologie des Virus erarbeitet. Eine Sonderausgabe von *Crystallography Reviews* mit insgesamt 13 Artikeln der *Task Force* zu diesem Thema wird in Kürze erscheinen. Ein weiteres, besonders schönes Beispiel für etwas, das von der Arbeit in der *Task Force* kommt, ist das druckbare 3D-Modell des Coronavirus, anhand dessen man sehr schön Dinge erklären kann, die mit dem Lebenszyklus des Virus zusammenhängen. Wer Zugang zu einem 3D-Drucker hat, sollte sich das auf jeden Fall mal drucken.

Trotz ihrer noch jungen Jahre ist Frau Thorn aufgrund ihres hohen Engagements für Computing, für Frauen in der Wissenschaft und für den wissenschaftlichen Nachwuchs in diversen Gremien (BCA, ECA, IUCr, KfS) bereits heute nicht nur eine zentrale Figur in der kristallographischen Methodenentwicklung, sondern auch ein Vorbild für viele andere.

Zusammenfassend möchte ich sagen, dass ich Andrea Thorn für eine absolut würdige Preisträgerin des Max-von-Laue-Preises der DGK halte. Durch ihre vielfältigen Aktivitäten in der kristallographischen Methodenentwicklung sowie in der Strukturbiologie von SARS-CoV-2 hat sie nicht nur dazu beigetragen, die Kristallographie methodisch voranzubringen, sondern auch die Kristallographie in die Öffentlichkeit zu bringen. Ich finde, mehr kann man nicht erwarten.

Andrea, ich hoffe sehr, dass Du Dir als geprüfte Pilzberaterin keinen Fehlgriff erlaubst, so dass wir in den kommenden Jahren noch viel von Dir sehen, hören und lesen werden.

Ganz herzlichen Glückwunsch Andrea zum Max-von-Laue-Preis 2022!

Manfred S. Weiss, Berlin

Will-Kleber-Gedenkmünze 2022 an Holger Kohlmann

in Würdigung seiner Arbeiten zur *in situ* Neutronenbeugung in Saphireinkristall-Gasdruckzellen für das Studium von Feststoff-Gas-Reaktionen, insbesondere von keramischen und metallischen Hydriden und Deuteriden, welche vor dem Hintergrund der Aufnahme und Speicherung von Wasserstoff in Zeiten grüner Wasserstofftechnologien als Energiematerialien nicht hoch genug zu bewerten sind

Holger Kohlmann hat in seinen Forschungsarbeiten Strukturen, Bildungs- und Zersetzungspfade von verschiedensten Metallhydriden, von ionischen über interstitielle bis hin zu Zintl-Phasen-Hydriden oder auch Oxid-Hydriden untersucht und dabei sehr effektiv die Kombination verschiedener analytischer Methoden, insbesondere die *In-situ*-Neutronenbeugung, genutzt und letztere auch apparativ erheblich weiterentwickelt.

Er hat in der Arbeitsgruppe von Horst P. Beck an der Universität des Saarlandes promoviert. Nach zwei Postdoc-Aufenthalten bei Klaus Yvon (Genf) und bei Malcolm F. Nicol (Las Vegas) kehrte er nach Saarbrücken zurück und hat dort 2009 über „Wasserstoff als strukturdirigierendes Element in Metallhydriden“ habilitiert. 2012 folgte er einem Ruf auf eine Professur an der Universität Leipzig, wo er neben Forschung und Lehre auch die Aufgaben als Geschäftsführender Institutsdirektor (2015–2017) übernahm und seit 2016 im Fakultätsrat mitwirkt.

Bereits 1999 erhielt er den *Young Scientists Award of the European Neutron Scattering Association* und engagiert sich seit vielen Jahren u. a. durch seine unermüdliche Gutachtertätigkeit für die kristallographische Community und insbesondere die Neutronenbeugungsgemeinde. Zusammen mit Kollegen der Universität Leipzig organisierte er verschiedene Tagungen, wie das Hemdsärmelkolloquium 2018 oder die Jahrestagung der DGK 2019. Aktuell ist er Mitglied des Komitees Forschung mit Neutronen.

Bereits in seiner Postdoc-Zeit leistete er wichtige Beiträge in der Neutronen- und Hochdruckforschung. Obwohl der Absorptionsquerschnitt von Europium (natürliches Isotopengemisch) für thermische Neutronen größer als der des Abschirmmaterials Cadmium ist, gelang es unter Ausnutzung der Wellenlängenabhängigkeit des Absorptionsquerschnittes, erstmals ein Neutronenbeugungsexperiment an Europium-haltigen Hydriden erfolgreich durchzuführen [Angew. Chem. 38 (1999) 2029]. Des Weiteren konnte mittels Röntgenbeugungsexperimenten am Synchrotron in einer Diamantstempelzelle die Struktur von CO_2-II aufgeklärt werden, die interessanterweise mit einem pseudo-sechsfach koordinierten Kohlenstoffatom dem Stishovit-Typ entspricht. Die interatomaren Abstände weisen CO_2-II als Intermediat zwischen molekularen und nichtmolekularen Feststoffen aus [Phys. Rev. B 65 (2002) 104103].

Daran schlossen sich während seiner Habilitationszeit wichtige Beiträge im Bereich der *In-situ*-Neutronenbeugung an. Während in der Molekülchemie Reaktionswege oft bekannt sind, stellt deren Verständnis in der Festkörperchemie eine große Herausforderung dar, sodass Synthesen oft aufgrund von Erfahrung und iterativen Präparations- und Charakterisierungsschritten durchgeführt werden. Gerade metastabile Verbindungen können bei fehlender Kenntnis der Reaktionspfade leicht übersehen werden. Dies ist insbesondere bei Gas-Festkörper-Reaktionen

der Fall, die auch für viele industrielle Prozesse von großer Wichtigkeit sind. Bei deren Optimierung können fundierte Kenntnisse zu Reaktionspfaden von großer Hilfe sein, wie sie mit Hilfe von *In-situ*-Techniken gewonnen werden können. Auf diesem Gebiet leistete Herr Kohlmann mit methodischen Entwicklungen und zahlreichen Modellstudien einen enormen Beitrag. Vor allem beschäftigte er sich mit der Untersuchung von Hydrierungspfaden bei der Synthese von Hydriden, die als Wasserstoffspeicher diskutiert werden. Dabei ist das Verständnis von Hydrierung und Dehydrierung für die Anwendung und auch für das Design neuer, vielversprechender Verbindungen von größter Wichtigkeit. Für solche Untersuchungen von Gas-Festkörper-Reaktionen, speziell mit Wasserstoffgas, entwickelte Herr Kohlmann mit seiner Gruppe neuartige Gasdruckzellen aus Saphir-Einkristallen, welche bei passender Positionierung im Neutronenstrahl nur einen sehr niedrigen Untergrund liefern. Durch die Orientierung des Einkristalls in der Zelle wird die Lage der Einkristallreflexe festgelegt; diese werden dann mit Leermessungen der Zelle identifiziert. Für die eigentlichen Messungen können die Einkristallzellen dann so gewählt werden, dass der Untergrund für die interessanten Winkelbereiche minimal ist [Z. Anorg. Allg. Chem. 639 (2013) 285, Phys. B 551 (2018) 395]. Diese Verbesserung der Datenqualität im Vergleich zu anderen Druckzellen ist ein Durchbruch auf diesem Forschungsgebiet. Mit dieser Zelle wurden mit großem Erfolg verschiedene Systeme untersucht. So konnte beispielweise die mit einer strukturellen Reorganisation verbundene Hydrierung der Verbindungen MPd$_3$ (M = Mg, In, Tl, Bi) [J. Sol. State Chem. 183 (2010) 2461, Z. Anorg. Allg. Chem. 636 (2010) 1032, J. Alloys Compds. 731 (2018) 1001] oder verschiedener Laves-Phasen [Inorg. Chem. 57 (2018) 10925, Inorg. Chem. 56 (2017) 15006] aufgeklärt werden.

In Studien zur Hydrierung von Zintl-Phasen wurde zudem eine Vielzahl neuer Verbindungen entdeckt. Hierbei kann Wasserstoff sowohl als interstitielles Hydrid-Ion vorliegen als auch am Zintl-Anion angelagert werden. Dadurch können verschiedenen „Kondensationsgrade“ am Polyanion erreicht werden, was die Hydrierung zu einem spektakulären strukturdirigierenden Instrument macht und zu neuen Wasserstoff-Hauptgruppenelement-Struktureinheiten führt [Angew. Chem. 56 (2017) 12344, Inorg. Chem. 56 (2017) 1061, Inorg. Chem. 56 (2017) 1072]. Daneben leistete er ganz wesentliche Beiträge zur Erforschung von Oxid-Hydriden [Inorg. Chem. 58 (2019) 14635], einer Substanzklasse, von der bislang relativ wenige Vertreter bekannt sind, die aber gerade in letzter Zeit aufgrund verschiedenster interessanter Eigenschaften, wie Hydrid-Ionen-Leitfähigkeit, elektronischer oder magnetischer Eigenschaften stark in den Fokus gerückt ist. Auch für industrielle Prozesse, wie die Herstellung von Übergangsmetallen durch die Reduktion ihrer Oxide, spielt die Behandlung von Oxiden mit Wasserstoff eine große Rolle.

Neueste Arbeiten umfassen beispielsweise *In-situ*-Neutronenbeugung in einer Multianvil-Presse, bei der die Phasenumwandlung in Bariumhydrid mit beeindruckender Genauigkeit untersucht wurde, die Resultate werden durch DFT-Rechnungen und Raman-Spektroskopie gestützt, wodurch nahezu einzigartig konsistente Daten vorliegen [Solid State Commun. 318 (2020) 113965]. Diese Methodik ist für künftige Untersuchungen wegweisend.

Herrn Kohlmann gelang es immer wieder auf beeindruckende Art und Weise, Grundlagenforschung zu Kristallstrukturen und Reaktionsmechanismen mit aktuell wichtigen Fragestellungen zur Synthese und Verbesserung von Funktionsmaterialien, insbesondere auch sogenannten „Energiematerialien“, zu verbinden.

Zusätzlich zu seiner Forschungstätigkeit ist er bei den Studierenden als äußerst engagierter und geschätzter Hochschullehrer bekannt. Seine Vorlesungen zur Anorganik und Festkörperchemie erfreuen sich großer Beliebtheit. Immer wieder bietet er zudem Workshops oder Seminare, sowohl für interessierte Studierende innerhalb seiner Gruppe als auch im größeren Rahmen, wie beim Symmetrieworkshop 2019 in Dresden an. Letzterer soll auch 2022 wieder stattfinden. Auch bei seinen Doktoranden erfreut er sich aufgrund seiner immer hilfsbereiten Art und seines großen Wissens hoher Wertschätzung.

Oliver Oeckler, Leipzig

Carl-Hermann-Medaille 2022 an Wulf Depmeier

in Anerkennung seines wissenschaftlichen Lebenswerkes. Herr Prof. Depmeier hat das Gebiet der Kristallographie und Mineralogie sowohl durch seine wissenschaftlichen Beiträge als auch durch sein vielseitiges Engagement in Gremien, Hochschulpartnerschaften sowie als Vorsitzender der DGK in vorbildlicher Weise befördert. Hervorzuheben sind seine Arbeiten auf dem Gebiet der Aluminatsodalithe, Tetrachloro-Manganate, Halogenid-Schichtperowskite, interkalierten Vanadiumoxide und Zeolithe, sowie die Entwicklung der Kiel-Berlin-Hochdruckzelle.

Lieber Wulf Depmeier, meine Damen und Herrn,

Preise und Auszeichnungen sind ein öffentlicher Ausdruck von Anerkennung von Kolleginnen und Kollegen, von Weggefährten und Freunden für den Geehrten. Darin nimmt die Carl-Hermann-Medaille der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie sicherlich einen besonderen Platz ein. Unsere Wertschätzung für Wulf Depmeier gibt es nicht erst seit das Preiskomitee seine Entscheidung gefällt hat; sie existiert seit geraumer Zeit. Deswegen ist es mir eine ausgesprochene Freude, dir lieber Wulf zu dieser Auszeichnung zu gratulieren und ein wenig zu erläutern, warum sie ohne Zweifel gerechtfertigt ist. Ich spreche dabei nicht allein, sondern muss meine zwei Ghostwriter erwähnen: Karsten Knorr und Evgeny Alekseev, die wesentlich zu dieser Laudatio beigetragen haben.

Die Carl-Hermann-Medaille erinnert an einen der bedeutendsten Vertreter der Kristallographie in Europa. Uns allen sind die Hermann-Mauguin-Symbole für die 230 Raumgruppen vertraut. Carl Hermanns Wirken schließt theoretische und experimentelle Arbeiten gleichermaßen ein.

Carl Hermann stammte aus Bremerhaven, also nicht weit entfernt von Bremen, wo Wulf Depmeier zwischen 1951 und 1964 zur Schule ging. Vermutlich war sich Wulf als Schüler dieser Verbindung nicht bewusst. Jedoch begann danach eine, sagen wir mal, asymptotische Annäherung an das Werk Carl Hermanns.

Lebenslauf

Nach dem Abitur studierte Wulf Depmeier zunächst Mineralogie an der Uni Hamburg und wechselte nach dem Vordiplom an die ETH Zürich. Vielleicht war in Zürich nicht genug los (es war immerhin im Wintersemester 67/68), jedenfalls kehrte er bald wieder nach Hamburg zurück und schloss sein Hauptdiplom mit seiner Arbeit über siliciumfreie sodalithartige Phasen bei Horst Saalfeld ab.

Diese Arbeit legte also einen wichtigen Grundstein zu Wulfs wissenschaftlicher Karriere. Er promovierte 1974 bei Otto Jarchow ebenfalls in Hamburg mit einer Arbeit über organische Verbindungen. Nach der Promotion zog es ihn wieder nach Süden, an die Universität Konstanz, womit die Schweiz und die Alpen erneut ins Blickfeld rückten. Zumindest geographisch gesehen was es dann ein logischer Schritt 1978 nach Genf umzusiedeln. Dort arbeitete er rund

sechs Jahre als *Maître Assistant* in der *Chimie Applique* (Angewandte Chemie) und an seinem Französisch. Mit Wanderungen auf den nahegelegenen Salève auf der französischen Seite der Grenze hielt Wulf sich fit und habilitierte dann 1983 unter der Betreuung von Hans Schmid mit der Habilitationsschrift die, ganz im Sinne von hanseatischem Understatement, den Titel trug: „A Contribution to the Knowledge of Aluminate Sodalites“.

Hans Wondratschek holte Wulf 1984 als wissenschaftlichen Assistenten an die Uni Karlsruhe. Im Röntgenkeller des Instituts für Kristallographie in Karlsruhe fand meine erste persönliche Begegnung mit Wulf statt: Er ein cooler Wissenschaftler, mit passender Brille, der von inkommensurablen Strukturen sprach – ich ein verwirrter Student (noch ohne Brille) auf der Suche nach einer interessant klingenden Diplomarbeit. Daraus wurde jedoch erstmal nichts, weil Wulf bald nach unserer Begegnung (1987) dem Ruf auf eine Professur an die TU Berlin folgte. Dort – im damals noch geteilten Berlin – stieß ich später als Doktorand zu Wulfs Arbeitsgruppe, zu der damals bereits Xiaorui Hu und Rolf Melzer gehörten, und die mit Karsten Knorr, Hannelore Katzke, Joachim Strobel, Matthias Meyer und anderen rasch wuchs. Es folgte dann 1992 die Berufung auf die C4-Professur in Kiel, die in vielerlei Hinsicht ein neues Kapitel startete und wo er 2010 dann den sogenannten Ruhestand antrat.

Aus diesem kurzen Abriss wird klar, dass sich bei Wulf Bodenständigkeit und Mobilität organisch zusammenfinden: Die Wanderjahre begannen im Norden Deutschlands und sie fanden dort ihren vorläufigen Abschluss. Wanderungen in den Alpen waren ihm wichtig zum Abschalten und mit Reisen zu Kongressen und Konferenzen erhielt er alte Verbindungen aufrecht und knüpfte zahlreiche neue.

Wissenschaftliche Arbeit

Das wissenschaftliche Wirken von Wulf Depmeier ist stark von den Themen Symmetrie, Pseudosymmetrie und Symmetriebruch geprägt. Das betrifft sowohl die Kristallstrukturanalyse als auch das Verständnis von Phasentransformationen und die phänomenologische Beschreibung von Phasenübergängen, zum Beispiel im Rahmen der Landau-Theorie. Aus diesem Umfeld entspringen dann eine Vielzahl von Arbeiten an diversen Substanzklassen und mit verschiedenen Methoden, prominent darunter natürlich Röntgen- und Neutronenbeugung. Ein wesentlicher Teil der Arbeiten beschäftigt sich mit synthetischen Aspekten von Mischkristallreihen, Interkalationen und schwachen Wechselwirkungen in Gast-Wirt-Systemen.

Beim Zusammenstellen dieses Vortrags war nicht zu übersehen, wie Ortswechsel oft mit einer Veränderung der Substanzklasse einhergingen. Es begann bei Horst Saalfeld in Hamburg mit siliziumfreien Sodalithen, mit der Doktorarbeit rückten organische Verbindungen ins Blickfeld, in Konstanz dann Arbeiten über Perowskit-artige Germanium(II)-Verbindungen, die temperaturabhängige Phasenübergänge und modulierte Strukturen aufwiesen. In Genf die Rückbesinnung auf die Aluminatsodalithe, in Berlin die von Sodalithen abgeleiteten Mischkristallreihen, mit temperaturabhängigen Phasenübergängen und Pseudosymmetrien, und schließlich die späteren Arbeiten in Kiel über Schichtverbindungen, Chalkogenide, Borate und Uranverbindungen. Die Liste ist deutlich zu lang um Sie, liebe Zuhörer, bei der Stange zu halten.

Ein zweites Merkmal ist die experimentelle Entwicklung: Es bleibt nicht bei der Röntgendiffraktion. Neutronenbeugung und Arbeiten mit spektroskopischen Methoden kommen im Laufe der Jahre hinzu. Dazu zählt auch die Entwicklung der Probenumgebung

(Stichwort Hochdruck und Hochtemperatur), hochauflösende Pulverdiffraktion und die Strukturbestimmung von inkommensurabel modulierten Strukturen mit dem Ansatz der höherdimensionalen Raumgruppen.

So bleibt als Fazit, dass neben einem konstanten Grundthema (Symmetrie, Symmetriebruch, Pseudosymmetrie) in hohem Maße Neugier, Flexibilität und Kreativität zum Ausdruck kamen, ein Kontinuum von sich entwickelndem Interesse die Gesetzmäßigkeiten kristalliner Strukturen zu verstehen und die Grenzbereiche von Mineralogie und Kristallographie auszuleuchten.

INTERNATIONALE KOOPERATION

Das dritte Kapitel heute Abend möchte ich Wulf Depmeier, dem Brückenbauer widmen: Brückenbauer zwischen Ländern, zwischen wissenschaftlichen Kolleginnen und Kollegen und zwischen Wissenschaft und Kunst.

Vielleicht kann man es als Vorzeichen werten, dass Wulfs erste Publikation (mit Horst Saalfeld) 1972 in der Zeitschrift „Kristall und Technik“ veröffentlicht wurde, einer Zeitschrift die damals in Leipzig, also hinter dem Eisernen Vorhang, gedruckt wurde. Als sich 1989 und 1990 die Umwälzungen der Wende ereigneten, verpflichtete sich Wulf nicht nur zu einem Vortrag in Leipzig, sondern zu einer ganzen Vorlesungsreihe und ermöglichte damit den enorm wichtigen persönlichen Kontakt zwischen Professor West und Student Ost.

An der Uni Genf traf Wulf auf Kolleginnen und Kollegen aus aller Herren Länder und Verbindungen, die damals geknüpft wurden, bildeten zum Teil die Basis für spätere internationale Kooperationen, zum Beispiel mit Guillermo Castellanos aus Mexiko, mit Pierre Toledano aus Frankreich, mit Kolleginnen und Kollegen aus Rabat (Marokko), Grenoble (Frankreich), Prag (Tschechische Republik) und ganz ausgeprägt St. Petersburg (Russland).

Wulf Depmeier ist nicht nur ein fleißiger Besucher und Organisator von Konferenzen (1996 DMG-Tagung, 2002 DGK-Tagung fanden in Kiel statt), er erfand auch seine eigene Konferenz: Die Stechelberg-Treffen über Sodalithe, obwohl diese nicht immer in Stechelberg (Kanton Bern) stattfanden, aber immer mitten in den Alpen, und damit die Möglichkeit zum Bergwandern mitbrachten.

Natürlich muss man in diesen Zusammenhang Wulfs langjähriges Engagement (in vielen Funktionen) innerhalb der ehemaligen AgKr und heutigen DGK hervorheben. Unbelastet von akademischer Selbstverwaltung engagierte sich Wulf Depmeier nach 2010 verstärkt in der *International Union of Crystallography* und half als Mitglied des *Executive Committee* Brücken zu bauen.

Ich habe Wulf Depmeier als Wissenschaftler kennengelernt, aber auch als Ästhet und als der Kunst zugewandt. Dazu gehörte zu Berliner Zeiten exemplarisch das feine blaue Teegeschirr in der Mittagspause. Aber wesentlich wichtiger sind natürlich die Ausstellungen, die Wulf in Kiel unter anderen mit Horst Küppers organisierte, wie zum Beispiel „Ecken und Kanten – Kristall zwischen Wissenschaft und Kunst“.

ABSCHLUSS

Ich habe zu Beginn von Wertschätzung gesprochen, die ich persönlich und sicher viele andere hier für Wulf Depmeier empfinden. Diese gründet sich auf seiner herausragenden wissenschaftlichen Arbeit aber eben auch auf seinen Qualitäten als Kollege, als Freund und als Mensch. Wulf hat sich in vielerlei Hinsicht als Brückenbauer erwiesen zwischen Ost und West, zwischen Nord und Süd. Wir werden solche Brückenbauer auch in Zukunft brauchen und so möchte ich dem Namensgeber für das Mineral Depmeierit noch einmal herzlich zu der Auszeichnung mit der Carl-Hermann-Medaille gratulieren.

Klaus Fütterer, Birmingham

Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2022 an Juan Manuel Garcia-Ruiz

für seine grundlegend innovativen Überlegungen zum biologischen Ursprung mikrofossiler Strukturen sowie seine zukunftsweisenden Untersuchungen der chemischen Aktivität selbstorganisierender mineralischer Aggregate, welche zu einem neuen Verständnis der Bedeutung anorganischer Mineral-Baueinheiten für die Entstehung von natürlichen biorelevanten Molekülen unter geochemischen Bedingungen beitragen und damit wesentliche Bausteine zur Etablierung einer plausiblen präbiotischen Chemie liefern

Dies ist eine schriftliche Wiedergabe der am Ehrenabend der 30. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in englischer Sprache gehaltenen Laudatio auf den Preisträger Prof. Garcia-Ruiz. Aufgrund der andauernden COVID-19-Pandemie konnte der Ehrenabend, wie auch die gesamte Tagung (München, 14.–17. März 2022), nur virtuell stattfinden. Der derzeitige Gastgeber des Geehrten, Prof. Wolfgang Bach von der Universität Bremen, übernahm es, stellvertretend für den Vorsitzenden der DGK, Prof. Thomas Schleid, die Urkunde zu überreichen. Die Aufnahme zeigt Prof. Garcia-Ruiz links neben Prof. Bach beim Empfang der Urkunde.

Juan-Manuel Garcia-Ruiz, geboren 1953 in Sevilla, Spanien, absolvierte sein Studium an der *Universidad Complutense de Madrid*, wo er sich schon früh diversen, im weitesten Sinne kristallographischen, Studien zuwandte, die neben den geowissenschaftlichen Grundlagen und Mineralogie, insbesondere auch Keimbildung und Kristallwachstum, Bildung von Strukturmustern und strukturelle Selbstorganisation umfassten, und wo er 1981 mit dem Schwerpunkt konvektionsfreie, diffusionsbestimmte Kristallisationstechniken promovierte. Nach Postdoktorandenstellen in Antwerpen, Belgien, und an der *Pennsylvania State University*, USA, kehrte er nach Spanien zurück und wurde dort 1990 als CSIC-Professor (*Consejo Superior de Investigaciones Científicas*) an die Universität Granada berufen, wo er bis heute forscht und lehrt. Er ist Gründer und Direktor des „Laboratoriums für kristallographische Forschung“ und leitender Wissenschaftler der *Spanish Crystallization Factory*, ein Projekt, das die Forschung von mehr als 100 Wissenschaftlern aus acht verschiedenen spanischen Institutionen koordiniert.

Prof. Garcia-Ruiz ist ein international anerkannter Experte für alle Aspekte der Kristallisation; seine Untersuchungen, Publikationen und Medienpräsentationen, z. B. über die gigantischen Gipskristalle von Naica (Mexiko) oder die weltweit größte Geode von Pulpi/Spanien, haben ihn auch weit über die Grenzen der Wissenschaft hinaus bekannt gemacht. In Fachkreisen ist er u. a. bekannt für seine Arbeiten über Grundlagen der Kristallisation von diversen Pharmaka und Proteinen. Auch war er Leiter von verschiedenen Projekten zur Kristallisation unter gravitationsfreien oder -reduzierten Weltraumbedingungen oder unter Einsatz von erdgebundenen diffusionskontrollierten Techniken (Gelzüchtung, Kapillargefäße). Seine Forschungsergebnisse sind in mehr als 400 Publikationen in durchweg hochrangigen Journalen veröffentlicht worden, die bisher rund 12000 Mal zitiert wurden; sein *h*-Index erreicht rund 60.

Sein umfangreiches Wissen und profundes Verständnis für alle Aspekte der mit Kristallisation und Strukturbildung verbundenen Phänomene, sowie seine exzellenten didaktischen Fähigkeiten, machen Prof. Garcia-Ruiz zu einem außergewöhnlich aktiven und erfolgreichen Hochschullehrer. Zusammen mit seinen Kolleginnen und Kollegen hat er Granada zu einem der wichtigsten Zentren für die kristallographische Lehre entwickelt, wo die Geheimnisse der Kristallisation an den internationalen wissenschaftlichen Nachwuchs vermittelt werden, wo aber auch Programme für die Popularisierung kristallographischer Informationen für die interessierte Öffentlichkeit und insbesondere für junge Schülergenerationen entwickelt werden. Die alljährlich stattfindenden *International Schools of Crystallization IS(B)C of Granada* werden alternierend mit Schwerpunkt entweder auf anorganische Materialien und kleine organische Molekülstrukturen oder auf biologisch relevante Substanzen organisiert. Diese Veranstaltungen werden unter anderem auch von der IUCr unterstützt und genießen dort einen ausgezeichneten Ruf. Mit alljährlich rund 14000 teilnehmenden Schülern ist der *Spanish Crystallization Contest* weltweit einer der größten derartigen Wettbewerbe (siehe z. B. *https://www.iycr2014.org/photos/spain/concurso*).

Neben zahlreichen weiteren von Prof. Garcia-Ruiz organisierten *Outreach*-Veranstaltungen, wie z. B. Ausstellungen im Zusammenhang mit dem *International Year of Crystallography 2014* für interessiertes Laienpublikum, soll noch eine wichtige, besonders für junge Nachwuchswissenschaftler organisierte Veranstaltung erwähnt werden, mit der eine Brücke zwischen Kristallographie und einer verwandten Wissenschaftsdisziplin geschlagen werden konnte. Zusammen mit internationalen Kolleginnen und Kollegen veranstaltete Prof. Garcia-Ruiz 2016 nahe Cholula (Puebla, Mexiko) den ersten gemeinsamen COSPAR-IUCr-Workshop unter dem Titel „Crystallography for Space Sciences“; COSPAR steht dabei für *Committee on Space Research*. Hier erhielten die jungen Wissenschaftler u. a. tiefe Einblicke in die Mars-Mission *Mars Science Laboratory* (Start 2011) und ihren Rover *Curiosity*. Auf besonderes

Interesse stieß bei kristallographisch orientierten Teilnehmern das speziell für diese Mission entwickelte *CheMin*-Instrument, mit dem Röntgenpulverdiffraktogramme vor Ort an Marsgestein gesammelt werden. Ein an der Entwicklung von *CheMin* maßgeblich beteiligter Wissenschaftler konnte detaillierte Informationen über das Instrument und seine Funktionsweise geben und erklären, wie die Messdaten zur Auswertung über eine Distanz von immerhin 70 Millionen Kilometern zur Erde übertragen werden. Für den Workshop war ursprünglich ein Demonstrationsprojekt geplant, bei dem ein Nachbau von *CheMin* auf dem nur wenige Kilometer vom Tagungsort entfernten Vulkan Popocatépetl platziert werden sollte, um dort fernbedient XRPD-Daten zu sammeln und diese den Teilnehmern zur Auswertung zu übermitteln. Dieses attraktive Vorhaben scheiterte letztlich daran, dass der Vulkan in eine aktive Eruptionsphase überging, was von intensivem Aschefall bis nahe der Tagungsstätte begleitet war. Ersatzweise konnte die Probennahme praktischerweise direkt vor Ort in der Tephra erfolgen und *CheMin* seine Funktionen demonstrieren.

Die Aktualität dieses Projekts konnte später dadurch bestätigt werden, dass einige Teilnehmer des Workshops ihre Doktorarbeit im Rahmen der Forschungsvorhaben von Prof. Garcia-Ruiz anfertigen konnten. Außerdem hat die *International Mineralogical Association (IMA)* ihr *23. General Meeting 2022* in Lyon, Frankreich, nicht nur an den Zielen des *International Year of Mineralogy* ausgerichtet, sondern ein besonderes Gewicht der Tagung auf die Intensivierung der Beziehungen zwischen Mineralogie/Kristallographie und Weltraumforschung gelegt. Man kann wohl annehmen, dass dies nicht zuletzt unter dem Eindruck der bereits während des ersten Jahres ihrer Aktivität erzielten, faszinierenden Ergebnisse der Mission *Mars 2020* und ihres Rovers *Perseverance* mit seinem umfangreichen Instrumentenpool, einschließlich der ersten erfolgreich absolvierten Helikopterflüge auf dem Mars, geschah.

Mars 2020 mit Rover *Perseverance* (aktiv seit 2021) und die Vorgängermission *Mars Science Laboratory* mit Rover *Curiosity* (aktiv seit 2012) sind Missionen der NASA. Seitens der *European Space Agency (ESA)* wurde zwischenzeitlich eine neue Mission *ExoMars* für einen geplanten Start im zweiten Halbjahr 2022 vorbereitet. *ExoMars* und ihr Rover bauen auf den Erfahrungen früherer Missionen auf und als eines ihrer wissenschaftlichen Hauptziele wurde die Suche nach Signaturen oder sogar Überbleibseln möglicher früherer, wahrscheinlich ausgestorbener, Lebensformen auf Mars definiert. Zur Genugtuung der kristallographischen Gemeinschaft wurde der Rover am 07.02.2019 auf den Namen „Rosalind Franklin“ getauft, als eine späte Würdigung der Verdienste der Namensgeberin im Zusammenhang mit der Aufklärung der Doppelhelixstruktur der DNA.

Prof. Garcia-Ruiz wurde für *ExoMars* in die wichtige Funktion des *IDS (Interdisciplinary Scientist)* gewählt, eine sehr passende Wahl, da er u. a. als Mitautor wichtiger relevanter Publikationen mit den anstehenden Aufgaben bestens vertraut und erfahren ist. Diese Publikationen analysieren das Potential verschiedener vorgeschlagener technischer oder statistischer Kriterien zur Einschätzung von erfolgversprechenden Beobachtungen mit dem Ziel, eine quantifizierbare Aussage über die Wahrscheinlichkeit für den potentiellen biogenen Ursprung einer ausgewählten Beobachtung zu machen, siehe hierzu J. L. Vago et al. (>70 Koautoren plus Entwicklungsteams): „Habitability on Early Mars and the Search for Biosignatures with the ExoMars Rover“, Astrobiology 17 (2017) 471–510 und J. Rouillard, M. van Zuilen, C. Pisapia, J.-M. Garcia-Ruiz: „An Alternative Approach for Assessing Biogenicity“, Astrobiology 21 (2021) 151–164.

Unglücklicherweise musste *ExoMars* kurz vor dem geplanten Start zu ihrem rund neun Monate dauernden Flug gestoppt werden. Dies geschah nicht etwa wegen technischer Probleme, sondern die Mission fiel bekannten politischen Entscheidungen zum Opfer, deren Folgen weit

über das Schicksal eines einzelnen wissenschaftlichen Projekts hinaus weitreichende Konsequenzen haben. Die bisherigen Entwicklungsarbeiten an *ExoMars* und ihrem Rover waren in Form eines Konsortiums zwischen ESA und der russischen Weltraumorganisation ROSKOSMOS organisiert. Kurz nach Beginn des Krieges in der Ukraine wurde die Zusammenarbeit beendet und das weitere Schicksal von *ExoMars*, *Rosalind Franklin*, den vielen Instrumenten und somit der gesamten hoffnungsvollen, friedlichen, wissenschaftlichen Mission bleibt bis auf Weiteres ungewiss (siehe weiter unten).

Einige seiner aktuellen Geländearbeiten erfordern von Prof. Garcia-Ruiz und seinen Kollegen Probennahme und gegebenenfalls direkt vor Ort durchzuführende chemische Umsetzung an Lokalitäten mit sehr spezifischen geochemischen Verhältnissen. Manche dieser Orte verlangen von den Forschern auch die ausgeprägte Fähigkeit zum Ertragen von teilweise extremen klimatischen Verhältnissen, wie sie z. B. in einigen Gebieten im ostafrikanischen Grabensystem anzutreffen sind. Die Projekte des Preisträgers werden vom *European Research Council (ERC)* durch einen *Senior Advanced Grant* „Prometheus“ unter dem Titel „Pattern formation and mineral self-organization in highly alkaline natural environments“ gefördert. Eine relevante Veröffentlichung, die möglicherweise auch für das Preiskomitee eine Rolle für seine Entscheidung gespielt hat, trägt den treffenden Titel „Mineral Vesicles and Chemical Gardens from Carbonate-Rich Alkaline Brines of Lake Magadi, Kenya“ (M. Getenet, J. M. García-Ruiz, C. Verdugo-Escamilla, I. Guerra-Tschuschke: Crystals 10 (2020) 467). An Hand dieses Titels und mit Hilfe der Publikationsliste des Preisträgers lässt sich ein bereits lang andauerndes wissenschaftliches Interesse an der Bildung und Eigenschaften von selbstorganisierten, organisch-anorganischen Kompositmaterialien erkennen; ein Interesse, für das der Keim mutmaßlich schon zu Zeiten seiner Promotionsstudien gelegt wurde. Diese Materialien zeichnen sich u. a. dadurch aus, dass sie im Nanometerbereich den allgemein gültigen kristallographischen Gesetzmäßigkeiten folgen, sich bei weiterem Aufbau, bis hinein in den Mikrometerbereich und darüber hinaus, aber phänomenologisch durch „nicht-kristallographische“ Aspekte auszeichnen. Typisch dafür sind z. B. kontinuierlich gekrümmte Flächen, zwischen denen sich Hohlräume öffnen oder wo blasen- bis schlauchförmige, auch sich verzweigende, Kompartimente auftreten. Im äußeren Erscheinungsbild können diese Gebilde spiral- oder schraubenförmige Formen aufweisen. Die Wände zwischen den Kompartimenten können schichtförmig ausgebildet sein und bei geeigneten chemischen Zusammensetzungen katalytische Eigenschaften aufweisen. Die auffällige und den Gesetzen der Kristallographie scheinbar widersprechende äußere Form der gebildeten Aggregate erinnert in ihrem Erscheinungsbild an gewisse mumifizierte Exoskelette von vielen Mikroorganismen und können so einen flüchtigen Beobachter leicht zu der Annahme verführen, dass die Entstehung der rein anorganisch gebildeten, „biomorph“ genannten, *Mineral Self-organized Structures (MISOS)* einerseits, und von biologisch kontrollierten biomineralischen Strukturen andererseits, notwendigerweise auf dieselbe Genese zurückzuführen sei. Ein bekanntes historisches Beispiel für eine solche Fehlinterpretation ist die Beobachtung von vermeintlich mumifizierten Mikroorganismen im Marsmeteoriten ALH84001, die sich später als MISOS herausstellten.

In den vergangenen Jahrzehnten hat sich ein solides Verständnis für einige der wichtigsten physikochemischen Grundlagen und für nicht-klassische Bildungsmechanismen von *Mineral Self-organized Structures* entwickelt. Allerdings waren die daraus gewonnenen Aussagen stillschweigend auf Laborexperimente oder kleinräumige, isolierte, sich zufällig ergebende natürliche Prozesse in nur wenigen dafür geeigneten Umgebungen beschränkt geblieben. Das laut der Begründung für die Preisverleihung große Ziel, nämlich zur „Bedeutung anorganischer Mineralbaueinheiten für die Entstehung von natürlichen biorelevanten Molekülen unter geochemischen Bedingungen bei(zu)tragen…“ erforderte:

i) eine Erweiterung der wissenschaftlichen Basis durch neue Ansätze experimenteller und theoretischer Art,
ii) die Überwindung herkömmlicher Grenzen zwischen Fachdisziplinen und dadurch sich ergebendes Zusammenwirken der beteiligten Disziplinen,
iii) die Entwicklung eines Bewusstseins für die Bedeutung von globaler synergetischer Wechselwirkung von Teilaspekten in sich über Jahrmillionen bis -milliarden erstreckenden Zeiträumen,
iv) die Entwicklung eines plausiblen Szenarios für großräumige, möglicherweise den ganzen Planeten umfassende, wechselwirkende geochemische Bedingungen und die nachfolgende Entwicklung einer präbiotischen Chemie mit Relevanz für Fragen nach den Bedingungen und Ursachen für eine mögliche Entstehung frühester primitiver Lebensformen auf der jungen Erde (und auf dem seinerzeit ähnlichen jungen Mars).

In der Publikation von J. M. Garcia-Ruiz, M. A. van Zuilen, W. Bach: „Mineral self-organization on a lifeless planet“, Physics of Life Reviews 34–35 (2020) 62–82, weisen die Autoren u. a. auf einige der grundsätzlichen Schwierigkeiten hin, einen Zeitpunkt zu bestimmen, für den das erste Auftreten von Lebewesen nachweisbar ist. Die Interessen der drei Autoren sind beispielhaft interdisziplinär ausgerichtet und ihr akademischer Hintergrund ist international. Sie zählen unter sich einen Kristallographen (JMGR, Granada), einen Geobiologen (MAvZ, Paris) und einen Petrologen (WB, Bremen). Gestützt auf Experimente, Beobachtungen, Theorien und interdisziplinären Austausch von Erfahrungen und Argumenten, haben sie gemeinsam ein Szenario entworfen, das eine mögliche zwangsläufig ablaufende Entwicklung der jungen Erde im Hadaikum beschreibt (d. h. die ersten ca. 500 Mio. Jahre des Bestehens unseres ca. 4600 Mio. Jahre alten Planeten), wobei der ganze Planet großräumig als ein zusammenhängender Reaktionsraum verstanden wird, in dem komplexe, gekoppelte chemische Reaktionen ablaufen. Im Unterschied zu früheren Vorstellungen über die im Hadaikum herrschenden Verhältnisse postuliert das Szenario eine umfangreiche Kondensation von Wasser, das durch Reaktion mit frühen festen Gesteinen zur Bildung von alkalischen Wasser-Ozeanen führt, in denen weltweit mineralische anorganisch-anorganische Komposit-strukturen (Biomorphs) gebildet werden, ferner langanhaltende durch Serpentinisierung von mafischen und ultramafischen Gesteinskomplexen hervorgerufene Wasserstoffemission, Fischer-Tropsch-artige Synthesen und der Aufbau von einfachen organischen Molekülen. Ein zentraler Teilaspekt ist dabei die erwähnte selbstorganisierte Bildung von *MISOS*, wobei für einige der gegenwärtig experimentell zugänglichen Vertreter belegt ist, dass sie katalytische Eigenschaften besitzen, die wiederum wichtige Teilreaktionen miteinander verknüpfen, siehe hierzu E. Kotopoulou, M. Lopez-Haro, J. J. Calvino Gamez, J. M. Garcia-Ruiz: „Nanoscale Anatomy of Iron-Silica Self-Organized Membranes: Implications for Prebiotic Chemistry“, Angew. Chem. Int. Ed. 60 (2021) 1396–1402.

Wie bereits erwähnt, können diese selbstorganisierten, rein anorganischen Strukturbildungen phänomenologisch frappierende Ähnlichkeiten mit gewissen „biomineralischen“ Strukturen aufweisen, die allerdings erst Hunderte von Jahrmillionen später an frühen primitiven, unzweideutig nachgewiesen biogenetischen, Lebensformen beobachtet werden. Dazu stellt sich die Frage, ob es etwa einen möglichen Übergang zwischen geogenetischen und biogenetischen Formen gibt, ob eine Entwicklung von frühesten Lebensformen oder Vorstufen dazu im Sinne des oben erwähnten Szenarios nicht nur denkbar, sondern nachweisbar ist. Die Autoren von PLR (2020) schreiben – etwas pessimistisch: „The boundary between life and non-life becomes fuzzier and fuzzier as we get further down in deep time, when shapes of living organisms were simpler and their preservation was more difficult“. Da es als sicher angenommen wird, dass der frühe Mars große Ähnlichkeit mit der frühen Erde aufwies und, anders als die Erde, in späteren Äonen nicht von Plattentektonik durchmischt wurde, war es eine der Grundannahmen von *ExoMars*, dass eventuelle Signaturen früher Lebensformen eher auf dem Mars zu finden sein

sollten, als auf der von den späteren dynamischen Prozessen vielfach umgestalteten Erde. Die *ExoMars*-Mission hatte daher als eine ihrer Hauptaufgaben, zum ersten Mal in der Geschichte der Marserkundung Gesteinsformationen aus dem Noachischen Äon zu beproben – sie entspricht dem Hadaikum der Erde – so dass begründet angenommen werden konnte, dass das skizzierte geochemische Szenario im Wesentlichen in der frühen Parallelentwicklung beider Planeten hätte realisiert sein sollen. Sollten also in solchen Mars-Gesteinen Signaturen mit als wahrscheinlich eingeschätztem biogenetischem Ursprung gefunden werden, so wäre die für Mars geltende Aussage *cum grano salis* auch auf die Erde übertragbar. Wie oben erwähnt, ist *ExoMars* gestoppt und die Mission, wie sie geplant war, kann vermutlich auch nie mehr revitalisiert werden. Aber selbst dann wären die jahrelangen, umfangreichen Vorarbeiten nicht unbedingt vergebens gewesen. Sollte es also eine Nachfolgemission von *ExoMars* geben, werden die relevanten Arbeiten und Überlegungen von Prof. Garcia-Ruiz und seinen Kollegen wichtige Beiträge liefern können.

Es sollten noch die Beiträge einer weiteren interdisziplinären Zusammenarbeit erwähnt werden. Aufbauend auf dem erwähnten geochemischen Szenario wurden grundlegende chemische Aspekte einer sich möglicherweise entwickelnden präbiotischen Chemie unter der Annahme einer zentralen Rolle von Formamid untersucht und mit Prof. Garcia-Ruiz als Mitautor publiziert: R. Saladino, E. Di Mauro, J.M. Garcia-Ruiz: „A Universal Geochemical Scenario for Formamide Condensation and Prebiotic Chemistry“, Chem. Eur. J. 25 (2019) 3181 und B. M. Bizzarri, R. Saladino, I. Delfino, J. M. García-Ruiz, E. Di Mauro: „Prebiotic Organic Chemistry of Formamide and the Origin of Life in Planetary Conditions: What We Know and What Is the Future“, Int. J. Mol. Sci. 22 (2021) 917.

Die kleine Auswahl von zitierten technisch-wissenschaftlichen Publikationen belegt zweierlei. Erstens, dass die Arbeiten den aktuellen Stand und den hohen Standard der hier relevanten Forschungen deutlich erkennbar widerspiegeln; zweitens, dass die Liste der Mitautoren, deren Heimatinstitutionen und fachliche Zugehörigkeit zu unterschiedlichen, aber sich ergänzenden Wissenschaftsdisziplinen, die Offenheit des Preisträgers für interdisziplinäre Kooperationen nachdrücklich belegen. Die belegte Mitautorenschaft von Prof. Garcia-Ruiz an den diversen Publikationen zeigt auch, dass er die treibende Kraft hinter allen gemeinsamen Aktivitäten war und ist. Dieser Eindruck wird durch eigene Erfahrungen des Unterzeichneten bestätigt, z. B. durch persönliche Kontakte und Diskussionen mit Prof. Garcia-Ruiz, auch mit einigen seiner Mitautoren, und bestärkt ihn in der Überzeugung, in dem Preisträger den eigentlichen Vordenker der interdisziplinären Unternehmungen zu sehen. Hinsichtlich der angeführten technisch-wissenschaftlichen Aktivitäten sind die Auswahlkriterien für die Verleihung des Interdisziplinaritätspreises der DGK Prof. Juan-Manuel Garcia-Ruiz vollständig erfüllt. Er ist zweifellos ein würdiger Preisträger.

Aus den zitierten Titeln seiner Publikationen lässt sich ablesen, dass es für Prof. Garcia-Ruiz nicht unbedingt ein ultimatives Ziel seiner wissenschaftlichen Neugier ist, eine etwa grundsätzlich bereits bekannte Erkenntnis lediglich weiter zu verbessern, z. B. indem im Prinzip bereits bekannte Daten um einige, eventuell auch sehr wichtige, Nachkommastellen verfeinert werden. Er würde diesen Aspekt sicherlich nicht aus den Augen verlieren – da ist er ein grundsolider Kristallograph – aber seine große Leidenschaft scheint mehr den intellektuell herausfordernden Fragestellungen zu gelten, etwa indem er sich auch radikalen Fragen stellt, selbst wenn ein positives Ergebnis nicht unbedingt zu erwarten ist. Das entspricht auch seinen Aufgaben als Mitglied des *Scientific Management Board* des spanischen *Explora*-Programms, das von seiner Ausrichtung und Zielsetzung her wahrscheinlich dem „Reinhart Kosellek Programm“ der DFG entspricht. Ähnlich gelagert ist sein derzeitiger Status als „Kollegiat“ im Hanse-Wissenschaftskolleg Bremen-Oldenburg (*Senior Fellow, Institute of Advanced Studies*),

wo sein Projekt den Titel „Biomorphs in Science and Art“ trägt. Die Aufgabe solcher Programme ist es, intellektuell gewagte Forschungsprojekte an den, nicht unbedingt als solche erkannten, Grenzen des gegenwärtigen Wissens zu fördern. Manche dieser Projekte können sehr wohl scheitern, aber erfolgreiche Projekte könnten in der Lage sein, herkömmliche Denk- oder Verfahrensweisen radikal zu ändern, sie können ältere Ideen disruptiv durch neue ersetzen.

In diesem Sinne scheint Prof. Garcia-Ruiz im Grunde davon überzeugt zu sein, dass das Reich der Kristalle und das Reich des Lebendigen nicht scharf voneinander abzugrenzen sind; es könnte sogar einen fließenden Übergang zwischen beiden geben. Der Preisträger verfolgt eine weitere, teilweise durch Beobachtungen gestützte Idee, wonach es eine spezielle Beziehung zwischen der besonderen Rolle der Kristalle in Naturdingen (z. B. „Ecken und Kanten“, Punkt- und Raumgruppen gegen fraktale Muster) und der frühen Entwicklung des menschlichen Geistes mit seinem Sinn für Symmetrie, Schönheit, Kunst gibt. Dazu hat er eine Publikation veröffentlicht: J. M. Garcia-Ruiz: „2001: The Crystal Monolith“, Substantia 2 (2018) 19–25, die durch folgende interessante Kombination von *Keywords* charakterisiert wird: *Crystals, Crystallography, Abstract Thinking, Paleoneurobiology, Kubrick, 2001: A Space Odyssey.* Dieser Artikel hat den bekannten Kristallographen J. R. Helliwell zu einem in IUCr-Newsletter 26-2 (2018) veröffentlichten Kommentar „Wrestling with questions at the edge of Science Methods“ veranlasst, begleitet von einem Kommentar des Herausgebers A. M. Glazer. Beide empfehlen wärmstens die Lektüre des Artikels. Später fühlte sich auch der Autor dieser Zeilen ermuntert, in IUCr Newsletter 27-1 (2019) ebenfalls einen Kommentar unter dem Titel „Some humble side-notes on quartz, handedness and possible evolution of the human mind“ zu veröffentlichen. In einem neueren Kommentar über „Ancient Crystal Collectors“, IUCr Newsletter 29-2 (2021) bezieht sich Prof. Garcia-Ruiz auf neue Funde von Anthropologen, die seiner Ansicht nach seine ursprünglichen Ideen über mögliche Beziehungen zwischen Kristallformen und der frühen Entwicklung der Bewusstseins von frühen Menschen belegen.

Prof. Garcia-Ruiz wurde eingeladen, am IUCr25-Kongress in Prag (2021) eine *Keynote Lecture* zu geben, die eine Erweiterung seiner früheren Arbeiten durch neue Ideen und ergänzt durch Beobachtungen darstellen. Der Titel lautete „The crystal and the rose: on the impact of crystals and crystallography on arts and mind“. Der Abstract findet sich in Acta Cryst. A77 (2021) C36. Ohne an dieser Stelle näher auf dieses Thema eingehen zu wollen, so mögen einige Stichworte das Interesse des Lesers wecken. Der „Erfinder des Kindergartens“ Friedrich Fröbel (1782–1852) hat unter anderem Wert auf frühkindliche Beschäftigung mit regelmäßigen Bausteinen o. ä. gelegt, wodurch der jugendliche Geist geformt werden soll. Diese Idee hat sich in der weltweiten Kindergarten-Bewegung verbreitet und viele wichtige Geistesgelehrte, Künstler, Architekten geprägt. Fröbel war vorübergehend Assistent bei Christian Samuel Weiss (1780–1856), der in Berlin wesentliche Grundlagen der geometrischen Kristallographie entwickelte. Fröbel hat dort vermutlich mit Kristallmodellen Bekanntschaft gemacht, was sein entsprechendes Denken geprägt haben dürfte. Prof. Garcia-Ruiz ist fasziniert von Fröbel, seiner Kindergartenpädagogik und vielen, deren Geist in seinem Sinne geprägt worden ist. Einige wenige einschlägige Publikationen mögen das belegen: F. M. Logan: „Kindergarten and Bauhaus“, College Art Journal 10 (1950) 36–43; J. S. Rubin: „Intimate Triangle: Architecture of Crystals, Frank Lloyd Wright and the Froebel Kindergarten“, Polycrystal Book Service (2002); Bart Kahr: „Crystal Engineering in Kindergarten“, Cryst. Growth & Design 4 (2004) 9 und 15 (2015) 4715–4730.

Dies führt uns abschließend dazu, einen weiteren Ausdruck von Interdisziplinarität im Denken und Wirken von Prof. Garcia-Ruiz zu entdecken. Es gibt bei ihm offensichtlich keine sehr scharfe Grenze zwischen seinem Verlangen nach Abstraktion im Sinne der Unterordnung unter strikte Regeln und Gesetze, wie sie die kristalline Welt beherrschen (*Science*), und nach

Empathie für künstlerische Werke (*Art*), ausgedrückt in Bildern, Skulpturen, Kino, Literatur, Tanz, Musik, etc. Man ist versucht, ihn im Sinne von Wilhelm Worringer („Abstraktion und Einfühlung“, 1908) als einen exemplarischen Vertreter von Interdisziplinarität zu charakterisieren.

Ich gratuliere Prof. Juan-Manuel Garcia-Ruiz sehr herzlich für die hochverdiente Auszeichnung mit dem Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2022.

Wulf Depmeier, Kiel

P. S.: Nach der Auszeichnung mit dem Liebau-Preis der DGK zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2022 ist Herrn Prof. Juan-Manuel Garcia-Ruiz auch der *Elizabeth A. Wood Science Writing Award 2023* der *American Crystallographic Association* verliehen worden (für weitere Informationen: *https://www.amercrystalassn.org/wood-award*).

LIESELOTTE-TEMPLETON-PREIS 2022

Der folgende Text entspricht der Laudatio, die anlässlich der erstmaligen Vergabe des Lieselotte-Templeton-Preises auf der 30. DGK-Jahrestagung am 14.03.2022 verlesen wurde.

Sehr geehrter Herr Vorsitzender, liebe Kolleginnen und Kollegen, sehr geehrte Damen und Herren, liebe Preisträger,

ich spreche hier heute im Namen des Lieselotte-Templeton-Preis-Komitees. Das Komitee besteht aus insgesamt sechs Mitgliedern: Tobias Beck, Holger Kohlmann und mir, den Vorsitzenden der Jungen Kristallographen, Constantin Buyer und Tina Weigel, sowie dem Vorsitzenden unserer Gesellschaft, Thomas Schleid.

Wir freuen uns sehr, nun erstmalig diesen Studierenden-Preis im Namen unserer Gesellschaft an drei Preisträger vergeben zu können.

Der Lieselotte-Templeton-Preis wird für die besten Abschlussarbeiten (Bachelor, Master, Diplom oder ähnliche) im Bereich der Kristallographie vergeben. Unsere Gesellschaft vergibt diesen Preis jährlich an bis zu drei PreisträgerInnen.

Der Preis trägt den Namen der deutschen Kristallographin Lieselotte Templeton. Ihre Arbeiten an der *University of California* in Berkeley beeinflussten insbesondere Proteinkristallographen, aber auch Chemiker und Physiker. Zudem beeindruckte sie die jungen Studierenden durch ihre herzliche Persönlichkeit. Sie vereinte also Exzellenz mit Herzlichkeit und ihrem Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs. In diesem Sinne wollen wir heute den Preis für drei hervorragende Studierendenarbeiten verleihen.

Insgesamt sind zehn Vorschläge eingegangen. Es waren sehr spannende, hervorragende und würdige Arbeiten, die uns als Komitee den Entscheidungsprozess nicht einfach gemacht haben. Im Rahmen der Evaluierung hatten wir jedoch die Freude, in andere Arbeitsgebiete einzutauchen und dazuzulernen. Am Ende des Evaluierungsprozesses aber lag ein klares und einstimmiges Votum vor.

Bevor ich nun zur Verkündung und Kurzvorstellung der Preisträger komme, möchten wir uns als Preiskomitee ganz herzlich bei den Betreuenden aller eingereichten Vorschläge für ihr Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs und für unserer Gesellschaft bedanken.

Die diesjährigen Preisträger sind (in alphabetischer Reihenfolge):

- Herr B. Sc. Alexander Feige von der Universität Leipzig,
- Herr M. Sc. Noah Nachtigall von der RWTH Aachen und
- Herr B. Sc. Kristopher Nolte von der Universität Hamburg.

Lassen Sie mich nun kurz die drei Preisträger würdigen:

Alexander Feige

Herr Alexander Feige wurde für seine Arbeiten im Rahmen seiner Bachelorarbeit mit dem Titel „Synthese, Kristallstrukturanalyse und Messung physikalischer Eigenschaften der binären Berylliumpnictide $BePn_2$ (Pn = P, As, Sb) unter Verwendung röntgenographischer und elektronenmikroskopischer Methoden“ ausgezeichnet. Die Arbeit fertigte er in der Arbeitsgruppe von Oliver Oeckler, am Institut für Mineralogie, Kristallographie und Materialwissenschaft der Universität Leipzig an. Herr Feige studiert Chemie.

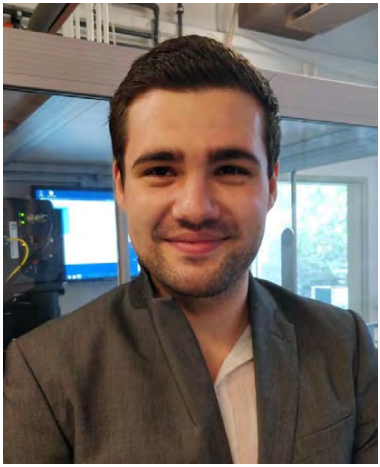
Kristallstrukturen fast aller binären Berylliumpnictide sind bisher nicht oder nur ansatzweise bekannt. Da sie in der Regel nur mikrokristallin erhalten werden, sind sie schwer charakterisierbar. Zu präparativen Hürden kommt die Notwendigkeit moderner Strukturanalysemethoden wie Beugung mit mikrofokussierter Röntgenstrahlung und Elektronenkristallographie hinzu. Diese Themen wurden in der Bachelorarbeit von Herrn Feige erfolgreich kombiniert. Nach Vorcharakterisierung im Transmissionselektronenmikroskop konnten mit mikrofokussierter Synchrotronstrahlung Einkristallbeugungsdaten erhalten werden. Dabei nahm Herr Feige an einer Messzeit am ESRF teil und hat weitere mit eigenem Antrag am DESY eingeworben.

Die Datenauswertung führte bei $BeSb_2$ zu einem neuen binären Strukturtyp mit Antimonatomketten. Entsprechend der Valenzelektronenkonzentration handelt es sich um eine Grimm-Sommerfeld-Verbindung, die auch dem Zintl-Konzept gehorcht. Dies bestätigen auch Rechnungen mittels Dichtefunktionaltheorie. $BeAs_2$ und das isostrukturelle BeP_2 weisen hingegen typische, stapelfehlgeordnete *Order-Disorder*-Strukturen auf, die zusätzlich mehrfach verzwillingt vorliegen. Herr Feige konnte dabei unter Rekonstruktion dreidimensionaler Beugungsdiagramme die lokale Struktur mit Pnictogen-Achtringen aufklären und mit einem Modell die diffusen Beugungslinien simulieren. Nach der Präsentation der Ergebnisse in einem eigenen Vortrag auf dem IUCr-Kongress 2021 sind diese bereits Gegenstand mehrerer im Veröffentlichungsprozess befindlicher Publikationen.

Sein Betreuer, Oliver Oeckler, sagt über ihn: „Es ist eine seltene Freude, dass sich Ausnahmetalente wie Herr Feige so früh für die Kristallographie begeistern und so schnell ein fortgeschrittenes Niveau erreichen. Diese Begeisterung überträgt er als besonders beliebter Tutor und Mentor auf nachfolgende Jahrgänge – ein Talent, wie man es als Hochschullehrer vielleicht nur einmal in seiner Karriere trifft.“

Dem schließen wir uns als Preiskomitee an und freuen uns nun, Herrn Feige die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis zu übergeben. Dieses wird stellvertretend für den Betreuer Oliver Oeckler – der leider verhindert ist – von Holger Kohlmann, der die Will-Kleber-Gedenkmünze erhielt, durchgeführt.

NOAH NACHTIGALL



Herr Noah Nachtigall wurde für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem Titel „Improving multidimensional data reduction and analysis algorithms for POWTEX: Raw-data correction with Pseudo-Voigt-back-to-back-exponentials, event correlation approaches and machine learning supported Rietveld refinement“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Richard Dronskowski, Professur für Festkörper und Quantenchemie am Institut für Anorganische Chemie der RWTH Aachen an. Herr Nachtigall hat Chemie studiert.

Seine Arbeit nimmt Bezug auf das zukünftige Neutronendiffraktometer POWTEX (FRM-II in München), bei dem Rietveldverfeinerungen neuen Typs ermöglicht werden, und zwar simultan als Funktion des Streuwinkels und zugleich der Wellenlänge, detektiert durch neuartige Festkörperdetektoren, als Funktion dreier Raumkoordinaten und der Flugzeit. Herr Nachtigall hat anhand experimenteller Rohdaten des POWTEX-Detektors u. a. zur Gestalt des Braggreflexes geforscht. Dieser kann am besten mit einem asymmetrischen Gaußprofil beschrieben werden. Spätere Modellierungen bei Routinebetrieb von POWTEX werden auf dieser Grundlage durchgeführt. Hinsichtlich der grundsätzlichen Rietveldstrategie hat Herr Nachtigall maschinelles Lernen und neuronale Netze eingesetzt, um vollautomatisch zu sinnvollen Ergebnissen zu gelangen, im speziellen Fall durch Verknüpfung einer Python-basierten Plattform mit GSAS-II (Kristallographie-Datenanalyse-Software). Ebenso wurde von ihm die Korrelation von Neutronenereignissen mit statistischen Methoden analysiert, sodass

sich unkorrelierte Ereignisse (also das Rauschen) jetzt praktisch exakt aus den Rohdaten entfernen lassen. Seine Arbeit kombiniert also Kristallographie mit IT-basierten Techniken. Sie zeigt zugleich indirekt den Mehrwert hinsichtlich Zugewinns an Information und Präzision der Ergebnisse auf, die die mehrdimensionale Rietveldmethode auf der Basis von Flugzeitneutronenbeugung zukünftig bieten wird.

Sein Betreuer, Richard Dronskowski, sagt über ihn: „Die in gewisser Weise bahnbrechende Masterarbeit überzeugt durch die konsequente und kristallographisch präzise Herangehensweise, und das alles andere als triviale Thema wurde von Herrn Nachtigall glänzend gemeistert."

Auch das Preis-Komitee schließt sich dieser Einschätzung an. Daher freuen wir uns, Herrn Nachtigall nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis zu übergeben. Dieses wird stellvertretend vom Betreuer, Richard Dronskowski, durchgeführt.

KRISTOPHER NOLTE

Herr Nolte wurde für seine Arbeiten im Rahmen seiner Bachelorarbeit mit dem Titel „Detection of ice-crystal artifacts in macromolecular diffraction data through machine learning" ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Andrea Thorn, am Institut für Nanostrukturen und Festkörperphysik der Universität Hamburg an. Neben Andrea Thorn wurde er von Philip Kollmannsberger aus Würzburg betreut. Denn Herr Nolte hat in Würzburg Biochemie studiert und ist dann mit dem Arbeitskreis Thorn an die Universität Hamburg gewechselt.

In der makromolekularen Kristallographie werden Proteinkristalle vor Röntgeneinkristallbeugungsmessungen meist auf Temperaturen von –173 °C gekühlt, um Strahlenschäden während der Messung zu minimieren. Das hat jedoch den Nachteil, dass sich Eiskristalle auf der Probenoberfläche bilden können. In einem Röntgenbeugungsexperiment führt das zu sogenannten Eisringen und einer Verschiebung von Intensitäten in einem bestimmten Auflösungsbereich. Herr Nolte hat in seiner Arbeit nun künstliche Intelligenz verwendet, um die Messdaten mithilfe von KI auf Kontamination durch Eiskristalle zu untersuchen. Mit

seinem Ansatz lassen sich Eisringe mit höherer Zuverlässigkeit identifizieren als mit allen vorangegangenen Methoden. Im Ergebnis kann entweder die Probenvorbereitung geändert oder die Eisringe können in der weiteren Datenprozessierung gleich mitberücksichtigt werden.

Die von Herrn Nolte programmierten neuronalen Netzwerke sind in die Software AUSPEX (Software für die Analyse von Röntgenbeugungsdaten) integriert worden und dienen damit der Qualitätssicherung kristallographischer Daten als Teil von CCP4 (*Collaborative Computational Project Number 4*) und ISPyB (Informationssystem für Protein-Kristallographie-Beamlines), wobei letzteres an fast allen makromolekularen Beamlines in Europa eingesetzt und der Code von Herrn Nolte so für den Großteil der biologischen Strukturlösungen in Europa miteingesetzt wird. Seine Forschungsergebnisse sind dieses Jahr in *Acta Crystallographica D* mit ihm als Erstautor erschienen.

Zusätzlich war Herr Nolte 2020/2021 Teil der „Coronavirus Structural Task Force“. Er schrieb dafür wissenschaftliche *Blogposts*, die das komplizierte Protein NSP3 genauer erklären, trug insgesamt zur Öffentlichkeitsarbeit bei und wirkte an der Gestaltung des bis dahin präzisesten 3D-Modells des Coronavirus mit. Dies wurde in diesem Rahmen auch öffentlich als 3D-Druck verfügbar gemacht. Des Weiteren schrieb er die erste Version der *Pipeline*, die jede Woche alle neuen Strukturen aus SARS-CoV-2 und SARS-CoV-1 in der Proteindatenbank findet und automatisch validiert. Er war auch für das interne Datenmanagement der Task Force verantwortlich und koordinierte diese mit allen 26 Mitgliedern in neun Zeitzonen, auf Deutsch und Englisch.

Seine Betreuerin, Andrea Thorn, sagt von ihm: „Kristopher ist ein außergewöhnlicher Student: Während des Lockdowns hat er sich mithilfe seiner Betreuer im Selbststudium beigebracht, Anwendungen künstlicher Intelligenz zu programmieren, und diese Methoden dann erfolgreich in seiner Arbeit angewendet. Kristopher ist sehr verlässlich, hochintelligent, kommunikativ und ein echter Teamplayer, der sich auch nie scheute, strukturelle Verbesserungen in der Arbeitsgruppe anzuregen.“

Dem braucht das Preiskomitee wohl nichts mehr hinzuzufügen. Deshalb freuen wir uns, Herrn Nolte nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis zu übergeben. Dieses wird stellvertretend von der Betreuerin, Andrea Thorn, durchgeführt.

Damit sind wir am Ende der Preisverleihung angekommen. Wir wünschen allen Preisträgern eine erfolgreiche Zukunft und freuen uns auf ihr Engagement in oder für unserer Gesellschaft.

Tobias Beck (Hamburg), Constantin Buyer (Stuttgart), Holger Kohlmann (Leipzig),
Tilmann Leisegang (Freiberg), Thomas Schleid (Stuttgart), Tina Weigel (Freiberg)

Ehrenmedaille der TU Dresden für Peter Paufler

Magnifizenz, Professorin Ursula M. Staudinger, Professor Peter Paufler und Dekan der Fakultät Physik, Professor Carsten Timm (v.r.n.l.)

Am 13. Juli 2022 wurden an der TU Dresden acht Ehrennadeln sowie eine Ehrenmedaille an besonders engagierte Mitglieder der Universität verliehen. Die bereits 30. Ehrenmedaille der TU Dresden erhielt in diesem Jahr Prof. Peter Paufler. Als „Gründungsdekan“ der Fakultät Physik hat er sich in den Nachwendejahren zahlreichen Herausforderungen konsequent, souverän und mutig gestellt und damit den Grundstein für die Erfolge der heutigen Fakultät gelegt. Die Ehrenmedaille der TU Dresden wird bereits seit 1999 für herausragendes Engagement und besondere Leistungen vergeben.

Die Preisverleihung im Festsaal des Rektorats wurde live im Stream übertragen und musikalisch sowie von einem Grußwort der Rektorin, Prof. Ursula M. Staudinger, begleitet. „Prof. Paufler ist ein herausragender Wissenschaftler, der sich auch durch seine unermüdliche Tätigkeit für die wissenschaftliche Gemeinschaft ausgezeichnet hat. Er war für viele Jahre Mitglied des Vorstands oder Vorsitzender bedeutender wissenschaftlicher Gesellschaften, z. B. Vorsitzender der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft und später der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie. Prof. Paufler erhielt zahlreiche Auszeichnungen. Die vielleicht befriedigendste für einen Kristallographen war die Benennung eines Minerals nach ihm (Pauflerit: $VOSO_4$, Vanadylsulfat) im Jahr 2005“, führte Prof. Carsten Timm, Dekan der Fakultät Physik der TU Dresden, in seiner Laudatio aus.

Dirk C. Meyer, Freiberg

HERBERT PÖLLMANN

30.06.1956 – 05.05.2022

Er hat sein Leben den Mineralen und Steinen gewidmet; es war eine Passion, die ihn von Jugend an geleitet hat. Am 5. Mai ist Prof. Dr. Dr. habil. Herbert Pöllmann im Alter von 65 Jahren verstorben.

Herbert Pöllmann wurde am 30. Juni 1956 am Fuße des Teichelbergs in der Gemeinde Waldsassen in der Oberpfalz geboren. Er besuchte das Keplergymnasium in Weiden. 1975 nahm er das Studium der Mineralogie in Erlangen auf und schloss es 1981 mit dem Diplom ab. Sein akademischer Lehrer war unter anderen Prof. Dr. Hans-Jürgen Kuzel, der eine praxisnahe Ausbildung vermittelte. Im Verlauf des Studiums und der nachfolgenden Dissertation ergaben sich die vielfältigen fachlichen Vertiefungsrichtungen in der Kristallographie, der Kristallchemie, den Werkstoffwissenschaften und der angewandten und technischen Mineralogie. In Erlangen wurde Herbert Pöllmann 1984 mit einer Arbeit über Schadstoff-einwirkungen und Kristall-Neubildungen in hydraulischen Bindemitteln promoviert; dort habilitierte er sich 1991 mit mineralogisch-kristallographischen Untersuchungen zu Hydratationsprodukten der Aluminat-Phasen hydraulischer Materialien.

1994 nahm Herbert Pöllmann den Ruf auf die Professur „Mineralogie und Geochemie“ an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg an. Mit seinen ebenfalls zwischen 1993 und 1995 berufenen Kollegen prägte er das neu gegründete Institut für Geologische Wissenschaften und das Geiseltalmuseum maßgeblich mit. Seine umfangreichen wissenschaftlichen Untersuchungen fanden ihren Niederschlag in thematisch vielfältigen, zahlreichen und innovativen Publikationen in verschiedensten Fachzeitschriften und von ihm editierten Büchern. Neben den vielen mineralogischen und technischen Fortschritten gehörte zu den Ergebnissen seiner Forschung auch die Neuentdeckung und Charakterisierung von fünf Mineralen.

Nahezu immer gelang es ihm bei seinen Reisen, zusätzlich Lagerstätten zu besuchen, von denen er ausgesuchte Minerale mitbrachte. Seine anfängliche Liebe zu den Basalten weitete sich im Laufe der Zeit auf viele weitere mineralogische Vorkommen aus, darunter besonders die Granitpegmatite, die ihn bei seinen vielen Reisen nach Brasilien immer aufs Neue begeisterten.

Darüber hinaus bereiste er fast den gesamten pazifischen Feuerring und sammelte mit Leidenschaft Vulkanite und Pyroklastite. Für die Fachsektion Angewandte Mineralogie der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft & die Fachsektion Technische Kristallographie der Deutschen Kristallographischen Gesellschaft und weitere internationale Fachgesellschaften war er als Vorsitzender, langjähriger Schriftleiter oder in anderen Funktionen tätig.

Alle Freundinnen und Freunde aus der gesamten Arbeitsgruppe Mineralogie und Geochemie, dem Institut für Geowissenschaften und Geographie sowie der Naturwissenschaftlichen Fakultät III der Martin-Luther-Universität werden sein Andenken in tiefem Dank bewahren. In diesen schweren Stunden stehen wir an der Seite seiner Frau Maria und seines Sohnes Peter.

Dorothee Mertmann, Stefan Stöber, Christof Lempp, Reinhard R. Wegner, Michael Stipp

ANKÜNDIGUNGEN

Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2023

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 Ihre 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 den Vorsitzenden des Preiskomitees:

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

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Webseite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie 2023 in Frankfurt statt.

Einsendeschluss: **30. November 2022**

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2023

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 **30.11.2022** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

Prof. Dr. Norbert Sträter
Vorsitzender des Preiskomitees
Universität Leipzig
Institut für Bioanalytische Chemie
E-Mail: *strater@bbz.uni-leipzig.de*

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL-HERMANN-MEDAILLE 2023

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.

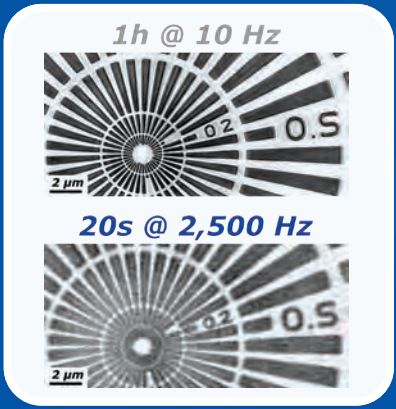
Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2022** zuzusenden.

Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

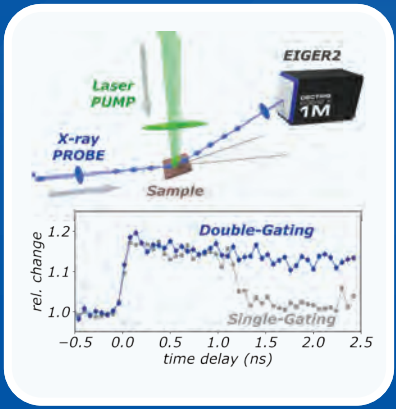
Prof. Dr. Robert Dinnebier
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstraße 1
70569 Stuttgart
Tel.: 0711 689 1503
E-Mail: *r.dinnebier@fkf.mpg.de*

NEW EIGER2
DISCOVER THE UPGRADE

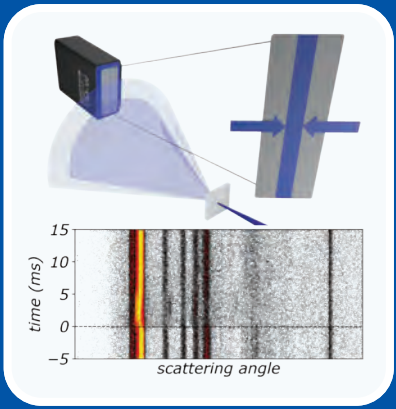
DECTRIS
detecting the future



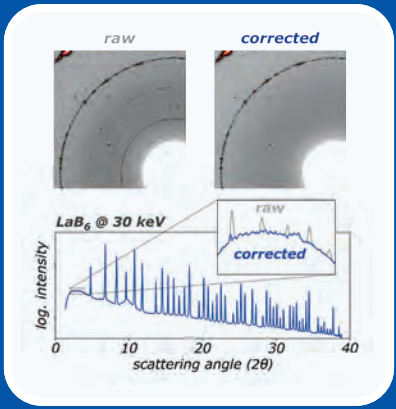
8-Bit Readout



Double-Gating Mode



Lines-ROI Mode



STREAM2

find out more...

Aufruf zu Nominierungen für den Lieselotte-Templeton-Preis 2023

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen auch im Jahr 2023 herausragende Studienleistungen (z. B. Bachelor-, Master-, Diplomarbeiten, Staatsexamen oder vergleichbare Projektarbeiten) gewürdigt werden, in denen Methoden und Aspekte der Kristallographie erfolgreich angewendet wurden. Der Preis wird – wie auch schon im letzten Jahr – auf dem Ehrenabend der 31. Jahrestagung der DGK, dann in Frankfurt am Main, verliehen.

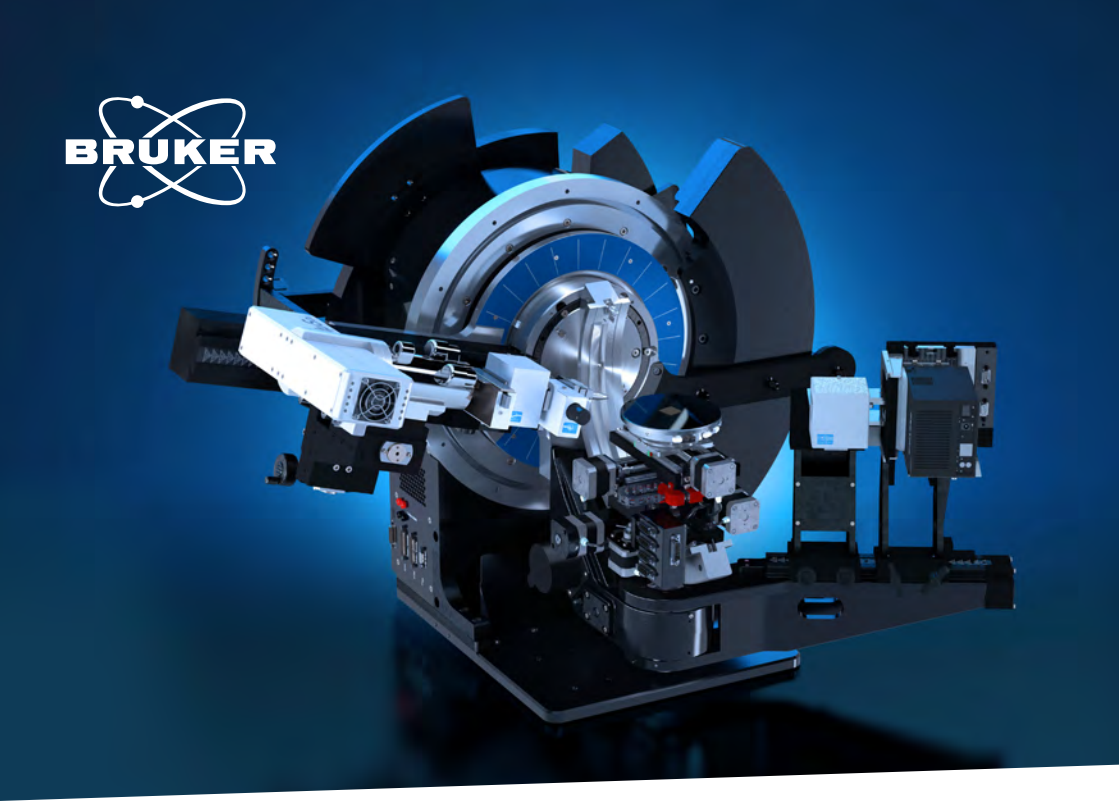
Der Preis wird jährlich an bis zu maximal drei Preisträger*innen vergeben. Er besteht je aus einer Urkunde, der Finanzierung der Teilnahme an der Jahrestagung inklusive Konferenzdinner und der Übernahme der Reisekosten gemäß Bundesreisekostengesetz bis zu maximal 500 Euro und einer dreijährigen Mitgliedschaft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

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

Die Vorschläge können vom Betreuenden, von den Studierenden oder von Dritten im Namen des Betreuenden/Studierenden erfolgen und müssen vollständig sein. Bitte senden Sie Vorschläge (1 PDF-Dokument, max. 10 MB) mit einem Gutachten des Hochschullehrenden, einer Zusammenfassung des Studierenden (jeweils maximal eine A4-Seite, allgemeinverständlich), der entsprechenden Abschlussarbeit sowie einem Lebenslauf des Studierenden per E-Mail mit dem Betreff „Lieselotte-Templeton-Preis“ an den Vorsitzenden des Preiskomitees:

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

Einsendeschluss: 30. November 2022



X-RAY DIFFRACTION

D8 DISCOVER Plus

High performance and versatile XRD solutions

- **Maintenance-free ATLASTM goniometer:**
  IμS microfocus source; standard X-ray sources up to 3 kW; 6 kW high efficiency turbo X-ray source. (TXS-HE). Highest guaranteed 2θ accuracy.
- **Optional non-coplanar arm:**
  In-plane diffraction up to 160° with minimum stepsize 0.001°.
  Optical angular encoders for highest accuracy.
- **Range of Eulerian Cradles and XYZ stages:**
  Samples up to 300 mm size and 50 kg weight.
- **Dedicated optics:**
  MONTEL^{Plus} PATHFINDER^{Plus} μMASK^{Plus}
- **Top performance detectors for 0D/1D/2D:**
  Energy-dispersive LYNXEYE XE-T detector with < 380 eV energy resolution.
  EIGER2 R 250/500 K with 75 μm pixel size and high dynamic range of 3.6×10^6 cps/pixel.

For more information, visit **bruker.com/xrd**

Tagungen und Termine

Oktober 2022

03.10. – 05.10.2022 **2nd Joint Meeting of the Young Crystallographers and Young Crystal Growers**
Freiberg

Kontakt: *https://dgk-home.de/aks/jkyc/freiberg-2022/*

05.10. – 06.10.2022 **DGKK-Arbeitskreistreffen – AK Massive Halbleiter**
Freiberg

Kontakt: *https://www.dgkk.de/images/dgkk/pdf/Einladung2022_DGKK-AK_Massive_HL.pdf*

03.10. – 07.10.2022 **Magnetic Structure Determination from Neutron Diffraction Data (MagStr)**
Oak Ridge, Tennessee, USA

Kontakt: *https://conference.sns.gov/event/339/*

16.10. – 22.10.2022 **School and Conference on Analysis of Diffraction Data in Real Space**
Grenoble, Frankreich

Kontakt: *https://workshops.ill.fr/event/306/*

30.10. – 02.11.2022 **AsCA2022: 17th Conference of the Asian Crystallographic Association**
Jeju, Südkorea

Kontakt: *http://www.asca2022.org/*

November 2022

06.11. – 11.11.2022 **EMBO Practical Course: Volume Electron Microscopy by Automated Serial SEM**
Lausanne, Schweiz

Kontakt: *https://meetings.embo.org/event/21-serial-sem*

28.10. – 30.10.2022 **V Meeting of the Latin American Crystallographic Association**
San José, Costa Rica

Kontakt: *aaraya@cenat.ac.cr*

Dezember 2022

06.12. – 10.12.2022 **2022 IUCr High Pressure Workshop "Advanced High Pressure Crystallography"**
Chicago, USA

Kontakt: *https://gsecars.uchicago.edu/education-and-outreach/2022-iucr-high-pressure-workshop-advanced-high-pressure-crystallography*

11.12. – 16.12.2022 **5th International Conference on Soft Materials**
Jaipur, Indien

Kontakt: *https://www.smrsi.org/icsm2022/index*

Überblick 2023

27.03. – 30.03.2023 **31st Annual Meeting of the German Crystallographic Society (DGK)**
Frankfurt am Main

Kontakt: *https://dgk-conference.de*

19.03. – 23.03.2023 **Neutron and X-Ray Scattering in Materials Science**
San Diego, California, USA

Kontakt: *https://www.tms.org/AnnualMeeting/TMS2023*

26.03. – 31.03.2023 **DPG Spring Meeting: Section Condensed Matter**
Dresden

Kontakt: *https://www.dpg-physik.de/aktivitaeten-und-programme/tagungen/fruehjahrstagungen/2023*

18.06. – 24.06.2023 **8th European Crystallographic School 2023**
Berlin

Kontakt: *http://ecs8.ecanews.org*

22.08. – 29.09.2023 **26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2023)**
Melbourne, Australien

Kontakt: *https://iucr2023.org/*

DGK-HOMEPAGE

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*

DMG-HOMEPAGE

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*

DGKK-HOMEPAGE

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

http://www.dgkk.de

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

WWW-Administratoren:

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

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

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

An den
Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
Prof. Dr. Thomas Schleid

Ich möchte als Mitglied in die DGK aufgenommen werden.

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

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

Name: ..... Vorname(n): .....

Geburtsdatum: .....

Dienstanschrift*:

Universität/Firma: .....

Institut/Abteilung: .....

Straße: .....

Ort: ..... PLZ: ..... Land (falls ≠ D): .....

Telefon: ..... E-Mail: .....

Privatanschrift*:

Straße: .....

Ort: ..... PLZ: ..... Land (falls ≠ D): .....

Telefon: ..... E-Mail: .....

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

Jahresbeitrag:

Der Jahresbeitrag richtet sich nach der geltenden Beitragsordnung.

Die Bankverbindung der DGK ist:
Sparda-Bank Hamburg, IBAN: DE83 2069 0500 0000 6085 99, SWIFT (BIC): GENODEF1S11

Bevorzugt sollte die Beitragszahlung über Bankeinzug erfolgen.
Füllen Sie dazu bitte die umseitige Einzugsermächtigung aus.

Ich möchte Mitglied der umseitig angekreuzten Arbeitskreise sein.

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

Ort, Datum: ..... Unterschrift: .....

Einzugsermächtigung

Gläubiger-Identifikationsnummer der DGK: DE48ZZZ00001148361

Mandatsreferenz: wird separat mitgeteilt

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

Kontoinhaber Name: .....
(wie bei der Bank angegeben)

Bankinstitut: .....

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

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

Ort, Datum: ..... Unterschrift: .....

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

AK 1	[ ]	Biologische Strukturen
AK 2	[ ]	Hochdruck-Kristallographie
AK 3	[ ]	Elektronenmikroskopie
AK 4	[ ]	Nichtkristalline und Partiellkristalline Strukturen
AK 5	[ ]	Kristallphysik
AK 6	[ ]	Molekülverbindungen
AK 7	[ ]	Neutronenstreuung
~~AK 8~~		(seit 3/2003 zusammengelegt mit AK 11)
AK 9	[ ]	Theoretische Kristallographie
AK 10	[ ]	Mikroskopie
AK 11	[ ]	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 erhoben, die Pränotifikation erfolgt über das Mitteilungsheft.

Der Jahresmitgliedsbeitrag ergibt sich aus folgender Beitragstabelle:

A	Ordentliche Mitglieder	35 € (+ 5 € Spende[1])	
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[1])	auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder	nach Vereinbarung mit dem Vorstand[2]	

[1] Die Spende wird für das Preisgeld für den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen und nicht spenden möchten, müssen Widerspruch einlegen.

[2] Für eine unpersönliche Mitgliedschaft kommerzieller Firmen in der DGK gilt derzeit ein Beitragssatz von 200 €.

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 22.12.2021 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 15. März 2022 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.