



Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 53

August 2023





Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur: Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). Sie erscheinen zur Zeit jährlich. 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., Freiberg Instruments GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG, 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 Strukturbioogie
Justus-von-Liebig-Weg 11, 37077 Göttingen
Tel: 0551 39 14072, Fax: 0551 39 14082
E-Mail: rficner@gwdg.de

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

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

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@www.tu-freiberg.de

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

endlich hat es geklappt und wir konnten auch unsere nationale „31. DGK-Jahrestagung“ vom 27. bis 30. März 2023 in Frankfurt am Main als komplette Präsenzveranstaltung stattfinden lassen, nachdem dies auf europäischer Ebene bereits beim „33. European Crystallographic Meeting“ (ECM 33) vom 23. bis 27. August 2022 in Versailles (Frankreich) mit über 900 Teilnehmern gelungen war. In Frankfurt waren es 350 und Prof. Dr. Stefan Knapp, Prof. Dr. Martin U. Schmidt und Prof. Dr. Björn Winkler haben es mit ihrem Organisationsteam geschafft, so etwas wie Festival-Atmosphäre zu schaffen, nach der allzu langen Zeit zweijähriger Abstinenz. Endlich wieder „live“ auf befreundete, kollegial verbundene und studentische Mitglieder unserer Kristallographenzunft zu treffen, um mit ihnen nicht nur auf dem zünftigen Gesellschaftsabend im „Schuch's Restaurant“ (Alt-Praunheim) eine neue, weil schmerzlich vermisste Geselligkeit erleben zu dürfen – ein unschätzbare Kulturgut. Dadurch, dass im Nachgang zur Tagung auch noch ein erstes DGK-GDCh-Vernetzungstreffen stattfinden konnte, was mir stets ein großes Anliegen war, rundete sich der insgesamt hervorragende Tagungsverlauf optimal ab. Vielen Dank dafür!

Vor der Tür steht die im australischen Winter 2023 auszutragende 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“ auf dem fünften Kontinent einfinden und einer großartigen Zeit im Land „Down Under“ entgegensehen können. Einmal mehr hat die DGK fünf Reisestipendien ausgelobt, um junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler daran teilhaben zu lassen. Ganz besonders steht hier für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie im Vordergrund, dass wir mit unserer Bewerbung um die Ausrichtung der 28. IUCr-Konferenz im Jahre 2029 in der deutschen Hauptstadt Berlin erfolgreich sein wollen. Viel Glück dabei!

Die Reorganisation und Verschlankung der DGK-Arbeitskreise von ehemals knapp zwanzig auf nunmehr knapp zehn (AK 1: Junge Kristallographen, AK 2: Lehre in der Kristallographie, AK 3: Experimentelle Methoden, AK 4: Theoretische Methoden, AK 5: Biologische Kristallographie, AK 6: Chemische Kristallographie, AK 7: Physikalische Kristallographie, AK 8: Mineralogische Kristallographie, AK 9: Materialwissenschaftliche Kristallographie) ist erfolgreich vollzogen worden und dabei entstanden wunschgemäß tatsächlich kompaktere Einheiten mit erhöhter Strahl- und Schlagkraft. Alles Gute für die Zukunft!

Nachdem auf der letzten DGK-Jahrestagung in Frankfurt durch Wahlen auch die Preiskomitees neu sortiert worden sind, steht der Preisvergabe an würdige Kandidaten im Jahre 2024 am Ehrenabend der „32. DGK-Jahrestagung“ vom 18. bis 21. März 2024 in Bayreuth nichts mehr im Wege. An dieser Stelle gelten den lokalen Organisatoren Prof. Dr. Natalia Dubrovinskaja, Prof. Dr. Sander van Smaalen und Prof. Dr. Leonid Dubrovinsky samt ihrem Team in unser aller Namen die besten Wünsche für dieses Unterfangen. Auch auf das „34. European Crystallographic Meeting“ (ECM 34) vom 26. bis 31. August 2024 in Padua (Italien) soll an dieser Stelle noch hingewiesen werden, um bereits jetzt bei Ihnen die Vorfreude auf den kommenden Tagungssommer zu wecken. Ich werde dort schon nicht mehr als Vorsitzender der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) fungieren, denn bereits fünf Monate zuvor soll in Bayreuth turnusmäßig meine Nachfolge geregelt werden. Vor knapp drei Jahren als bekennender Dilettant für dieses Amt angetreten, grüße ich Sie nun an dieser Stelle ein letztes Mal zum Ausklang und will mich mit folgenden Worten des indischen Dichters und Philosophen Rabindranath Tagore von Ihnen verabschieden: „Ich schlief und träumte, das Leben sei Freude. Ich erwachte und sah, das Leben war Pflicht. Ich handelte und siehe, die Pflicht ist Freude!“ In diesem Sinne: Vielen Dank für die fruchtbare Zusammenarbeit, viel Erfolg für den weiteren Weg und Glück auf!

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 28.03.2023	9
Anlage zu Punkt 6.2: Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees	17
Anlage zu Punkt 6.3: Bericht des Schatzmeisters	21
Rückblick auf die 31. Jahrestagung der DGK	23
Bericht vom DGK-GDCh-Vernetzungstreffen in Frankfurt am Main	25
European Crystallography School ECS8	28
ECS8 Experience Report	32
Alle nannten sie Dorothy: Dorothy Hodgkin und die Struktur von Insulin	34

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht zu den Aktivitäten des AK 12 „Spektroskopie“	41
20. DMG-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“	43
Bericht des AK 21 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“	46

Personalia:

Jubilare 2023	51
Verstorbene Mitglieder	54
Will-Kleber-Gedenkmünze 2023 an Thomas Weber	55
Carl-Hermann-Medaille 2023 an Rolf Hilgenfeld	57
Lieselotte-Templeton-Preis 2023	60
In Erinnerung an Karl Fischer	65

Ankündigungen:

32 nd Annual Meeting of the DGK	71
Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2024	72
Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2024	74
Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2024	76
Ausschreibung Lieselotte-Templeton-Preis 2024	78
Tagungen und Termine	80
Homepages von DGK, DMG und DGKK	85
Aufnahmeformular	87
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	89
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten	90

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

AM 28.03.2023
IM AUDITORIUM OSZ H3 AUF DEM CAMPUS RIEDBERG
DER GOETHE-UNIVERSITÄT FRANKFURT

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Thomas Schleid, eröffnet die Sitzung um 12:00 Uhr.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird durch eine Zählung der Teilnehmer festgestellt. Nach §9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 1026 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 17.03.2022, welche als Videokonferenz im Rahmen der Jahrestagung abgehalten wurde, wird – wie in Heft 52 der „Mitteilungen der DGK“ ab Seite 9 veröffentlicht – ohne Änderungen angenommen.

5 Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

In Gedenken an die verstorbenen Mitglieder wird eine Schweigeminute eingelegt.

6 Berichte

6.1 Bericht des Vorsitzenden

Thomas Schleid dankt Stefan Knapp, Martin Schmidt und Björn Winkler für die Vorbereitung der Jahrestagung. Als erste vor Ort stattfindende Tagung seit mehreren Jahren mussten auch diesmal besondere Herausforderungen überwunden werden; der bundesweite Bahnstreik am Eröffnungstag ist dabei das Tüpfelchen auf dem i.

Es kommen jetzt gleich zwei Projekte zum Abschluss, die seit mehreren Jahren die DGK beschäftigen. Zum einen der Druck einer neuen Kristallographiebroschüre. Dieses Projekt wurde noch unter dem Vorsitz von Susan Schorr initiiert und liegt jetzt fertig gedruckt zur Verteilung bereit. Zum anderen die Reorganisation der Arbeitskreise der

DGK, die nach jahrelanger Diskussion auf dieser Mitgliederversammlung zum Beschluss steht.

6.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Thorsten Gesings Bericht liegt schriftlich vor; er ist dem Protokoll als Anhang beigelegt. Insbesondere wird auf die vorgeschlagenen deutschen Kandidaten für die Kommissionen der IUCr hingewiesen. Die Unterstützung des Nationalkomitees für die Bewerbung der DGK um die Ausrichtung der IUCr 2029 wurde eingereicht.

6.3 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann berichtet; die Finanzaufstellung ist dem Protokoll als Anhang beigelegt. Die größte einzelne Ausgabe war die Kristallographie-Broschüre, welche jetzt fertiggestellt ist. Darüber hinaus wurde die Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin um weitere 5.000 Euro auf 20.000 Euro aufgestockt. Die Förderung der Arbeitskreisaktivitäten ist wieder angelaufen. Insgesamt ging das Guthaben der DGK um 7.244 Euro zurück, was aber auf Sondereffekten beruht. Die finanzielle Situation ist gut.

6.4 Bericht der Kassenprüfer

Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch erläutern ihren schriftlich vorliegenden Kassenprüfungsbericht: Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie für das Geschäftsjahr 2022 wurde von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) und Ullrich Pietsch (Universität Siegen) am 17. März 2023 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 uns 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 2022 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

Ende 2022 erfuhr das Kapital der DGK eine Abnahme von mehr als 7.000 € und beträgt nun etwas weniger als 52.000 €. In Anbetracht der Höhe des Guthabens befürworten wir ausdrücklich die Aufstockung der zweckgebundenen Rücklage zur Unterstützung der deutschen Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr2029 um weitere 5.000 €.

6.5 Bericht des Schriftführers

Daniel Többsen berichtet: Die DGK hat derzeit 1038 Mitglieder, davon 228 Frauen, 798 Männer und 12 unpersönliche Mitglieder. Leider bedeutet dies, dass die Mitgliederzahl gegenüber dem Vorjahr um 18 geschrumpft ist. Dies liegt vor allem an der Altersstruktur der Mitgliedschaft; von den persönlichen Mitgliedern sind derzeit 327 älter als 65 Jahre. Dies ist eine Folge der zahlenstarken Gründergeneration.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Claudia Weidenthaler berichtet in Vertretung von Jürgen Schreuer:

- Im Berichtszeitraum fand am 24./25.02.2023 in Bad Honnef die Frühjahrssitzung des Vorstands und Beirats der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) statt.
- Zum 01.01.2023 hat Horst Marschall (Frankfurt) den Vorsitz der DMG von Friedhelm von Blanckenburg (Potsdam) übernommen. Die nächsten Wahlen von Vorstand und Beirat sind im Herbst 2023 fällig.
- Entsprechend dem auf der Mitgliederversammlung in Köln erteilten Mandat verhandelt der Vorstand weiterhin mit Vertretern der DGG, DGGV und PalGes, um die mögliche Bildung einer gemeinsamen Gesellschaft auszuloten.
- Die Projektgruppe *GetStarted*, die bereits jetzt als Nachwuchsgruppe der DMG wahrgenommen wird, soll als Arbeitskreis in die Gesellschaft integriert werden. Zu den Zielen gehört u. a. die Vermittlung von Karriereperspektiven für Absolventen bzw. Absolventinnen mit mineralogischem Schwerpunkt.
- Der pauschale Reisekostenzuschuss für Studierende, die an Doktorandenkursen bzw. Jahrestagungen der DMG teilnehmen und keine andere Unterstützung erhalten, wird auf 100 Euro erhöht.
- Der Mineralogische Lehrkoffer (MILEKO) für Schulen/Lehrer ist sehr erfolgreich und soll weiter aufgelegt werden. Inzwischen sind 6 verschiedene Module erhältlich.
- Die Umwandlung des *European Journal of Mineralogy* (EJM) in eine *Open Access* Zeitschrift war erfolgreich. Für DMG-Mitglieder liegen die Preise aktuell bei 45 Euro pro Druckseite.
- An Doktorandenkursen finden statt:
 - „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie“, Ruhr-Universität Bochum, 30.05. – 02.06.2023
 - „In-situ-Analyse von Isotopen und Spurenelementen mit ICP-MS“, Universität Hannover, 25.09. – 29.09.2023
 - Weitere folgen; eine aktuelle Liste ist zu finden unter: <https://www.dmg-home.org/aktuelles/doktorandenkurse>.
- An zukünftigen Tagungen sind zu erwähnen:
 - 03.–08.09.2023: 175 Jahre DGGV, Berlin – bedeutend wegen Nähe zu politischen Entscheidungsträgern
 - 17.–21.09.2023: MinWien2023, Wien, Österreich – Gemeinschaftstagung ÖMG-SMS-DMG, <https://minwien2023.univie.ac.at>
 - 18.–24.09.2024: emc², Dublin, Irland – 4th European Mineralogical Conference, <https://emc-2024.org>

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

David Rafaja kann leider nicht anwesend sein. Aufgrund der leider notwendigen Verschiebung unserer Jahrestagung findet diese gleichzeitig mit der DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) statt.

6.8 Bericht des Kontaktes zur GDCh

Thomas Schleid berichtet in Vertretung: Im Anschluss an die Jahrestagung findet ein Vernetzungstreffen statt.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Hartmut Stöcker berichtet schriftlich: Die Redaktion der DGK-Mitteilungen dankt allen Beitragenden, die das sehr umfangreiche Heft 52 mitgestaltet haben. Auch den treuen Werbekunden sei gedankt, für ihre oft langjährige finanzielle Unterstützung. Wir hoffen auch für das nächste Heft wieder auf engagierte Autoren und sind für alle Beiträge offen. Das Heft 53 soll dann im Sommer erscheinen. Als Redaktionsschluss ist der 31. Mai 2023 vorgesehen.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Die Webseite der DGK wurde sowohl technisch als auch im Design modernisiert. Insbesondere ist sie jetzt für die Darstellung auf Mobiltelefonen geeignet.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird per Akklamation 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 Max-von-Laue-Preises verwendet. 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 Max-von-Laue-Preises verwendet. Mitglieder, die am Einzugsverfahren teilnehmen, und nicht spenden möchten, müssen Widerspruch einlegen.

Diese Beitragsordnung wird ohne Gegenstimmen angenommen.

Aufgrund der allgemeinen Kostensteigerung wird es voraussichtlich im nächsten Jahr notwendig sein, die Beiträge zu erhöhen. Diese Erhöhung könnte sich im Bereich von 10 € für Vollmitglieder bewegen.

Es wird aus dem Plenum der Vorschlag gemacht, die Begrenzung des ermäßigten Beitragsstatus für Doktoranden aufzuheben oder zu verlängern, eventuell bis zum 33. Lebensjahr. Die Abstimmung hierüber soll auf der nächsten Mitgliederversammlung erfolgen.

9 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

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

10 Wahl des Preiskomitees für die Carl-Hermann-Medaille

Alle vier Mitglieder des Komitees mussten neu gewählt werden. Von den bisherigen Mitgliedern traten Oliver Oeckler und Manfred Weiss zur Wiederwahl an, Robert Dinnebiel und Karen Friese schieden turnusgemäß aus. Die Wahl erfolgte als geheime Wahl in einem einzelnen Wahlgang, wobei jedes Mitglied bis zu vier Stimmen für verschiedene Kandidaten abgeben konnte. Das Wahlergebnis war:

- Matthias Epple 31 Stimmen
- Wolfgang Morgenroth 27 Stimmen
- Melanie Nentwich 52 Stimmen
- Oliver Oeckler 44 Stimmen
- Ullrich Pietsch 33 Stimmen
- Manfred Weiss 59 Stimmen

Damit wurden Melanie Nentwich, Oliver Oeckler, Ullrich Pietsch und Manfred Weiss in das Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille gewählt.

11 Wahl des Preiskomitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze

Alle vier Mitglieder des Komitees mussten neu gewählt werden. Von den bisherigen Mitgliedern trat Norbert Sträter zur Wiederwahl an. Thomas Schleid, Guntram Jordan und Leonore Wiehl schieden turnusgemäß aus. Die Wahl erfolgte als geheime Wahl in einem einzelnen Wahlgang, wobei jedes Mitglied bis zu vier Stimmen für verschiedene Kandidaten abgeben konnte. Das Wahlergebnis war:

- Matthias Epple 42 Stimmen
- Wolfgang Morgenroth 37 Stimmen
- Martin Schmidt 44 Stimmen
- Susan Schorr 47 Stimmen
- Norbert Sträter 57 Stimmen

Damit wurden Matthias Epple, Martin Schmidt, Susan Schorr und Norbert Sträter in das Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze gewählt.

12 Neustrukturierung der Arbeitskreise

Thomas Schleid stellt die von Vorstand und Beirat erarbeitete neue Struktur der Arbeitskreise vor. Diese sieht insgesamt die folgenden neun Arbeitskreise vor:

- AK 1 Junge Kristallographen
- AK 2 Lehre der Kristallographie
- AK 3 Experimentelle Methoden
- AK 4 Theoretische Methoden
- AK 5 Biologische Kristallographie
- AK 6 Chemische Kristallographie
- AK 7 Physikalische Kristallographie
- AK 8 Mineralogische Kristallographie
- AK 9 Materialwissenschaftliche Kristallographie

Dieser Antrag wird nach kurzer Diskussion einstimmig angenommen.

13 Broschüre

Daniel Töbrens stellt die frisch fertiggestellte Broschüre vor. Diese enthält kurze Artikel über Anwendungen der Kristallographie und die DGK sowie Werbeanzeigen einschlägiger Firmen. Die Broschüre ist 16-seitig im Format A4 und liegt in 4000 Exemplaren auf Deutsch und 2500 Exemplaren auf Englisch vor. Gedacht ist sie zum Auslegen und Verteilen bei Seminaren, Konferenzen, Schülertagen und ähnlichen Veranstaltungen. Für Mitglieder der DGK ist sie gratis erhältlich; Interessenten wenden sich dazu bitte an den Schriftführer.

14 Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Konferenz 2029 in Berlin

Manfred Weiss berichtet: Die Entscheidung über den Ausrichter der IUCr-Konferenz 2029 erfolgt dieses Jahr in Melbourne. Eine Informationsveranstaltung für alle Konferenzteilnehmer über den Stand unserer Bewerbung findet im Anschluss an die Mitgliederversammlung statt.

15 Sonstiges

Andrea Thorn weist auf die anstehenden Wahlen zum Komitee Forschung mit Synchrotronstrahlung (KFS) hin.

16 Jahrestagung 2025

Für die 33. Jahrestagung 2025 werden Ort und Veranstalter noch gesucht.

17 Jahrestagung 2024

Natalia Dubrovinskaia berichtet über den Stand der Vorbereitungen für die 32. Jahrestagung der DGK. Diese wird vom 18. bis 21. März 2024 in Bayreuth stattfinden. *Conference Chair* ist Natalia Dubrovinskaia.

Der Vorsitzende schließt die Sitzung um 13:29 Uhr.

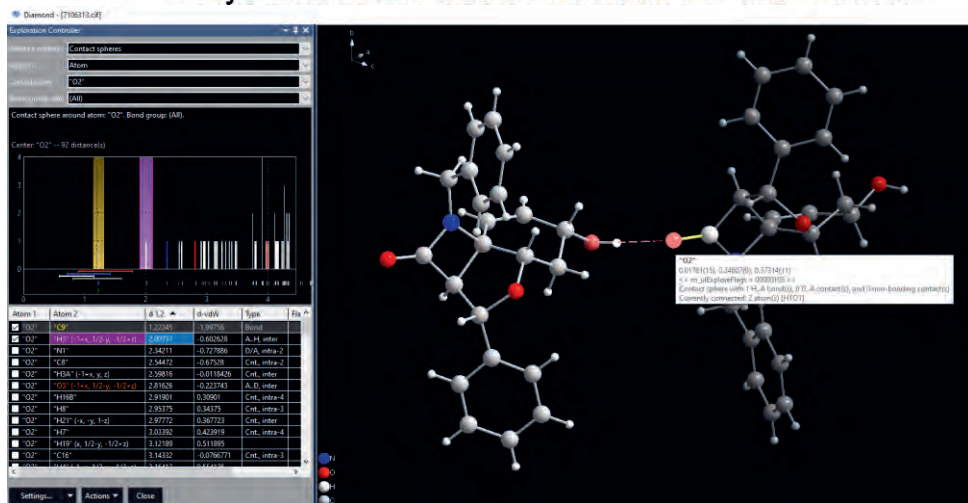


Daniel Többens
(Schriftführer)



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Version 5

Version 5 unseres Grafikprogramms **Diamond** beinhaltet eine Reihe neuer Features:

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).

Version 5 von Diamond wird im dritten Quartal 2023 erscheinen. Sie ist für lizenzierte Nutzer der aktuellen Version 4.x kostenlos.

Bis zum Erscheinungstermin ist eine zeitlich limitierte **Preview** der Version 5 mit vollem Funktionsumfang verfügbar, danach – wie bei den Vorgängerversionen üblich – eine Demoversion.

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



**CRYSTAL
IMPACT**

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

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

ANLAGE ZU PUNKT 6.2:

BERICHT DES VORSITZENDEN
DES NATIONALKOMITEES

MITGLIEDER NATIONALKOMITEE 2021–2024

- Prof. Dr. Thomas Schleid (Vorsitzender DGK): *thomas.schleid@iac.uni-stuttgart.de*
- Prof. Dr. Natalia Dubrovinskaia: *natalia.dubrovinskaia@uni-bayreuth.de*
- Prof. Dr. Helmut Ehrenberg: *helmut.ehrenberg@kit.edu*
- Prof. Dr. Thorsten M. Gesing (Vorsitzender NK): *gesing@uni-bremen.de*
- Dr. Andrzej Grzechnik: *grzechnik@jfk.rwth-aachen.de*
- Dr. Anna-Lena Hansen: *anna-lena.hansen@kit.edu*
- Prof. Dr. Nobert Sträter: *strater@bbz.uni-leipzig.de*

IUCr

- Die Mitglieder der Kommissionen der IUCr wurden am 12.07.2022 für die Wahl bei der IUCr-Tagung in Melbourne 2023 für die Periode 2023–2026 vorgeschlagen (Liste siehe unten).
- Die IUCr-Tagung 2026 findet in Calgary, Kanada statt.
- Es gibt eine breite Unterstützung durch die Europäischen Nationalkomitees für die Bewerbung Berlins als Tagungsort 2029.
- Manfred Weiss (Berlin) bleibt bis 2026 als Mitglied im *Executive Committee* der IUCr gewählt.

ECA

- Die aktuelle Version der ECA-Satzung 2021 ist unter <https://ecanews.org/about-eca/statutes-and-by-laws> einzusehen.
- Das aktuelle *ECA Executive Committee* ist unter <https://ecanews.org/about-eca/executive-committee> einzusehen.
- Die 8. *European Crystallography School* (ECS-8) findet vom 18. bis 24. Juni 2023 am BESSY II statt. Ein Antrag zur finanziellen Beteiligung der IUCr wird vom Vorsitzenden des NK am 22.02.23 durch ein entsprechendes Schreiben unterstützt.

TAGUNGEN UND WORKSHOPS

- ECS-8: Berlin, 18.–24. Juni 2023
- ACA-73: Baltimore, MD, USA, 7.–12. Juli 2023
- IUCr-26: Melbourne, Australien, 22.–29. August 2023
- ECM-34: Padova, Italien, 20.–24. August 2024
- AsCA2024: Malaysia, Dezember 2024
- ECM-35: Lviv, Ukraine, August 2025
- IUCr-27: Calgary, AB, Kanada, 11.–18. August 2026

BEWERBUNG IUCr 2029 BERLIN

- Manfred Weiss berichtet dem NK regelmäßig über die Vorbereitungen. Details unter: <https://iucr2029.org>
- NK-Mitglied Anna-Lena Hansen wurde in das Organisationskomitee für die IUCr 2029 Bewerbung berufen.
- NK-Mitglieder unterstützten den Ausstellungsstand bei der IUCr-Konferenz in Melbourne.

Thorsten M. Gelsing, Bremen

Commission	Commission members 2020–2023	Vorschläge DGK 2023–2026
Aperiodic Crystals	Tilman Leisegang (Freiberg)	Ella Mara Schmidt (Bremen) Thomas Doert (Dresden)
Biological Macromolecules	Norbert Sträter (Leipzig)	
Crystal Growth and Characterization of Materials		Christo Gugushev (Berlin)
Crystallographic Computing	Andrea Thorn (Hamburg)	Ella Mara Schmidt (Bremen)
Crystallographic Nomenclature*	Ulrich Müller (Marburg)	
Crystallographic Teaching		Lars Peters (Aachen)
Crystallography in Art and Cultural Heritage	Sebastian Bette (Stuttgart)	
Crystallography of Materials		Joachim Breternitz (Berlin)
Diffraction Microstructure Imaging	Ulrich Lienert (DESY)	
Electron Crystallography	Tatjana Gorelik (Ulm)	Ute Kolb (Mainz)
High Pressure	Natalia Dubrovinskaia (Bayreuth)	
Inorganic and Mineral Structures		
Magnetic Structures		
Mathematical and Theoretical Crystallography		
Neutron Scattering	Martin Meven (München)	Martin Meven (München)
NMR Crystallography and Related Methods	Jürgen Senker (Dortmund)	
Powder Diffraction		Martin Etter (DESY)
Quantum Crystallography	Wolfgang Scherer (Augsburg)	
Small-Angle Scattering	Emmanuel Kentzinger (Jülich)	
Structural Chemistry		
Synchrotron and XFEL Radiation	Thomas Tschentcher (XFEL)	Thomas Tschentcher (XFEL)
XAFS	Edmund Welter (DESY)	Edmund Welter (DESY)

* 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.



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 | LiNbO₃ | 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**

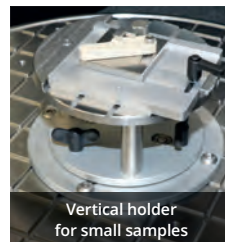
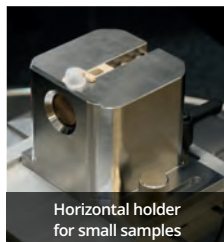
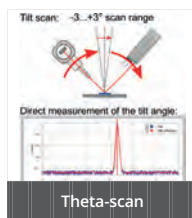
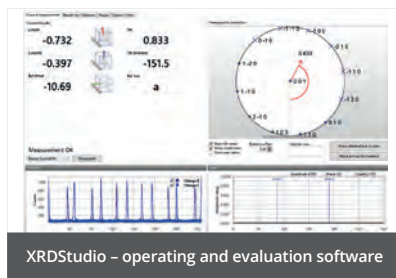
Repeatability > 99.5%

Theta-scan capability

for sophisticated research and material characterization

Transfer technology

up to 10 orientated crystals on one slicing beam



ANLAGE ZU PUNKT 6.3:

BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2022 der DGK			
Einnahmen 2022			
Mitgliedsbeiträge inkl. Laue-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2022	20.300,00 €	21.432,70 €
	Barzahler 2022	860,00 €	
	Einnahme Dauermitglieder	172,70 €	
	Spenden	60,00 €	
	Beiträge rückwirkend	40,00 €	
Zinsen und Gebühren	Rundungsfehler Bank	0,02 €	0,02 €
	Cashkonto 850	0,00 €	
Umbuchung Liebau-Preisgeld			2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	150,00 €	150,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			3.200,00 €
Summe Einnahmen			26.782,72 €
Ausgaben 2022			
Mitteilungen			-8.206,40 €
Mitgliedsbeiträge	Rücklastschriften 2021	-40,00 €	-345,00 €
	Rücklastschriften	-305,00 €	
Administration	Bankgebühren	-288,10 €	-12.232,49 €
	Stornokosten	-27,11 €	
	Kristallographie-Broschüre	-11.043,20 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-200,06 €	
	Webseite	-674,02 €	
	IUCr2029	0,00 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-200,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-3.987,39 €	-13.110,21 €
	Ausgaben	-757,82 €	
Reisestipendien	ECM Versailles	-2.000,00 €	
Liebau-Preisgeld	Umbuchungen	-2.865,00 €	
	Auszahlung	-2.000,00 €	
Max-von-Laue-Preisgeld	Andrea Thorn	-1.500,00 €	
Summe Ausgaben			-34.094,10 €
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2022			
Einnahmen	2 neue Dauermitglieder	240,00 €	240,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2022		-172,70 €
Überschuss 2022			67,30 €
Rücklage IUCr 2029			
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin			20.000,00 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2022			-7.244,08 €

Kontoführung 2022 der DGK			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	5.016,85 €	664,37 €	-4.352,48 €
Rücklage Dauerm Mitglieder 910	1.918,71 €	1.986,01 €	67,30 €
Sonderkonto AK 21	2.306,32 €	1.786,41 €	-519,91 €
Rücklage IUCr 2029	15.000,00 €	20.000,01 €	5.000,01 €
DKG-Cash 085	34.016,50 €	26.016,50 €	-8.000,00 €
Sparkasse	939,04 €	1500,04 €	561,00 €
Guthaben der DGK	59.197,43 €	51.953,34 €	-7.244,08 €

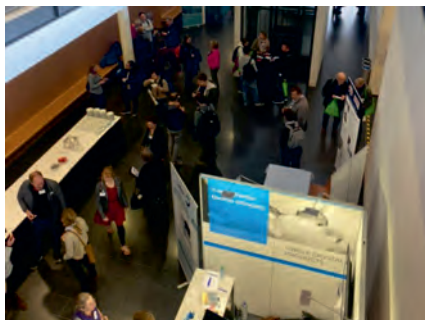
Jahresabrechnung 2022 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2022			
Zinsen	Laue-Kapital 930		0,00 €
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			0,00 €
Ausgaben 2022			
Laue-Preis 2022	Dr. Andrea Thorn		0,00 €
Summe Ausgaben (Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen)			0,00 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2022			0,00 €
Kontoführung 2022			
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 2022 Liebau-Stiftung			
Einnahmen 2022			
Zinsen	Stiftungskapital 870		0,00 €
Spenden für Preisgeld			2.865,00 €
Summe Einnahmen			2.865,00 €
Ausgaben 2022			
Liebau-Preis 2022	Prof. Dr. J. Garcia Ruiz		-2.000,00 €
Kosten Preisverleihung			0,00 €
Summe Ausgaben			-2.000,00 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2022			865,00 €
Kontoführung 2022			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Stiftungskapital 870	30.311,82 €	31.176,82 €	865,00 €
Kapital der Stiftung	30.311,82 €	31.176,82 €	865,00 €

Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr

RÜCKBLICK AUF DIE 31. JAHRESTAGUNG DER DGK

Vom 27. bis 31. März 2023 war die Goethe-Universität Frankfurt der Veranstaltungsort der 31. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK). Nach der langen, pandemiebedingten Pause, konnte sich die Kristallographie-Community erstmals wieder zusammenfinden und neue Interaktionen und Zusammenarbeiten fördern. Das hervorragende Programm, das 20 Mikrosymposien, zwei Postersitzungen und sechs Plenarvorträge umfasste, deckte alle Bereiche der Kristallographie ab.



Die Deutschen Gesellschaft für Kristallographie freut sich schon auf das nächste Treffen vom 18. bis 21. März 2024 in Bayreuth.

Stefan Knapp, Frankfurt



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



BERICHT VOM DGK - GDCh - VERNETZUNGSTREFFEN IN FRANKFURT AM MAIN

In unmittelbarem Anschluss an die 31. DGK-Jahrestagung vom 27. bis 30. März 2023 in Frankfurt am Main fand ein erstes Vernetzungstreffen zwischen Repräsentanten der DGK (vertreten durch den Vorsitzenden Prof. Dr. Thomas Schleid), der GDCh-Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung (F&M, vertreten durch den stellvertretenden Vorsitzenden Prof. Dr. Oliver Oeckler) und dem Arbeitskreis Chemische Kristallographie (ChemKrist) der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie (vertreten durch den stellvertretenden Vorsitzenden Dr. Alexander Pöthig) statt. Eine solche Veranstaltung erschien dringend erforderlich, da alle Gruppierungen ähnliche Interessen verfolgen und aus gemeinsamen Aktivitäten viel Gewinn ziehen könnten. Nach der Gründung der unabhängigen Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK), die aus der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie (AGKr) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) hervorging, war es zu Parallelentwicklungen gekommen und diverse Arbeitsgruppen blieben Tagungen fern, die für sie sehr interessant und wichtig gewesen wären. Der DGK-Arbeitskreis Kristallchemie (AK 19) hatte das Ziel, das Verhältnis zwischen den beiden Organisationen DGK und GDCh günstig zu beeinflussen und soll nun in dem neu eingerichteten AK 6 (Chemische Kristallographie) weiterleben sowie Brückenschläge mit ins Leben rufen.

Dem Vernetzungstreffen ging voraus, dass die beiden Protagonisten Schleid und Oeckler bereits einige Male bei Vorstandssitzungen der jeweils anderen Gesellschaft als offizielle Gäste teilgenommen haben und dies auch in Zukunft so beibehalten wollen. Ziele davon müssen sein, dass gemeinsame Interessen der DGK, der GDCh-Fachgruppe F&M und auch dem Arbeitskreis ChemKrist kommuniziert und abgesprochen werden. Dazu gehören Workshops zur Kristallstrukturanalyse und zu Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie, die bestehende Synergien nutzen oder neue schaffen. Alle in Frankfurt Anwesenden haben vereinbart, sich gegenseitig auf dem Laufenden zu halten. Insbesondere den „Jungen Kristallographen“ (DGK) und den „Jungen Festen“ (GDCh) ist dies eine Herzensangelegenheit.

In einem kurzen Nachmittagssymposium, bei dem Prof. Dr. Thomas Doert (TU Dresden), Dr. Sebastian Bette (MPI-FKF Stuttgart), Prof. Dr. Martin U. Schmidt (Uni Frankfurt a. M.), PD Dr. Constantin Hoch (LMU München) und Dr. Günther Thiele (FU Berlin) durch herausragende Beiträge aus ihrer eigenen Forschung unter besonderer Berücksichtigung der Relevanz einer besseren Vernetzung der beteiligten Institutionen den Keim für die nachfolgende Diskussion gelegt haben, wurden Möglichkeiten zur zukünftigen Interaktion erörtert. Als besonders wichtig wurde herausgestellt, dass man bei der Organisation und Durchführung von Tagungen eng zusammenarbeitet, indem man entsprechende Sessions gemeinsam plant, dass man den wissenschaftlichen Nachwuchs intensiv beteiligt, um eine möglichst große Motivation für zukünftige Aktivitäten zu schaffen sowie gemeinsame Interessen gemeinsam vertritt, z. B. im Zusammenhang mit Förderorganisationen und Industrie.

Es bleibt zu erwähnen, dass die bei dem Symposium angerissenen Themen aus der gesamten Breite des Fachgebiets stammten, wie die Vortragstitel „Kommensurable und inkommensurable Überstrukturen in Seltenerdmetalltelluriden“, „Microstructural Investigations on Battery Material Precursors“, „Simulation der Gitterfehler in Chinacridon, $C_{20}H_{12}N_2O_2$ “, „Röntgenstrukturanalyse von Amalgamen: Komplexität, Absorption und andere Widrigkeiten“

und „3D-gedruckte Hilfsmittel für den kristallographischen Alltag im chemischen Labor“ belegen. Die – ohnehin nur in Köpfen vorhandenen – Grenzen zwischen den Fachgebieten verschwammen auf eine wohltuende Art und Weise. Die Beiträge wurden von allen Beteiligten als sehr interessant empfunden, auch wenn sie dem eigenen Arbeitsgebiet eher fern lagen. Bei guter Stimmung wurde lebhaft diskutiert, wobei aus der Vergangenheit kolportierte Animositäten keine Rolle spielten und vielversprechende Grundlagen für eine zukünftige enge Zusammenarbeit erkennbar und ins Auge zu fassen waren. Einige unserer jungen studentischen Symposiumsteilnehmer meinten sogar, dass sie dieses Vernetzungstreffen als eines der Highlights der gesamten DGK-Tagung empfunden hätten.

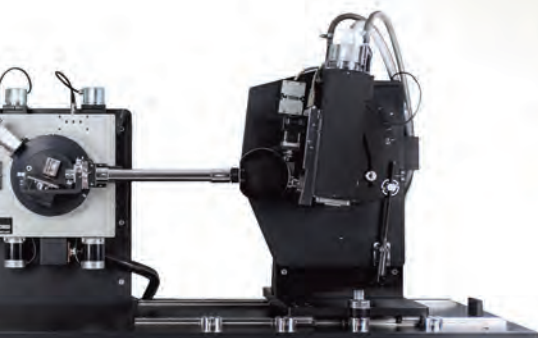
Thomas Schleid (Stuttgart) und Oliver Oeckler (Leipzig)



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

FINAL REPORT ON THE
EUROPEAN CRYSTALLOGRAPHY
SCHOOL ECS8

18.–24.06.2023, BERLIN-ADLERSHOF



The 8th European Crystallography School (ECS) took place from June 18 to 24 in Berlin-Adlershof, at the site of the BESSY II synchrotron. It was the first time that an ECS was organized in Germany and it was the first time that an ECS took place at a synchrotron facility. The topics chosen for ECS8 ranged from the basics of crystallography to applications of crystallography and in particular synchrotron radiation and crystallography. A total of 58 students (36 female, 21 male, 1 diverse) from 31 different nationalities working in 21 different countries were welcomed and treated to 24 lectures given by 22 speakers (7 female, 15 male), 10 tutorials, 3 poster sessions and a public panel discussion on science diplomacy, which was organized within the frame of the 2023 HZB user meeting. Several of the students were supported by travel grants from the IUCr, the ECA, the DGK and the AIC.

Three days before ECS8 was to begin, the hosting institute HZB suffered from a massive cyberattack. All IT services were switched off and all HZB computers were shut down, which put an enormous challenge on the organizers to re-establish communication with students, speakers, tutors, caterers, hotels, etc. Nonetheless, everybody managed to arrive safely and on time, and the school could take place, albeit with limited access to the experiments at the BESSY II storage ring, which were foreseen for some of the tutorials. While experiments with X-rays were not possible, the students got to see the instruments and were treated to a demonstration of how it would have looked. All lectures could take place as planned, except for the ones where internet access was desired. These had to happen offline.

During the three poster sessions on Sunday, Monday and Tuesday evening, the students were given the task to pick the best posters for the poster awards themselves. They divided themselves into three groups according to the three categories in which poster prizes could be won. The prizes were then announced during the social evening on Wednesday evening on the boat MS Prenzlauer Berg cruising down the Spree river. The poster prize sponsored by the PDB for the best macromolecular structure poster went to Stella Sultan from Birmingham (UK) the prize for the CCDC-sponsored poster to Erica Scarel from Trieste (Italy) and the prize sponsored by the German Society for Crystal Growth DGKK to Mateja Pisacic from Zagreb (Croatia).



The practical parts were scheduled on Tuesday and Wednesday afternoon. A total of ten practicals were put together by the organizers. One group of students went to the X-ray Core Lab of the HZB in Berlin-Wannsee, another one visited the BAM-lab in Berlin-Dahlem, another one went to the Humboldt University X-ray Core Lab in Berlin-Adlershof and another one experienced a virtual tour of the P24 beamline in Hamburg. Four groups went to the BESSY II experimental hall for tutorials at the mySPOT beamline, the KMC-2 beamline and the MX beamlines. Finally, two groups were treated to demos by the CCDC and the PDB. While it was not possible to fulfil all the wishes of the students with respect to the assignment of the practicals, most of them were very happy with the practicals they could attend and expressed their thanks.

Due to the cyberattack, lectures, handouts and fotos will be made available to the students later on.

Finally, as announced by Dominik Schaniel, ECS9 will take place in Nancy (France) from June 24-30, 2024. First information can already be gathered from <https://ecs-9.event.univ-lorraine.fr>. Stay tuned!

Manfred Weiss, Berlin



Lively discussions during the poster sessions



Enjoying the sunset over Berlin during the social dinner on a boat



X-RAY DIFFRACTION

D6 PHASER - The Benchtop Platform

Powerful. Versatile. Accessible.

- Up to 1.2 kW with internal cooling + LYNXEYE XE-T detector + Motorized beam optics
- Reflection and transmission powder XRD + Non-ambient powder diffraction + GID, XRR, Stress, Texture
- Dynamic Beam Optimization + Touch panel operation + Stage and optics exchange

Discover more at bruker.com/d6phaser

ECS8 EXPERIENCE REPORT

Last week I participated in the *European Crystallographic School* (ECS8), which is a prominent event that brought together scientists of the field from all over Europe and even further away. Due to the various scientific fields and the different experiences of the people ranging from Master students to Postdoctoral researchers, I had the opportunity to have countless inspiring discussions during the days and especially through the two poster sessions.

The lectures were designed to give firstly the necessary fundamentals about crystals, symmetry and scattering theory and then to go deeper into the details ending up by applications ranging from small molecules to macromolecular proteins.



As an aspiring scientist in the field of supramolecular organometallics and single crystal X-ray diffraction, I was eager to expand my theoretical expertise and practical experience. The lectures helped me to refresh and deepen my theoretical knowledge whereas the practical training improved my handling towards crystals and the instruments.

Furthermore, the lecturers coming from numerous fields of crystallography presented the wide range of instrumental methods using X-ray techniques, which has shown to be potentially important for analyzing the complex structures in my own research. The subsequent debates offered the possibility to discuss about specific questions of my own research with regard to the expertise of the lecturer and to get detailed explanations to emerging questions.

Lastly, I want to thank the organizing committee for the fantastic opportunity to be part of the school and the DGK, who made my participation possible in the first place.

Julian Zuber, München

SmartLab & XtaLAB Synergy-ED FOR THE BEST RESULTS FROM YOUR POWDER SAMPLE



XtaLAB Synergy-ED

Get single crystal data
from powder grains



SmartLab

High resolution powder patterns for
Rietveld refinement, pair distribution
function and SAXS analysis



ALLE NANNTEN SIE DOROTHY: DOROTHY HODGKIN UND DIE STRUKTUR VON INSULIN

Die erstmalige erfolgreiche Behandlung der Diabetes durch das Hormonprotein Insulin durch Frederick Grant Branting und Charles Best vor 100 Jahren fand medial starke Beachtung. Etwa 50 Jahre später gelang es der Arbeitsgruppe um Dorothy Crowfoot Hodgkin an der Universität Oxford in England, die Molekül- und Kristallstruktur aufzuklären. Da ich damals zeitweilig als Gast in dieser Gruppe arbeitete, will ich über diese bedeutende Leistung von Kristallographen berichten. Dabei möchte ich den Bericht auch durch Bilder aus meiner Beschäftigung mit der Philatelie verbinden.

Ein Molekül des Hormonproteins Insulin besteht aus 51 Aminosäuren, die in zwei Ketten angeordnet sind. Die beiden Ketten werden durch Disulfid-Brücken verbunden. Heute werden Strukturen von Proteinen mit Tausenden Aminosäuren in wenigen Tagen bestimmt. In den sechziger Jahren des vorigen Jahrhunderts war aber ein Molekül mit einigen Hundert Atomen in 51 Einzelbausteinen eine riesige Aufgabe. Zunächst wird in den Proteinen die Sequenz bestimmt, d. h. die Abfolge der Aminosäuren. Dies bezeichnet man als „Primärstruktur“. Die „Sekundärstruktur“ gibt die Verknüpfung einzelner Stränge, etwa über Schwefelatome bei Insulin (Disulfid-Brücke) oder Wasserstoff-Brücken, an. Eine Sequenzierung erfolgt heute auch bei einer Corona-Analyse, allerdings sind die „Spike“-Proteine um ein Vielfaches größer und der Zeitaufwand erheblich geringer. Die „Tertiärstruktur“, die die dreidimensionale Anordnung der Moleküle angibt, wird durch die Röntgenstrukturanalyse ermittelt. Schließlich gibt die Anordnung von Molekülen zueinander die „Quartärstruktur“. Grundvoraussetzung dafür sind Kristalle. Hochreines Insulin wird unter anderem von der dänischen Firma *Novo Nordisk* hergestellt. Dieses Ausgangsmaterial verwendete auch die Gruppe in Oxford. Durch Einhaltung genauer Bedingungen kristallisiert das Molekül. In Abbildung 1 sind Insulin-Kristalle auf einer dänischen Briefmarke gezeigt. Die größten Kristalle, die wir damals kristallisieren konnten, erreichten eine Länge von etwa 1 mm. Auf der Marke erkennt man die Ausbildung dreier Flächen, die um den Mittelpunkt angeordnet sind.



Abbildung 1: Insulin-Kristalle auf einer dänischen Briefmarke (Mi-Nr. 965)

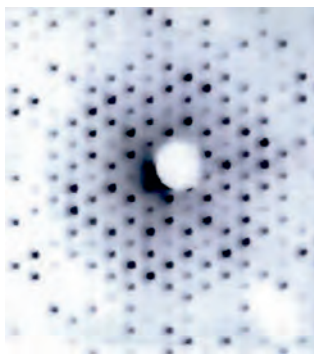


Abbildung 2: Röntgenaufnahme von Insulin-Kristallen von 1936

Verlassen wir hier den Gegenstand und wenden uns der Forscherin zu. Dorothy Mary Crowfoot (1910–1994) kam in Kairo (Ägypten), zur Welt. Ihr Vater, John Winter Crowfoot (1873–1959), war im britischen Kolonialdienst und arbeitete mit den lokalen Regierungen in Kairo und Khartum zusammen. Er und seine Frau Grace Mary Hood (1877–1957) standen sozialistischen Friedensbewegungen nahe. So lernte Dorothy schon als Kind in Ägypten andere Kulturen und soziale Grundeinstellungen kennen. Wegen der häufigen Ortswechsel der Eltern verbrachte sie viel Zeit bei Verwandten in Norfolk. Dort erlebte sie auch bestimmende Jahre ihrer Schulausbildung. Als eines von zwei Mädchen durfte sie am Chemie-Unterricht teilnehmen, bei dem sie auch Kristalle kennenlernte. Damit hatte sie zwei bleibende Prägungen für ihr Leben erhalten. So studierte sie von 1928 bis 1932 Chemie am *Somerville College*, eines von drei „Women’s Colleges“ in Oxford.

Nach dem Abschluss arbeitete sie in Cambridge im Labor von John Desmond Bernal (1901–1971) mit der Methode der Röntgenkristallographie. Die Entwicklung der Röntgenmethoden und die Strukturbestimmung von Mineralen und anorganischen Verbindungen war bereits wiederholt von der Schwedischen Akademie ausgezeichnet worden. In Cambridge arbeitete sie mit Bernal an organischen Substanzen, die wesentlich mehr Atome pro Molekül enthalten und durch den Röntgenstrahl schnell zerstört werden. Zurück in Oxford im Jahre 1934 erhielt sie eine Anstellung als Tutorin für Chemie an den drei „Women’s Colleges“. Ihre berühmteste Studentin war in den Jahren 1946/47 Margret Thatcher (1925–2013, Premierministerin 1979–1990). Promoviert wurde Dorothy 1937 in Cambridge. Gelder für ihre Forschung musste sie sich hart bei Stiftungen erkämpfen. Sie konzentrierte sich fortan auf biologisch wichtige Moleküle. Schon 1936 machte sie Röntgenaufnahmen von Insulin (siehe Abbildung 2), die die dreizählige Symmetrie der Kristalle erkennen lassen. Die Intensität der Reflexe konnte nicht genau gemessen werden, sie wurde lediglich abgeschätzt. Eine Bestimmung der Struktur war dadurch und durch den enormen Rechenaufwand nicht möglich. So löste sie die Strukturen so bedeutender kleinerer Moleküle wie Cholesterin (1941/45), Penicillin (1945/49) und Vitamin B12 (1955). Dafür wurde sie 1964 als dritte Frau nach Marie Curie und deren Tochter Irène Joliot-Curie mit dem ungeteilten Nobelpreis für Chemie ausgezeichnet. Der Text der Urkunde hebt hervor: „by X-ray techniques ... the structure of important biochemical substances“. Die Briefmarke von 1996 des Vereinigten Königreiches (siehe Abbildung 3) stellt Dorothy (jeder, auch der jüngste Student, nannte sie nur bei ihrem Vornamen) mit ihrem Modell eines Teils der Struktur von Vitamin B12 dar.



Abbildung 3: Dorothy Hodgkin auf einer der britischen EUROPA-Marken von 1996 mit Ausschnitten der Struktur von Vitamin B12.



Abbildung 4: Modell der Insulinstruktur. Drei Dimere (mit je zwei Molekülen) sind um ein Zink-Atom angeordnet.

Die Nachricht des Nobel-Komitees erreichte sie in Ghana. Ihr Mann Thomas Hodgkin, Professor für Ethnologie an der Universität Oxford, war dort als Berater des Präsidenten Nkrumah tätig. Geheiratet hatten beide 1937. Das Ehepaar bekam drei Kinder. Im Jahre 1940 litt sie unter einer rheumatischen Erkrankung, von der sie eine starke Verkrümmung der Finger behielt. Sie selbst hatte keinen Lehrstuhl, sondern eine Ehrenprofessur der *Royal Society*, deren Mitglied sie 1947 als dritte Frau wurde. Als ich 1969 als Gast zu dieser Gruppe kam, waren ihre Arbeitsräume im Keller unter dem naturwissenschaftlichen Museum, dem *Ashmolean*, untergebracht. Ein Kollege nannte dies einen „Rabbish Court“ und ich staunte, dass hervorragende Wissenschaft auch in so bescheidenen Umständen gedeihen kann. Später zog die Gruppe in das neue Gebäude für Biochemie; Professor wurde ein anderer.

Zu dieser Zeit war ich als Wissenschaftler in Grenoble (Frankreich) am Institut Laue-Langevin, das die stärkste Neutronenquelle der Welt baute und betrieb, mit dem Aufbau von Diffraktometern für Pulver und Einkristalle betraut. Das Ziel meines Aufenthaltes an der Neutronenquelle in Harwell und der Universität Oxford war es, die optimalen Parameter für Einkristalldiffraktometer zu ermitteln, um biologische Moleküle mit Neutronen zu untersuchen. Insbesondere sollten die Positionen von Wasserstoffatomen bestimmt werden. Dies ist mit Röntgenstrahlen schwierig, da Wasserstoff nur ein geringes Streuvermögen besitzt. Mit Neutronen dagegen ist sein Beitrag zur gemessenen Intensität erheblich. Methodisch wollte ich die anomale Dispersion, die einige Elemente bei der Neutronenstreuung aufweisen, zur Phasenanalyse und damit zur Strukturbestimmung von Insulin nutzen. Der große Nachteil der Neutronen gegenüber Röntgenstrahlen ist aber ihre geringe Intensität. Diese kann durch größere Kristalle kompensiert werden. So verbrachte ich viel Zeit im Labor in Oxford, um Kristalle zu „züchten“. Zugleich waren auch Kristalle mit Cadmium und Samarium, die anomale Dispersion im Bereich thermischer Neutronen aufweisen, wünschenswert. Cadmium anstelle von Zink bei der Kristallisation einzusetzen war theoretisch gut, aber die Kristalle waren viel kleiner als die Zn-Kristalle. Samarium ließ sich aber gut in die bestehenden Kristalle einbauen. Zur Bestimmung der Insulin-Struktur trug dies aber wenig bei. Dies gelang Dorothy und ihren Mitarbeitern. Zur Registrierung der Intensitäten von Reflexen wurden in den sechziger Jahren nicht mehr Filme benutzt, vielmehr stand ein „Vierkreis-Diffraktometer“ auf den Röntgeneratoren in den damaligen Instituten. Mit einem Zählrohr konnte die Intensität jedes einzelnen Reflexes bestimmt werden. Die Messzeit pro Reflex betrug zwischen 5 und 20 Minuten. Heute werden Flächenzähler verwendet, die ähnlich wie ein Film Hunderte von Intensitäten simultan registrieren. Statt des Generators im Labor steht an Synchrotron-Quellen (z. B. DESY in Hamburg oder ESRF in Grenoble) eine hundertfache Intensität zur Verfügung.

Zum damaligen Zeitpunkt war die Zahl der bekannten Proteinstrukturen überschaubar; kaum eine Handvoll war aufgeklärt. Zur Lösung wurden Modelle aus Draht und Kugeln, die die Atome darstellten, gebaut. Mit diesen Atompositionen ließen sich Intensitäten berechnen, die mit den gemessenen verglichen wurden. So wurde das Modell sukzessive „verfeinert“. Die wesentlichen Veröffentlichungen erschienen vor gut 50 Jahren in der renommierten Fachzeitschrift *Nature*. Die Autoren erschienen in alphabetischer Reihenfolge, Dorothy in der Mitte. In Abbildung 4 ist ein Bild der Insulin-Struktur aus einem Lehrbuch gezeigt. Zu erkennen sind drei Einheiten von jeweils zwei Molekülen, einem Dimer, die um ein zentrales Zink-Atom angeordnet sind. Hier sehen wir wieder die Dreizähligkeit, die uns schon in den Abbildungen 1 und 2 begegnet ist. Zink wird auch in den „Langerhansschen Inseln“ in der Bauchspeicheldrüse, die Insulin produzieren, gefunden.



Abbildung 5: Gedenkmarke der Royal Mail zum 100. Geburtstag



Abbildung 6: Dorothy Hodgkin als Kanzlerin der Universität Bristol

Im Jahr 2010 ehrte die britische Post die Nobelpreisträgerin zu ihrem 100. Geburtstag diesmal mit Ausschnitten aus der Insulin-Struktur (siehe Abbildung 5). Die Mitarbeiter der Arbeitsgruppe kamen aus vielen Ländern, aber das *Commonwealth* überwog. Alle haben in ihren Heimatländern bedeutende Institute aufgebaut und bedeutende Ehrungen erhalten (Sir Tom). Diese Internationalität der Wissenschaft, die ich auch von Grenoble kannte, hat mich für mein Leben geprägt.

Zurück in Grenoble wollte ich mit Sax Mason unsere ersten Ergebnisse publizieren. Dorothy war das Ganze noch nicht ausreichend. Sie sagte nicht „Nein“, das konnte sie nicht. So bewahre ich das Manuskript als Erinnerung an eine großartige Forscherin und große Persönlichkeit. Besonders in Erinnerung ist mir und meiner Frau ein Besuch in ihrem *Cottage* in Ilmington in den *Cotswolds*, einer Hügellandschaft in der Nähe von Oxford. Mit unseren kleinen Kindern und einem Studenten von Professor Thomas Hodgkin aus Guayana, auch er mit Familie, hatte sie uns zum Essen eingeladen. Dorothy kochte für alle. Neben den Wissenschaftlern aus dem *Commonwealth* setzte sie sich für die Förderung der Wissenschaft in „Entwicklungsländern“ ein. China, Vietnam und Indien, aber auch die Sowjetunion wurden von ihr wiederholt besucht, was nicht jedem gefiel. Im Jahr 1987 erhielt sie den Lenin-Friedenspreis. Von einigen Politikern wurde sie als Kommunistin hingestellt, stand aber immer der *Labour Party* nahe. Von 1972 bis 1975 war sie Präsidentin der *International Union of Crystallography*, die sich besonders um die Verbindung zwischen Ost und West im „Kalten Krieg“ verdient machte. So trug die kristallographische Grundlagenforschung dazu bei, den Kollegen den Anschluss an allgemeine Entwicklungen zu erhalten. Unter vielen Auszeichnungen sei noch die britische „Order of Merit“ und die „Branting-Medaille“ hervorgehoben. Abbildung 6 zeigt Dorothy Hodgkin im Alter von etwa 65 Jahren als „Chancellor of Bristol University“.

In ihren letzten Jahren war Dorothy auf den Rollstuhl angewiesen. Sie konnte nur noch sehr leise sprechen. Wenn sie aber auf einer großen Tagung etwas sagte, war es mucksmäuschenstill im Hörsaal. Jeder wollte jedes Wort verstehen.

Hartmut Fueß, Darmstadt

Literatur: Georgina Ferry: „Dorothy Hodgkin: A Life“, Granta Publications, London (1998)

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN

BERICHT ZU DEN AKTIVITÄTEN DES AK 12 „SPEKTROSKOPIE“

Der Arbeitskreis 12 hatte auf der 30. DGK-Tagung 2022 in München, die erneut rein virtuell stattfand, kein eigenes Mikrosymposium (ein solcher Themenschwerpunkt wurde nicht angeboten). Allerdings gab es mehrere Symposiumsbeiträge und Poster zum Thema Spektroskopie.

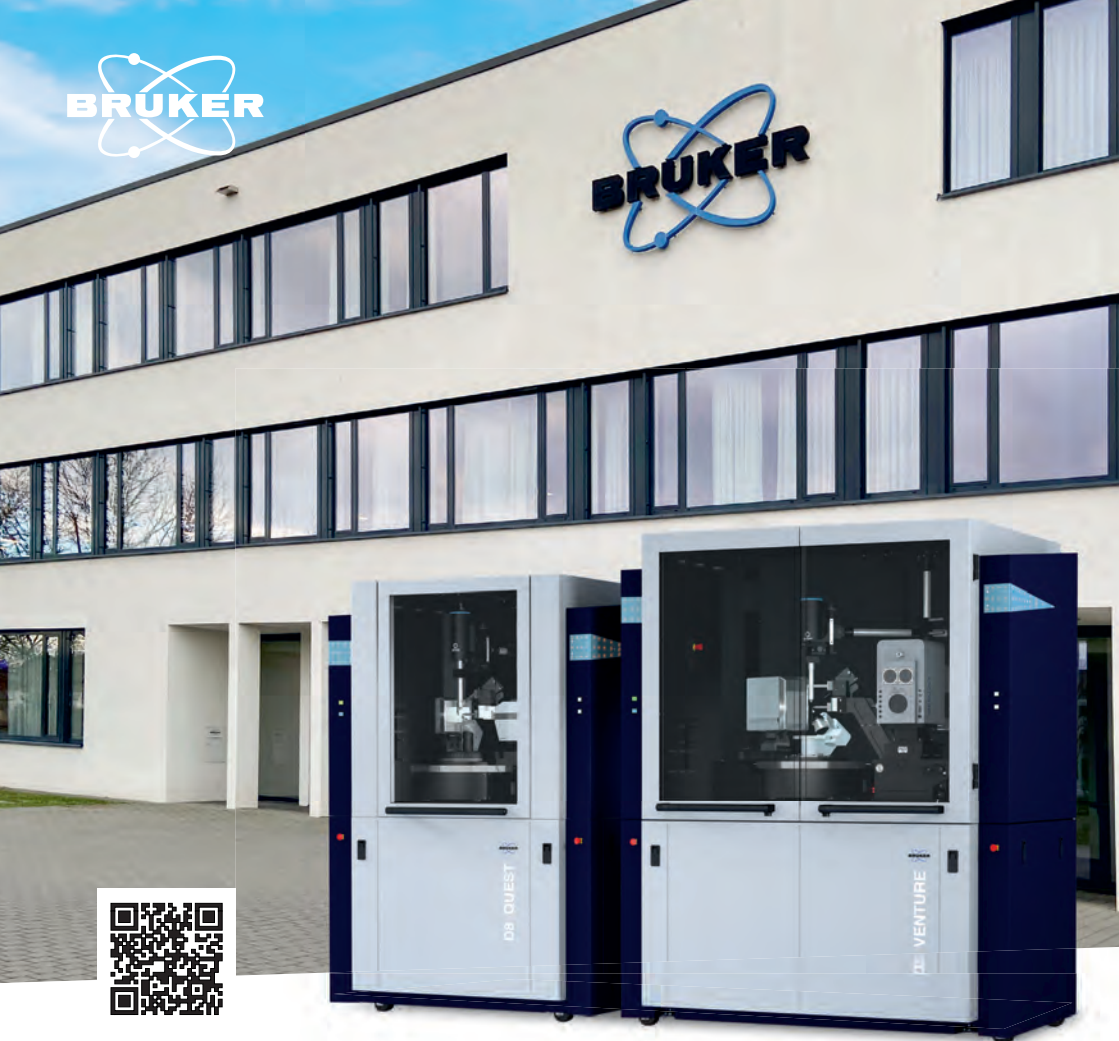
Auf der diesjährigen Tagung in Frankfurt ist ein Themenschwerpunkt „Spektroskopie“ leider nicht zustande gekommen, da insgesamt nur drei Beiträge zu der Thematik eingereicht wurden. Allerdings wurde ich auch dem Themenbereich „Festkörperphysik“ zugeordnet, sowohl als *Chair* als auch für die Durchsicht der *Abstracts*, so dass ich überhaupt keinen Zugriff auf die *Abstracts* aus meinem Arbeitskreisbereich hatte. Ein mehrfaches Aufmerksammachen darauf zeigte weder bei *Conventus* noch bei der Tagungsleitung eine Wirkung. So wurde ich beispielsweise einfach und ohne Nachfrage für das MS 3 „Crystal Physics“ als *Co-Chair* eingetragen.

Aufgrund der Corona-Pandemie und weil die Kurse des AK 12 nur in Präsenz möglich sind, fand auch im Jahr 2022 kein DGK/DMG-Doktorandenshortcourse statt. Für dieses Jahr ist wieder ein Kurs geplant. Dieser wird vom 30. Mai bis zum 2. Juni 2023 an der Ruhr-Universität stattfinden.

Zur geplanten Neustrukturierung der Arbeitskreise möchte ich nochmals aus meiner langjährigen Arbeit als Arbeitskreissprecher folgenden Anmerkungen machen: Der AK 12 wurde 1997 gegründet (damals noch als AK NMR-Spektroskopie, seit 2009 dann als AK Spektroskopie). Von unserem AK wurden seitdem viele Veranstaltungen durchgeführt. Allerdings muss ich anmerken, dass wir zwar auf dem Papier über fünfzig AK-Mitglieder haben, aber in den AK-Sitzungen auf den Tagungen oft nur Mitglieder anwesend waren, die bei uns am Geowissenschaftlichen Institut NMR gemessen haben. Die jährlichen Aktivitäten des AK bezogen sich immer auf Beiträge im Mikrosymposium auf den Jahrestagungen und den jährlich stattfindenden Shortcourse. Weitere Vorschläge gab es von Seiten der AK-Mitglieder nie. Im Prinzip war und ist der AK das, was der Sprecher organisierte. Ich vermute, dass auch in anderen AKs die Situation ähnlich ist. Ohne eine Aktivität des Sprechers gibt es auch keine Aktivität des Arbeitskreises. Eine Zusammenlegung von Arbeitskreisen und deutlich weniger Schwerpunkte sind mit Sicherheit förderlich, aber vor allem erfordert es Engagement und Aktivität von Mitgliedern Leben in einen Schwerpunkt zu bringen. Ob allerdings die neuen Themenschwerpunkte und damit Arbeitskreise, die ja nun weitgehend stofflich ausgerichtet sind (die Methoden werden alle in einen Arbeitskreis 3 zusammengefasst) automatisch mehr Aktivität auslösen, sehe ich skeptisch.

Da es nach der Reform keinen AK Spektroskopie mehr geben wird und ich die Tätigkeit als AK-Sprecher mittlerweile seit 1997 (also 26 Jahre) ausübe, denke ich, es ist Zeit, diese Tätigkeiten für die neuen Arbeitskreise jungen Kristallographen zu überlassen. Somit werde ich mich hier nicht mehr engagieren, außer das weiterhin in unregelmäßigen Abständen der jährliche Shortcourse zur NMR stattfinden wird.

Michael Fechtelkord, Bochum



SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

Bruker AXS European Users Meeting

You are invited to the **SC-XRD users meeting** on “Advanced Applications” in
Karlsruhe on October 10th and 11th, 2023.

Enjoy the mix of Bruker and user presentations. The meeting is free of charge,
starts in the morning of October 10th and ends in the late afternoon of October 11th.

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

BERICHT ZUM

20. DMG-SHORTCOURSE

„ANWENDUNGEN DER FESTKÖRPER- NMR-SPEKTROSKOPIE IN DER MINERALOGISCHEN UND GEOWISSENSCHAFTLICHEN FORSCHUNG“

BOCHUM, 30.05. – 02.06.2023

Auch in diesem Jahr wurde von Seiten der DMG/DGK ein Shortcourse zum Thema NMR-Spektroskopie ausgerichtet. Unter der Leitung von Dr. Michael Fechtelkord konnten sich Teilnehmer aus unterschiedlichsten Fachdisziplinen (z. B. Zementchemie, Petrologie oder Chemieingenieurwesen) eingehend mit den analytischen Möglichkeiten der Festkörper-NMR-Spektroskopie befassen.

Dieser Kurs bot für Doktoranden und wissenschaftliche Mitarbeiter die interessante Möglichkeit eine Wiederholung der physikalischen Grundlagen der Methodik mit praktischen Beispielen zu kombinieren oder einen verständlichen Einstieg in die NMR-Spektroskopie zu erhalten. Während morgens die theoretischen Grundlagen und Pläne für den Tag erarbeitet wurden, befasste man sich nachmittags mit der praktischen Arbeit. Neben der Präparation von zu messenden Proben konnten die Kursteilnehmer sogar selbst Messungen am Gerät durchführen.

Am Beispiel der ^1H -Spin-Gitter-Relaxation von Tetramethylammoniumjodid, sowie der Berechnung von Aktivierungsenergien und Korrelationszeiten für die entdeckten Relaxationssignale der Ammonium- und Methylumgebungen wurde ebenfalls gezeigt, wie stark der Einfluss der Messtemperatur auf erhaltene NMR-Spektren sein kann. Der Kurstag klang dann bei Getränken und Essen in der Kneipe „Filou“ aus, wo man sich unter den Teilnehmern besser kennenlernte.

Am nächsten Tag wurden dipolare und chemische Verschiebungs-Wechselwirkungen vorgestellt und ihr Einfluss auf die erhaltenen Spektren erläutert. Wir konnten feststellen, dass sich z. B. Probensignale gar nicht so einfach von Rotationsseitenbanden und Verunreinigungen unterscheiden lassen. Hier erwies sich die Auswertesoftware DMFit2020 als sehr hilfreiches Werkzeug. Wie in der Geschichte der NMR-Spektroskopie, markierte auch der Mittwochnachmittag einen entscheidenden Wendepunkt im Ablauf des Kurses. Das Entfernen von Anisotropieeffekten durch *Magic Angle Spinning* (MAS) eröffnete völlig neue analytische Möglichkeiten. Diese Technik wurde im praktischen Teil verwendet, um ^{29}Si , ^{19}F und ^1H in synthetischen Phlogopiten zu untersuchen. Sie zeigte klar, dass die NMR-Spektroskopie hervorragend als Komplementärtechnik zu Diffraktionsmethoden geeignet ist und gerade dann interessant wird, wenn Dotierungen oder natürlich „verunreinigte“ Minerale betrachtet und ihre strukturellen Besonderheiten aufgeklärt werden sollen.



Der dritte Kurstag befasste sich mit den Anwendungsmöglichkeiten von Multipulstechniken und den Grundlagen des Kreuzpolarisationsexperiments (CP). Im praktischen Teil wurde ein kontaktzeitabhängiges CPMAS-Experiment an Kaoliniten durchgeführt. Im Nachgang wurden Atomabstände zwischen Si- und H-Kernen bestimmt. Dies ließ sich mit einer einfachen Tabellenkalkulation realisieren.

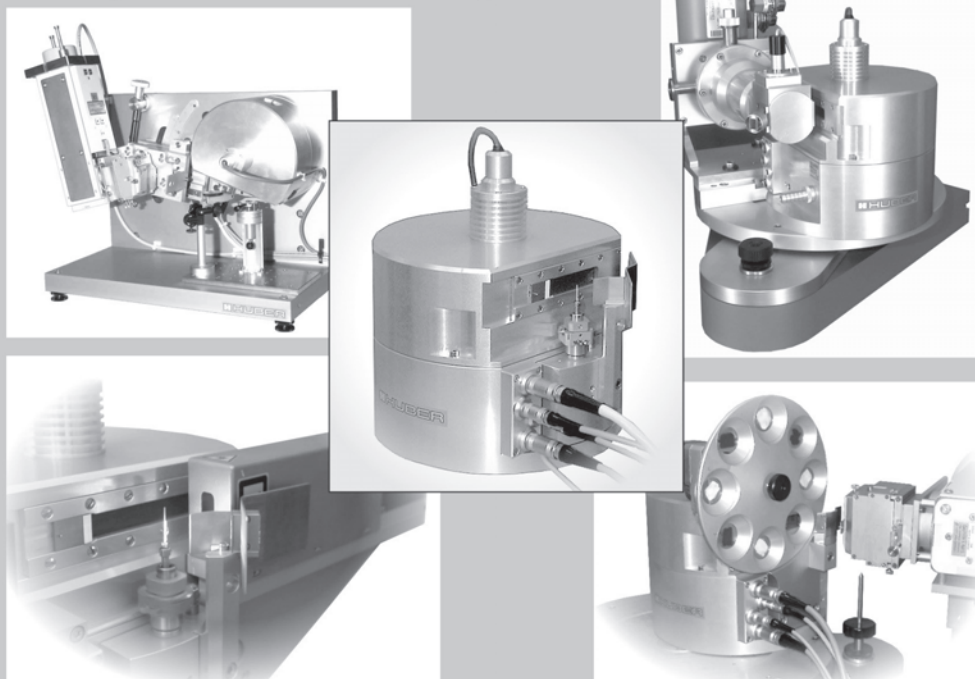
Der letzte Tag widmete sich den Quadrupolkernen (Spinquantenzahl $I > 0,5$). Als Beispiele wurden die Kerne ^{23}Na und ^{27}Al in verschiedenen Salzen und Korund gemessen und analysiert. Im Theorieteil wurde der Fokus auf weitere NMR-Methodiken wie *Double Rotation* (DOR) oder *Multi Quantum Magic Angle Spinning* (MQMAS) und *Satellite Transition Spectroscopy* (SATRAS) gelegt. Spätestens zu diesem Zeitpunkt wurde klar, dass man eher vier Jahre als Tage benötigt, um sämtliche Festkörpermethoden des NMRs zu verstehen und praktisch anwenden zu können.

Die Zeit reichte jedoch aus, um eine allgemeine Vorstellung für die unterschiedlichen Ansätze zu entwickeln und zu begreifen, welche Informationen mit welchem Verfahren gewonnen werden können. Generell kann man festhalten, dass der gegebene Überblick sehr hilfreich für die Planung zukünftiger Projekte sowie die Auswertung von gestellten wissenschaftlichen Fragen ist.

Christian Felten, Henning Kruppa, Michael Wenzel, Aachen

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry



HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

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

HUBER
X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

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

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

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

Der Arbeitskreis „Junge Kristallographen“ wird im Zuge der Umstrukturierung der Arbeitskreise von AK 21 zu AK 1 umbenannt und wir freuen uns sehr, nun so prominent in der Struktur unserer Gesellschaft repräsentiert zu sein. Diese Umbenennung kommt außerdem zu einem sehr passenden Zeitpunkt, denn wir feiern dieses Jahr unser zehnjähriges Bestehen.

Seit seiner Gründung im Jahr 2013 wächst unser Arbeitskreis stetig und zählt zur Zeit über 200 vorwiegend deutsche, aber auch internationale Mitglieder. Da unsere Gruppe nicht über eine spezielle Methode oder ein Forschungsgebiet definiert ist, zeichnet sich bei uns die große Diversität der Kristallographie ab und der wissenschaftliche Hintergrund unser Mitglieder reicht von Chemie und Materialwissenschaften über Mineralogie bis zur Physik. Leider haben wir nur sehr wenige Vertreter:innen aus der Biologie und Proteinkristallographie, obwohl diese Gebiete in der gesamten DGK sehr aktiv sind. Hier hoffen wir in Zukunft neue Mitstreiter:innen finden zu können.

Wie jedes Jahr haben wir auch 2022 ein eigenes Arbeitskreistreffen veranstaltet. Es war nach 2019 das zweite gemeinsame Treffen der Jungen Kristallzüchter der DGKK und uns Jungen Kristallographen und fand in Freiberg in Sachsen statt. Neben den traditionellen *Lightning Talks* der jungen Wissenschaftler:innen, wobei es sich um fünf-minütige Kurzvorträge handelt, die auf die dazugehörigen Poster neugierig machen sollen, gab es spannende Vorträge aus Wissenschaft und Industrie von Leonid Dubrovinsky, Carsten Richter, Manfred Jurisch und Sebastian Bette sowie Kay Dornich (Freiberg Instruments) und Laura Folkers (STOE). Abgerundet wurde das Programm von Führungen durch die Terra Mineralia, der größten Mineralienausstellung der Welt, und die Fertigungshallen des Halbleiterherstellers Freiburger Compound Materials. Max Stöber, Maik Förste und Florian Meurer wurden für ihre hervorragenden Poster und Kurzvorträge ausgezeichnet. Wir bedanken uns an dieser Stelle herzlich für die großzügige Unterstützung der Veranstaltung durch die DGK, DGKK, Freiburger Compound Materials, Freiberg Instruments, Siltronic, STOE und der Freiburger Brauerei.

Für unser diesjähriges Jubiläumstreffen konnten wir die Unterstützung einiger Mitarbeiter:innen des DESY in Hamburg gewinnen, sodass wir vom 4. bis 6. Oktober dort unser „10th Anniversary Meeting“ mit Führungen und tiefen Einblicken in die vielfältige Forschung am Synchrotron veranstalten können.

Auf der 31. Jahrestagung der DGK im Frühjahr dieses Jahres in Frankfurt am Main fanden ein Mikrosymposium der Jungen Kristallographen und unser *Get Together* statt. Das Mikrosymposium war gefüllt mit *Lightning Talks* sowie den Preisträgervorträgen der diesjährigen Gewinnerin und des Gewinners des Lieselotte-Templeton-Preises, Luisa Wartner und Florian Meurer.

Bei unserem *Get Together*, welches trotz der fortgeschrittenen Stunde eine hohe Teilnehmerzahl verzeichnete, wurde über die vergangenen und geplanten Veranstaltungen unseres Arbeitskreises berichtet. Außerdem wurden von STOE gesponserte Preise für die *Lightning Talks* verliehen. Ausgezeichnet wurden Maria Herz und Thomas Pickl.

Außerdem gab Constantin Buyer (Universität Stuttgart) sein Amt als Arbeitskreissprecher turnusgemäß an den zweiten Sprecher Jakob Möbs (Universität Marburg) ab und Florian Meurer (Universität Regensburg) wurde als neuer zweiter Sprecher gewählt.

Darüber hinaus waren wir sehr erfreut, dass Julia Dschemuchadse, eine der Gründerinnen unseres Arbeitskreises und mittlerweile Professorin an der Cornell University in Ithaca, NY, unserer Einladung gefolgt ist und einen Plenarvortrag auf der Tagung gehalten hat.

Weitere Informationen über die Aktivitäten sind auf unserer Homepage <http://dgk-home.de/aks/jkyc> und dem dort verlinkten Blog zu finden. Dort gibt es etwa ausführliche Berichte über vergangene Veranstaltungen oder Vorstellungen der Mitglieder unseres Arbeitskreises.

Jakob Möbs (Marburg) und Florian Meurer (Regensburg)



2nd Joint Meeting of the “Young Crystallographers” and “Young Crystal Growers” 2022 in Freiberg (Foto: Constantin Buyer)

PERSONALIA

JUBILARE 2023

100 Jahre

Prof. Dr. Hans Löffler	Halle
Prof. Dr. Hermann J. Schloemer	Saarbrücken

90 Jahre

Prof. Dr. Hartmut Bärnighausen	Karlsruhe
Annegret Haake	Frankfurt
Prof. Dr. Hans Bartl	Bad Homburg
Dr. Armin Räuber	Freiburg

85 Jahre

Dr. Wilhelm Mertin	Gießen
Prof. Dr. Hans-Jürgen Ullrich	Dresden
Prof. Dr. Jörg Arndt	Berlin
Prof. Dr. Heinrich Stuhmann	Geesthacht
Peter Otten	Schacht-Audorf
Dr. Hartmut Wunderlich	Langenfeld
Dr. Martin Oliver Ellner	Stuttgart
Prof. Dr. Hermann Otto	Clausthal-Zellerfeld
Prof. Dr. Bernt Krebs	Münster
Prof. Dr. Robert B. Heimann	Hannoversch Münden
Dieter Clauß	Lohfelden

80 Jahre

Prof. Dr. Jörg Ihringer	Tübingen
Prof. Dr. Elisabeth Rossmanith	Hamburg
Dr. German Müller-Vogt	Karlsruhe
Prof. Dr. Elke Koch	Lehrte
Prof. Dr. Hans-Jürgen Weber	Dortmund
Prof. Dr. Armin Kirfel	Bonn
Prof. Dr. Peter Luger	Berlin
Prof. Dr. Gernot Heger	Aachen
Prof. Dr. Michael Steiner	Berlin
Prof. Dr. Wolfgang Moritz	München
Dr. Bernd Müller	Jena

75 Jahre

Dr. Holger Straube	Chemnitz
Prof. Dr. Claude Lecomte	Vandoeuvre
Dr. Annegret Lipka	Lennestadt
Prof. Dr. Anton Lerf	Garching
Dr. Georg Nover	Bonn
Prof. Dr. Hartmut Michel	Frankfurt am Main
Prof. Dr. Gerald Henkel	Paderborn
Dr. Ulrich Löchner	Bochum
Prof. Dr. Ladislav Bohaty	Köln
Dr. Hans Hermann Höfer	Westhofen
Dr. Eberhardt Herdtweck	Kolbermoor

70 Jahre

Dr. Leonore Wiehl	Darmstadt
Prof. Dr. Wolfgang Hiller	Reutlingen
Dr. Heribert Graetsch	Bochum
Prof. Dr. Gerhard Müller	Konstanz
Prof. Dr. Gerd Folkers	Zürich
Dr. Ilona Dörfel	Berlin
Dr. Doris Uecker	Berlin
Ulrich Merges	Kaiserslautern
Dr. Martina Andratschke	Regensburg
Prof. Dr. Frank Kubel	Wien
Prof. Dr. Josef-Christian Buhl	Hannover
Prof. Dr. Udo Heinemann	Berlin
Dr. Klaus Harms	Marburg
Prof. Dr. Hans Roggendorf	Halle an der Saale
Eugen Untersteller	Marburg
Prof. Dr. Ute Kaiser	Ulm
Dr. Hans Wolfgang Höffken	Ludwigshafen
Prof. Dr. Wolfgang Bensch	Kiel

65 Jahre

Dr. Wolfgang Hummel	Villigen PSI
Helmut Münkkel	Ottersweier
Dr. Harald Euler	Bonn
Prof. Dr. Wolfgang W. Schmahl	München
Prof. Dr. Sander van Smaalen	Bayreuth
Dr. Michael Bolte	Frankfurt am Main
Dr. Andreas N. Danilewsky	Freiburg
Birgit Schuster	Erfurt
Dr. Hans-Peter Trah	Bühl
Prof. Dr. Wolfgang Heckl	München
Dr. Stephen Doyle	Karlsruhe
Dr. Karl-Wilhelm Klinkhammer	Stuttgart
Dr. Armin Froehlich	Hannover
Prof. Dr. Noel Thomas	Höhr-Grenzhausen
Dr. Yvonne Tomm	Berlin
Dr. Wolfgang Milius	Bayreuth

VERSTORBENE MITGLIEDER

Dr. Hans Egon Nager

Bibliothek der Universität Münster

† 25. Mai 2022

Dr. Heino Freese

Institut für Theoretische Physik der Universität Hamburg

† 26. Juli 2022

Prof. Dr. Ulrich Bonse

Fakultät für Physik der Universität Dortmund

† 11. Oktober 2022

Prof. Dr. Josef Zemann

Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien

† 16. Oktober 2022

Prof. Dr. Karl Fischer

Fachrichtung Technische Physik der Universität des Saarlandes

† 29. Oktober 2022

Prof. Dr. Paul Keller

Institut für Mineralogie der Universität Stuttgart

† 4. November 2022

Dr. Lutz Däweritz

Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik

† 4. Dezember 2022

Dr. Werner Schmitz

Institut für Kristallographie der Universität Leipzig

† 4. Dezember 2022

Dr. Klaus Kosten

Universität Aachen

† 9. Dezember 2022

Dr. Sara Niedenzu

Centrum Baustoffe und Materialprüfung der Technischen Universität München

† 7. März 2023

WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2023 AN THOMAS WEBER

IN ANERKENNUNG SEINER HERAUSRAGENDEN UND MATERIALKLASSEN
ÜBERSPANNENDEN FORSCHUNG ZUR FEHLORDNUNG IN PERIODISCHEN UND
QUASIPERIODISCHEN KRISTALLEN



Ich freue mich sehr über die wohlverdiente Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2023 an meinen ehemaligen Mitarbeiter Dr. Thomas Weber. Thomas, der am 2. März 1965 in München geboren ist, studierte an der LMU Mineralogie und promovierte 1994–1997 bei Prof. Frey zum Thema „Modulierte Strukturen und Fehlordnung in Harnstoffeinschlussverbindungen bei Temperaturen von 30 bis 300 K“. Damit war sein Interesse an der quantitativen Untersuchung fehlgeordneter Kristalle mit Beugungsmethoden geweckt.

Während seines darauffolgenden Aufenthalts als Postdoc bei Prof. Bürgi, Universität Bern, (1997–2000) entwickelte Thomas Monte-Carlo-Simulationsmethoden zur Modellierung fehlgeordneter Strukturen basierend auf diffuser Streuung weiter. Im Vordergrund stand dabei vor allem der wegweisende Einsatz evolutionärer Algorithmen zur effizienten Optimierung von Strukturparametern.

Während der Jahre 2000–2015 war Thomas als *Senior Scientist* in meinem Laboratorium für Kristallographie der ETH Zürich beschäftigt. Im Zentrum seiner Interessen stand die Entwicklung der 3D-APDF-Methode. Die Grundidee dabei war, die Fourier-Transformierte lediglich des diffusen Streusignals von Einkristall-Beugungsexperimenten zu betrachten. Damit wird die intuitiv schwer verständliche reziproke Rauminformation in den leichter verständlichen Autokorrelationsraum überführt.

Thomas Interesse galt damals vor allem der Fehlordnung von Quasikristallen, deren nicht-kristallographische Symmetrie die Verwendung herkömmlicher Methoden zur Modellierung von Fehlordnung und diffuser Streuung äußerst herausfordernd macht. Die 3D-APDF-Methode kann jedoch unabhängig von der Kristallsymmetrie angewandt werden. Damit war es erstmals möglich, die Fehlordnung von Quasikristallen ohne komplexe Simulationen qualitativ und

semiquantitativ zu verstehen. Auch für die quantitative Modellierung der lokalen Ordnung von Quasikristallen konnten neue Wege beschritten werden, die grundlegende Einblicke in die strukturbildenden Prinzipien von Quasikristallen lieferten.

Schnell zeigte sich, dass das Potential der 3D- Δ PDF-Methode weit über die Untersuchung von Quasikristallen hinausgeht und auch auf konventionelle fehlgeordnete Strukturen angewandt werden kann. Thomas vertiefte die theoretischen Grundlagen der 3D- Δ PDF-Methode, formulierte Richtlinien zur Interpretation der 3D- Δ PDF-Karten und entwickelte Software zur quantitativen Modellierung und die Anwendung der Methode auf eine Reihe anspruchsvoller lokaler Nahordnungsphänomene. In seiner jüngsten Arbeit analysierte Thomas eine 2D Einkristall-zu-Einkristall-Polymerisation basierend auf experimentellen Daten. Mit Hilfe von 3D- Δ PDF-Verfeinerungen gelang es, diese hochkomplexe Festkörperreaktion zu verstehen und die entscheidenden Faktoren für eine erfolgreiche Polymerisation zu identifizieren.

Dieses Beispiel zeigt nicht nur die wichtigen Strukturinformationen, die mit der 3D- Δ PDF-Technik extrahiert werden können. Mit der erfolgreichen Verfeinerung von mehreren tausend Nahordnungsparametern pro Struktur wurde zudem bewiesen, dass Unordnungsprobleme verständlich werden, die bis vor kurzem als unlösbar galten. Mittlerweile wurde die 3D- Δ PDF-Methode von mehreren Gruppen aufgegriffen.

Seit meiner Emeritierung im Februar 2016 leitet Thomas zudem die „Röntgenplattform“ des *Department of Materials* der ETH Zürich. Er ist Experte für alle Röntgenbeugungsmethoden, von der Pulver- und Einkristalldiffraktion bis zur Kleinwinkelstreuung. Er unterrichtet diesen Themenbereich auch im Masterstudium und ist auch sonst im Bereich der Forschung und Lehre engagiert.

Zusammenfassend hat Thomas Arbeit einen herausragenden Beitrag zu unserem Verständnis der realen Struktur von fehlgeordneten Kristallen in allen Materialklassen, von intermetallischen Phasen bis zu 2D-Polymeren, geleistet. Die Forschung in diese Richtung ist dem Endziel, sie zu einer Routineaufgabe ähnlich der Lösung und Verfeinerung der gemittelten Struktur zu machen, nun einen erheblichen Schritt nähergekommen: Durch die deutliche Senkung der Eintrittsbarriere in dieses Gebiet besteht berechtigte Hoffnung auf einen nachhaltigen Innovationsschub im Verständnis von Nahordnungsphänomenen in der physikalisch, chemisch und biologisch orientierten Strukturforschung.

Ich gratuliere Thomas auf das Herzlichste zur wohlverdienten Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2023.

Walter Steurer, Zürich

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2023 AN ROLF HILGENFELD

IN ANERKENNUNG SEINES WISSENSCHAFTLICHEN LEBENSWERKES,
INSBESONDERE FÜR SEINE ARBEITEN ÜBER LANGWIRKENDES INSULIN UND
DIE ENTWICKLUNG VON INHIBITOREN DER
CORONAVIRALEN HAUPTPROTEINASE



Sehr geehrte Damen und Herren,
liebe DGK-Mitglieder,
liebe Gäste,

da Warnstreiks meine Vor-Ort-Teilnahme an dem heutigen Festakt verhindert haben, spreche ich zu Ihnen online; dies bitte ich zu entschuldigen.

Mein Name ist Jeroen Mesters und als langjähriger und seit kurzem ehemaliger wissenschaftlicher Mitarbeiter von Rolf Hilgenfeld – derzeit *Senior Professor* an der Universität zu Lübeck – war es mir ein wichtiges Anliegen, Rolf für die Carl-Hermann-Medaille vorzuschlagen und nun mit großer Freude die Laudatio zu halten.

Rolf hat im Jahr 1986 bei Wolfram Saenger in Berlin promoviert und war anschließend 9 Jahre lang Gruppenleiter bei der damaligen Hoechst AG in Frankfurt am Main, jetzt Sanofi-Aventis. Dort war er maßgeblich an der Entwicklung des ersten langwirkenden Insulins „Glargin“ (Lantus®) beteiligt, wofür er erfolgreich Kristall-Kontakt-Design anwendete.¹ Der Erfolg dieses Medikaments ist beachtlich und vor allem für die Patienten ein Segen. Mit Jahresumsätzen von bis zu 6,5 Milliarden Euro, also ein echter *Block-Buster*, gehörte Lantus® über vielen Jahren zu den weltweit 10 umsatzstärksten Arzneien.

Anschließend folgte Rolf im Jahr 1995 einem Ruf auf einer Professur an der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Als Gruppenleiter, und später Direktor, am früheren Institut für Molekulare Biotechnologie hat er sich im Laufe der Jahre zunehmend mit RNA-Viren und deren Proteasen beschäftigt. Der Fokus lag zunächst auf HIV, dann zunehmend auf Entero-, Flavi- und Coronaviren. Vor dem SARS-1-Ausbruch im Winter 2002/03 betrachtete der damalige wissenschaftliche Beirat des Instituts die Forschung an Coronaviren noch als Nischenforschung und schlug sogar vor, dieses Projekt aufzugeben. Diese Empfehlung hat er zum Glück ignoriert. Im Januar 2003 wechselte er dann auf den Lehrstuhl für Biochemie an der Universität zu Lübeck und setzte seine Forschung an viralen Proteasen fort.

Heute steht außer Frage, dass Rolf national und international die Wissenschaftslandschaft als Corona-Forscher geprägt hat und weiter prägen wird. Im Frühjahr 2003 gehörte er zu den unerschrockenen Wissenschaftlern, die freiwillig nach China reisten, um vor Ort die Forschung zu unterstützen.² Dies bedeutete auch, dass er dann für mehrere Wochen auf einem Universitätsgelände in China eingeschlossen war. Er durfte hinein, aber nicht schnell hinaus; eine Maßnahme zur Eindämmung der SARS-1-Pandemie.

Veröffentlichungen in hochrangigen Fachzeitschriften zu TGEV, SARS-1, MERS und SARS-2 zeugen von seinem Lebenswerk und seinen Leistungen.^{3–8} Betrachten wir alle wissenschaftlichen Publikationen weltweit, dann schafft nur eine aus viertausend Publikationen die „mehr als 1000-fach-zitiert“ Schwelle. Die beiden *Science*-Publikationen zu SARS-1 und SARS-2 gehören klar dazu. Diese Arbeiten sind über jeden Zweifel erhabene *Citation Classics*.

Rolf wird immer wieder als wichtiger Experte in Zeitungen, Fernsehen und politischen Kommissionen genannt bzw. gesehen und hat damit als Strukturvirologe einen wichtigen Beitrag zur Sichtbarkeit der Kristallographie geliefert: Unfassbare 400 nationale und internationale mediale Auftritte und Beiträge, von Zeitungsartikeln und Radioprogrammen, bis hin zu Fernsehauftritten, hat er bestritten.

Ungewöhnlich ist, dass eine seiner Strukturen, eine Corona-virale Protease mit gebundenem Inhibitor, die Grundlage für eine Skulptur bildete, die seit 2006 in Singapur aufgestellt ist.⁹ So etwas gibt es meines Wissens nur vereinzelt, wie zum Beispiel für Hämoglobin, die DNA-Doppelhelix oder Insulin.

Nennenswert sei hier auch sein Engagement, zusammen mit afrikanischen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern, kleine Workshops/Konferenzen – mit Arbeitstitel „Emerging Viruses“ – auf dem afrikanischen Kontinent zu organisieren. Er hielt es für sehr wichtig, die Forschung an Viren auf dem afrikanischen Kontinent so zu unterstützen. Leider musste er diese Aktivität pandemiebedingt einstellen.

Nebst rein wissenschaftlichen Forschungsthemen hat er sich unermüdlich für die Lehre auf dem Gebiet der Kristallogenese eingesetzt. Zusammen mit Wissenschaftlern aus Spanien und der Tschechischen Republik co-organisierte er ab 2001 immer wieder Kristallisationskurse, wie zum Beispiel der DGK-DGKK-Kristallisationskurs 2004, oder *FEBS-Advanced* und *FEBS-Instruct*-Kurse. Diese Kurse wurden in den letzten 20 Jahren von Hunderten von jungen Doktoranden, auch aus Deutschland, besucht und die Resonanz war einfach großartig. Auch als Konferenz-Organisator hat er Ruhm erlangt: Die ICCBM9 (*International Conference on the Crystallisation of Biological Macromolecules*, Jena, 2002) ist noch heute in aller Munde: Sie ist *bis dato* beispiellos; eine größere Konferenz mit parallelen Sessions zum Thema Kristallogenese hat es seitdem nicht mehr gegeben. Während dieser Konferenz wurde die Internationale Organisation für biologische Kristallisation (IOBCr), mit Ihm als ersten Präsident, gegründet.

Noch nicht einmal einen Monat in Ruhestand, im April 2020, bekam er ein Angebot vom Max-Planck-Institut für Molekulare Physiologie in Dortmund und ein weiteres Angebot von der *China Pharmaceutical University* in Nanjing dort weiterzuforschen. Letztendlich wurde er von der Universität zu Lübeck, mit Unterstützung der Possehl-Stiftung und des Struktur- und Exzellenzbudgets des Landes, aus dem Ruhestand zurückgeholt und Rolf forscht seitdem fleißig weiter an Corona-viralen Inhibitoren.¹⁰

Abschließend, liebes Auditorium, lieber Rolf, bin ich hoch erfreut, dass die DGK meiner Empfehlung einstimmig gefolgt ist, dein Lebenswerk mit der Carl-Hermann-Medaille zu würdigen! Herzlichen Glückwunsch von meiner Seite und den Appelwoi holen wir zusammen nach, wenn Du wieder in Lübeck bist!

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit und einen schönen Gruß aus Lübeck.

Jeroen Mesters, Lübeck

REFERENZEN

- 1 The evolution of insulin glargine and its continuing contribution to diabetes care. *Drugs* 74 (2014) 911
- 2 China and Germany join forces over SARS. *Nature* 423 (2003) 791
- 3 Coronavirus main proteinase 3CL^{pro} structure: Basis for design of anti-SARS drugs. *Science* 300 (2003) 1763
- 4 Crystal structure of SARS-CoV-2 main protease provides a basis for design of improved alpha-ketoamide inhibitors. *Science* 368 (2020) 409
- 5 alpha-Ketoamides as Broad-Spectrum Inhibitors of Coronavirus and Enterovirus Replication: Structure-Based Design, Synthesis, and Activity Assessment. *J. Med. Chem.* 63 (2020) 4562
- 6 Structure of coronavirus main proteinase reveals combination of a chymotrypsin fold with an extra alpha-helical domain. *EMBO J.* 21 (2002) 3213
- 7 Crystal structure of the papain-like protease of MERS coronavirus reveals unusual, potentially druggable active-site features. *Antiviral Res.* 109 (2014) 72
- 8 From SARS to MERS: 10 years of research on highly pathogenic human coronaviruses. *Antiviral Res.* 100 (2013) 286
- 9 Denkmal für die SARS-Forschung in Singapur. <https://www.uni-luebeck.de/aktuelles/pressemitteilung/artikel/denkmal-fuer-die-sars-forschung-in-singapur.html>
- 10 Prof. Rolf Hilgenfeld forscht weiterhin in Lübeck. <https://www.uni-luebeck.de/aktuelles/nachricht/artikel/prof-rolf-hilgenfeld-forscht-weiterhin-in-luebeck.html>

LIESELOTTE-TEMPLETON-PREIS 2023



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

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 Jakob Möbs, und dem Vorsitzenden unserer Gesellschaft, Thomas Schleid.

Wir freuen uns sehr, nun bereits zum zweiten Mal diesen Studierenden-Preis im Namen unserer Gesellschaft vergeben zu können.

Der Lieselotte-Templeton-Preis wird für die besten Abschlussarbeiten (Bachelor, Master, Diplom oder ähnliche) im Bereich der Kristallographie vergeben. Unsere Gesellschaft ehrt mit diesem Preis jährlich bis zu drei NachwuchswissenschaftlerInnen in einem frühen Stadium ihrer Karriere.

Der Preis trägt den Namen der deutschen Kristallographin Lieselotte Templeton. Sie ist die Nichte des Physikers und Nobelpreisträgers Otto Stern, dem dieses Konferenzgebäude gewidmet ist. 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 zwei herausragende Studierendenarbeiten verleihen.

Insgesamt sind fünf 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 einstimmiges Votum vor.

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

Die diesjährigen Preistragenden sind:

- Frau B. Sc. Luisa Wartner von der Universität Hamburg und
- Herr M. Sc. Florian Meurer von der Universität Regensburg.

Lassen Sie mich nun kurz die beiden Honorees würdigen.

LUISA WARTNER



Luisa Wartner wird für ihre Arbeiten im Rahmen ihrer Bachelorarbeit mit dem Titel „Hydrothermalsynthese von anisotropen Ferritmikropartikeln“ ausgezeichnet. Die Arbeit fertigte sie in der Arbeitsgruppe von Simone Mascotto, am Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg an. Frau Wartner studiert Nanowissenschaften.

Gegenstand der Bachelorarbeit von Frau Wartner bildeten Orthoferrite der Seltenen Erden. Diese weisen besondere elektrische, katalytische und magnetische Eigenschaften sowie Ungiftigkeit und chemische Stabilität auf. Dadurch sind sie für Anwendungen unter anderem in der Photokatalyse interessant. An den Oberflächen, den Facetten entsprechender Kristalle können zudem physikalische und chemische Prozesse selektiv ablaufen.

In ihrer Arbeit stellte Frau Wartner anisotrope Mikropartikel aus Ytterbiumferrit (YbFeO_3) mittels Hydrothermalsynthese her. Als Studentin der Nanowissenschaften gelang es ihr mit präparativen chemischen Laborverfahren monodisperse, phasenrein kubische, prismatische und bipyramidale Mikropartikel zu erhalten. Die Beeinflussung der Morphologie konnte sie durch Verwendung von Kaliumhydroxid und Urea aufschlüsseln. Dadurch wurde ein rationales Design von anisotropen Partikeln mit einstellbarem Seitenverhältnis ermöglicht. Zur Charakterisierung der Morphologien nutzte sie die Elektronenmikroskopie. Für die kristallographische Phasenanalyse und die Bestimmung bevorzugter Wachstumsrichtungen setzte sie die Röntgenpulverdiffraktometrie ein. Die Bandlücken charakterisierte sie mittels UV-Vis-Spektroskopie. Damit stehen nun als Ergebnis ihrer Bachelorarbeit unterschiedliche Morphologien des Ytterbiumferrits für die Untersuchung ihrer photokatalytischen Aktivität insbesondere für die CO_2 -Reduktion zur Verfügung.

Gleich nach Verteidigung ihrer Arbeit trat Frau Wartner ein Forschungspraktikum an der *University of Windsor* in Kanada an, wo sie ihr kristallographisches Wissen weiter vertiefte.

Ihr Betreuer, Simone Mascotto, sagt über sie: „[Frau Wartner] zeigte sich sofort als brillante, überdurchschnittliche Studentin, die bereit war, grundlegende Konzepte der Festkörperchemie zu verstehen [...]. [Sie] war in der Lage, eine tiefgehende Analyse der Röntgenbeugungsdaten durchzuführen – weit über das im Studium erworbene Grundwissen zur Beugung hinaus. [...] Ich bin fest davon überzeugt, dass sie eine glänzende Karriere in der Wissenschaft machen wird.“

Dem schließen wir uns als Preiskomitee an und freuen uns nun, Frau Wartner die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2023 übergeben zu können.

FLORIAN MEURER



Florian Meurer wird für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem englischen Titel „Anomalous dispersion refinements in the range of absorption edges“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Michael Bodensteiner, in der Zentralen Analytik „Röntgenstrukturanalyse“ der Fakultät für Chemie und Pharmazie der Universität Regensburg an. Herr Meurer hat Chemie studiert.

Damit hat sich Herr Meurer in seiner Masterarbeit – wie einst auch Lieselotte Templeton – mit der anomalen Dispersion beschäftigt, also mit einer sehr grundlegenden Fragestellung der theoretischen und experimentellen Kristallographie mit Röntgenstrahlung.

Um die Intensitäten eines Beugungsexperiments einer Kristallstruktur eindeutig zuweisen zu können, benötigt man eine genaue Beschreibung des Streuverhaltens der Elektronen der einzelnen Atome. Um dieses Streuverhalten möglichst präzise abzubilden, wird es in einen voll-elastischen Anteil, bei dem die Photonenenergie erhalten bleibt, und einen inelastischen Anteil, bei dem ein Teil der Photonenenergie auf die Elektronen übertragen wird, aufgeteilt. Besonders signifikant ist der inelastische Anteil, also die anomale Dispersion, bei einzelnen elementspezifischen Energien, den sogenannten Absorptionskanten.

Der inelastische Anteil wird in Beugungsexperimenten für gewöhnlich durch tabellierte Werte abgebildet. Die tatsächlichen Oxidationsstufen und Bindungssituationen können so häufig nur unzureichend beschrieben werden. Hier setzt die Arbeit von Herrn Meurer an. Er hat durch freies Verfeinern der Korrekturparameter der anomalen Dispersion eine verbesserte Beschreibung der inelastischen Anteile und damit des kristallographischen Modells erreicht. Dabei wurden Beugungsmessungen an zwei verschiedenen Molybdänverbindungen an der Rossendorf-Beamline der *European Synchrotron Radiation Facility* in Grenoble bei verschiedenen Energien durchgeführt und die Modelle sowohl mit verfeinerten als auch tabellierten Parametern mit ebenso aufgenommenen Röntgenbeugungsspektren derselben Verbindungen verglichen.

Herr Meurer konnte so belegen, dass die aus Beugungsexperimenten gewonnenen Werte mit den entsprechenden Röntgenabsorptionsspektren übereinstimmen sowie signifikant zur Verbesserung der Güte eines Strukturmodells beitragen können. Weiterhin konnte er zeigen, dass es selbst mit Daten von herkömmlichen Labordiffraktometern, mittels der verfeinerten Dispersionswerte, möglich ist, aus Beugungsdaten Rückschlüsse auf den Ladungszustand von Atomen zu ziehen.

Das Verfeinern der Dispersionskorrektur wurde von Herrn Meurer weiterhin auf experimentelle Parameter, wie z. B. die Auflösung der Daten, die Wahl des kristallographischen Modells (*independent atom model*, *Hirshfeld atom refinement*, *multipole model*) und mögliche Korrelationen der neuen Parameter zu bereits bestehenden Parametern im Modell überprüft.

Im Erstgutachten seiner Masterarbeit von Nikolaus Korber ist zu lesen: „Nach Auskunft von Herrn Bodensteiner zeichnete [sich Herr Meurer] bei den praktischen Arbeiten durch ein hohes Maß an Eigenständigkeit, technisches Geschick und eine präzise Arbeitsweise aus. Die Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern und die Organisation der Synchrotron-experimente hat er maßgeblich selbst koordiniert. [...] Insgesamt handelt es sich um eine weit überdurchschnittliche, ausgezeichnete Masterarbeit.“

Auch das Preis-Komitee schließt sich dieser Einschätzung an. Daher freuen wir uns, Herrn Meurer nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2023 übergeben zu können.

Wer mehr zu beiden Preistragenden erfahren möchte, ist herzlich zu den *Young Crystallographers Lightning Talks* (Mikrosymposium 11), morgen, am Dienstag-Nachmittag eingeladen.

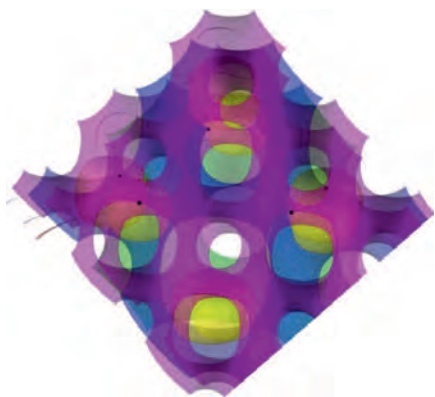
Damit sind wir am Ende der Preisverleihung angekommen. Wir wünschen beiden Preistragenden eine erfolgreiche Zukunft und freuen uns auf ihr Engagement in oder für unsere Gesellschaft.

Tobias Beck (Hamburg), Constantin Buyer (Stuttgart), Holger Kohlmann (Leipzig),
Tilman Leisegang (Freiberg), Jakob Möbs (Marburg), Thomas Schleid (Stuttgart)

IN ERINNERUNG AN KARL FISCHER

Es ist mir ein Anliegen mit diesen Worten Herrn Prof. Karl Fischer noch einmal persönlich anzusprechen. Hiermit möchte ich meine Gedanken, die sowohl mich als auch meinen Mentor Dirk C. Meyer bewegen, in dieser Form teilen. Prof. Fischer zählt für uns ganz maßgeblich zu den Begleitern des Weges. Er hat mir, neben dem langjährigen fachlichen und persönlichen Austausch, einen besonderen Wert geschenkt, indem er mich vor etwa fünf Jahren in sein *Parameter Space Concept* involvierte. Im September 2019 hat mich Karl Fischer in Saarbrücken empfangen und wir haben lange über die Möglichkeiten und die Vor- und Nachteile der neuartigen Strukturlösungsmethodik diskutiert. Der damalige Impuls wird stets in meinen Gedanken bleiben. Dirk Meyer erinnert sich insbesondere an ein prägendes Ereignis, als ihn Karl Fischer zur DGK-Tagung in Salzburg nach vorn blickend an die Hand nahm. Er war der Entwicklung der Kristallographie in den neuen Bundesländern sehr zugewandt und auch mit unserem gemeinsamen Mentor und universitären Lehrer Peter Paufler in besonderer Wertschätzung verbunden. Für unsere Integration in die Großgeräte-Forschungslandschaft in Hamburg am Deutschen Elektronensynchrotron DESY hat er sich in seinen Funktionen in besonderer Weise eingesetzt und es sind daraufhin sehr schöne Ergebnisse entstanden. Das Werk *Resonant Anomalous X-Ray Scattering: Theory and Applications*¹ gehört zu unserer täglichen Ausstattung und wir berufen uns des Öfteren auf den dadurch gegebenen Ideengewinn. Mein Umfeld und ich sehen ihn als einen ganz bedeutenden Kristallographen.

Als Autor dieser Zeilen möchte ich an dieser Stelle auf ein Thema, das Karl Fischer sehr am Herzen lag und an dem wir in einem aktuellen Forschungsprojekt zusammenarbeiteten, genauer eingehen: Die Idee des *Parameter Space Concepts*, die er zunächst über viele Jahre hinweg mit seinen lieben Fachkollegen Armin Kirfel und Helmuth Zimmermann diskutierte und entwickelte. Dirk Meyer sieht das Konzept aus diesem Kreis in einer Reihe mit Arbeiten zur Kristallstrukturlösung, die bereits mit höchsten Preisen gewürdigt wurden.



Isoflächen ausgewählter Reflexintensitäten im 3-dimensionalen Parameterraum. Die gemeinsamen Schnittpunkte der Flächen (schwarze Quadrate) legen die freien Parameter der Kristallstruktur fest.

¹ K. Fischer, G. Materlik, C. J. Sparks: *Resonant anomalous X-ray scattering: theory and applications*, Elsevier (1994), ISBN 978-0444820259.

ZUR HISTORISCHEN ENTWICKLUNG DER *PARAMETER SPACE CONCEPT-METHODE*

Karl Fischer hatte im Jahr 2002 die herausragende Idee, eine Auswahl verschiedener möglicher experimenteller Reflexionsamplituden von, sagen wir, (100) in einer quadratischen „Einheitszelle“ abzubilden, die für die x -Koordinaten $x_1 \otimes x_2$, $[0 \leq x_1, x_2 \leq 0,5]$ von zwei Atomen aufgespannt wird (zentrische Struktur). Die durch „geschlossene Linien“ dargestellten Korrelationen sehen dabei ziemlich glatt und einfach aus. Zusammen mit einer ähnlichen Karte für die möglichen (200)-Amplituden ergab sich „direkt offensichtlich“ eine Strukturlösung im obigen Quadrat. Für drei Atome können analoge 2-dimensionale „Ebenen“ in einem Würfel gezeichnet werden.

- (1) Wissend, dass alle möglichen 1-dimensionalen 2-Atom-Strukturen analytisch gelöst werden können, nicht aber Strukturen von mehr als drei Atomen, stellte sich die Frage, wie man es mit ähnlichen Mitteln wie oben machen kann.
- (2) Weiterhin ist bekannt, dass 3-dimensionale Strukturen aus 1-dimensionalen Strukturprojektionen „rekonstruiert“ werden können (z. B. durch *Punktomographie*² und mit anderen Mitteln).
- (3) Karl Fischer folgte H. Ott³, indem er die Aufgabe auf 1-dimensionale Strukturprojektionen von, sagen wir, m unabhängigen Atomen reduzierte, von denen angenommen wird, dass sie (mehr oder weniger) die gleiche Streukraft f haben.
- (4) Es stellte sich sofort heraus, dass ein *Parameterraum* von, sagen wir, m Dimensionen, das richtige Werkzeug liefert, um die Koordinaten für m unabhängige Atome einer entsprechenden 1-dimensionalen Projektion einer 3-dimensionalen Kristallstruktur zu finden, z. B. durch Schneiden einer ausreichenden Anzahl von $(m - 1)$ -dimensionalen Mannigfaltigkeiten $\mathcal{M}$, analog zu den „geschlossenen Linien“ für $m = 2$.
- (5) Die hohe Auflösung der Ott-Algebra legt es nahe, jede Koordinatenachse in „viele“ (sagen wir n) gleiche Abschnitte zu unterteilen, sodass n^m „Rasterpunkte“ überprüft werden müssen, damit jede beobachtete Reflexionsamplitude mehr oder weniger genau mit der berechneten übereinstimmt, basierend auf der Koordinatenkombination jedes Rasterpunktes.
- (6) Dieser enorme Rechenaufwand kann jedoch für gleiche Atome durch Permutationssymmetrie der Ordnung $m!$ reduziert werden. Strukturprojektionen von „moderater“ Größe sollten also auf diese Weise lösbar sein, wodurch sowohl das Phasenproblem als auch die Aufgabe der Entfaltung von Patterson-Karten vermieden wird.
- (7) Das einfachste mögliche Problem muss also lauten: Verwende „geometrische Strukturfaktoren“ $G_m(h) = 2 s(h) g(h) = 2 s(h) \left| \sum_{j=1}^m \cos 2\pi h x_j \right|$ (mit dem Vorzeichen $s(h)$ und einem Faktor 2 zur Lösung von zentrosymmetrischen Strukturen).

² K. Pilz: *Weiterentwicklung und Anwendung einer algebraischen Methode zur Teilstrukturbestimmung, ein Beitrag zur Eindeutigkeit von Strukturanalysen*, Doktorarbeit, Universität des Saarlandes, Saarbrücken (1996).

³ H. Ott: IX. Zur Methodik der Strukturanalyse, *Zeitschrift für Kristallographie* 66 (1928) 136.

- (8) Parameterräume von >3 Dimensionen sind „normale Werkzeuge“ für Mathematiker und Informatiker, aber noch nicht in der Kristallographie. Karl Fischer hat daher Helmuth Zimmermann (Erlangen) um Rat gefragt, der in Mathematik promoviert hatte.
- (9) Da Karl Fischer keine Praxis in „Direkten Methoden“ hatte, bat er Armin Kirfel (Bonn) um Zusammenarbeit: Er war einige Zeit Schüler von M. Woolfson gewesen, hatte also theoretischen Hintergrund und viel Arbeitserfahrung.
- (10) So begann die frühe Zusammenarbeit zur Methodik mit H. Zimmermann (2003 bis 2009, einige grundlegende Definitionen) und mit A. Kirfel (2003 bis 2017, die meisten Programme, fast alle Testberechnungen).

Karl Fischer selbst blieb seinem Herzensprojekt, als das er mir gegenüber die neuartige Strukturlösungsmethodik wiederholt bezeichnete, bis zum Ende seines Lebens aktiv verbunden, und: sie funktioniert. Es handelt sich meiner Einschätzung nach um einen vielversprechenden alternativen Zugang zur Kristallstruktur. Ich hoffe zur Sichtbarkeit persönlich und mit Unterstützung meines Umfeldes beitragen zu können. Weitere Veröffentlichungen zu diesem Thema sind auf dem Wege.

Zum Wohle seiner Frau suchte Karl Fischer ein Ruheheim auf und wir hatten, bis ich über eine Verschlechterung seines Zustandes ganz überrascht war, regelmäßig Videokonferenzen. Da ich für das im Zusammenhang stehende DFG-Projekt in meiner *AG Resonante Röntgenmethoden und Kristallmodellierung* einen international rekrutierten Mitarbeiter habe, liefen die Gespräche jeweils pünktlich montags um 10:00 Uhr via Internet in Englisch.

In Gedanken sind Sie lieber Karl Fischer beständig bei uns und zu Weilen fragen wir Sie auch gern um Rat. Es war eine sehr schöne Zeit mit Ihnen. Wir behalten Sie mit Ihrer stetigen Bescheidenheit und Offenheit und Ihren zahlreichen Ermutigungen und Hinweisen bei Ihrer gegebenen geistigen Größe als besonderen Wissenschaftler, akademischen Lehrer und guten Freund in bester Erinnerung. Ihre harmonische Verbundenheit mit meinem Umfeld und der kristallographischen Fachgesellschaft wird mich auch weiterhin führen. Danke lieber Karl Fischer, auch im Namen von M. Nentwich, des wissenschaftlichen Nachwuchses und aller Begleiteten, für Ihren Beistand und dafür, dass Sie auch heute noch inspirierend dabei sind.

Mit stillem Gruß aus Freiberg,
Matthias Zschornak

ANKÜNDIGUNGEN



© Val Thoermer | stock.adobe.com

**32nd ANNUAL MEETING
of the GERMAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY (DGK)**

SAVE THE DATE

**18–21 MARCH 2024
BAYREUTH**

www.dgk-conference.de

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN MAX-VON-LAUE-PREIS 2024

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.

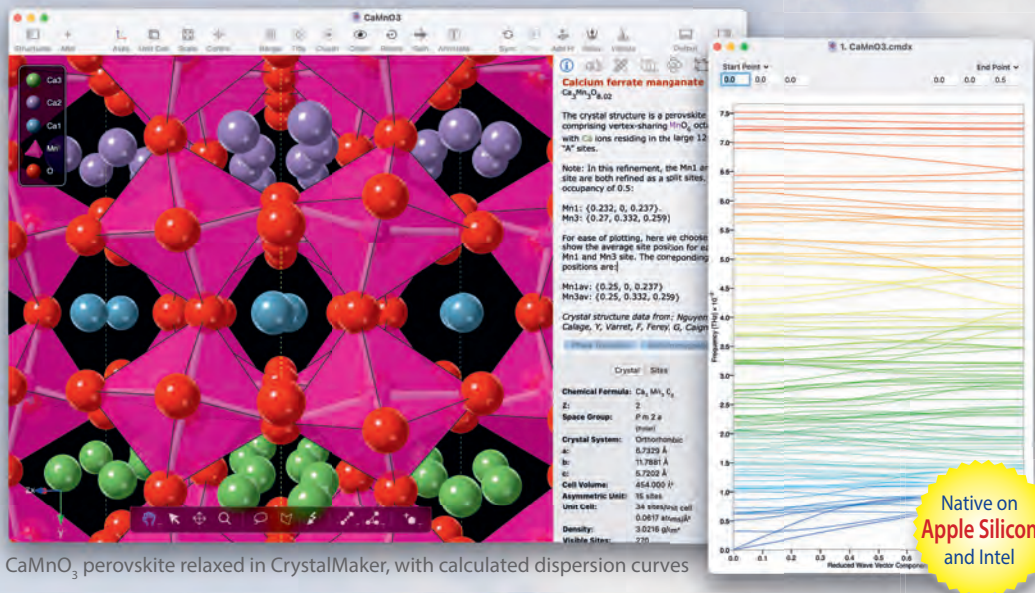
Einsendeschluss: **30. November 2023**

NEW
Version 11

BEYOND VISUALIZATION

CrystalMaker[®]

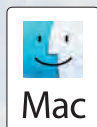
CrystalMaker[®] 11 is the best way to understand complex materials. With its comprehensive file import, multi-structure display, crystal engineering tools and energy modelling, CrystalMaker is the essential tool for modern crystallography. Workstation power on your desktop. Elegant, Easy, Fun.



Native on
Apple Silicon
and Intel

Key Features in Version 11

- Fast crystal energy modelling on your desktop!
- Phonon calculations and dispersion curves
- Physical properties calculations
- Temperature/pressure simulations
- Crystal surface relaxation
- Silicate framework automation
- AI-powered hand tracking (Mac)
- Molecular volume, surface area calculations



CrystalMaker Software
30 Years of Innovation

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2024

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 **30.11.2023** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

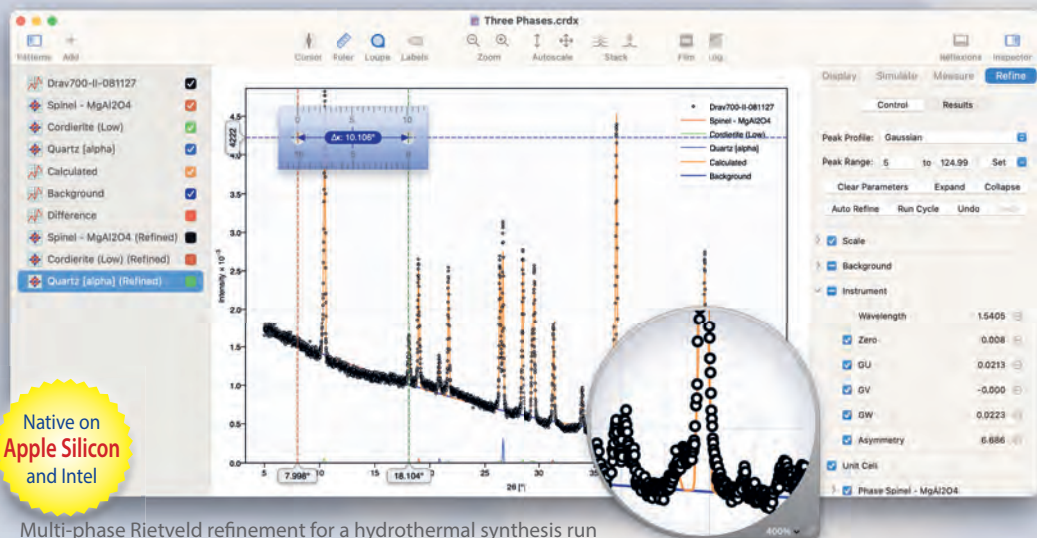
Prof. Dr. Norbert Sträter
Vorsitzender des Preiskomitees
Universität Leipzig
Institut für Bioanalytische Chemie
E-Mail: *strater@bbz.uni-leipzig.de*

NEW
Version 7

RIETVELD REFINEMENT MADE EASY

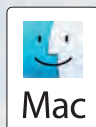
CrystalDiffract[®]

CrystalDiffract[®] 7 brings x-ray and neutron powder diffraction to your desktop for easy characterization of experimental data. Adjust sample and instrumental settings in real time, and take advantage of comprehensive Phase ID plus high-speed multi-phase Rietveld refinement. Elegant, Easy, Efficient.



Key Features in Version 7

- Rietveld refinement engine, developed in-house for maximum performance and ease-of-use
- Multi-phase structure refinement
- Automatic background subtraction
- Comprehensive Phase ID
- Real-time diffraction simulations, including live structure editing with CrystalMaker[®]
- True native Mac/Windows code for full system integration and superior usability
- Flexible site licensing



CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL-HERMANN-MEDAILLE 2024

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 **30.11.2023** zuzusenden.

Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

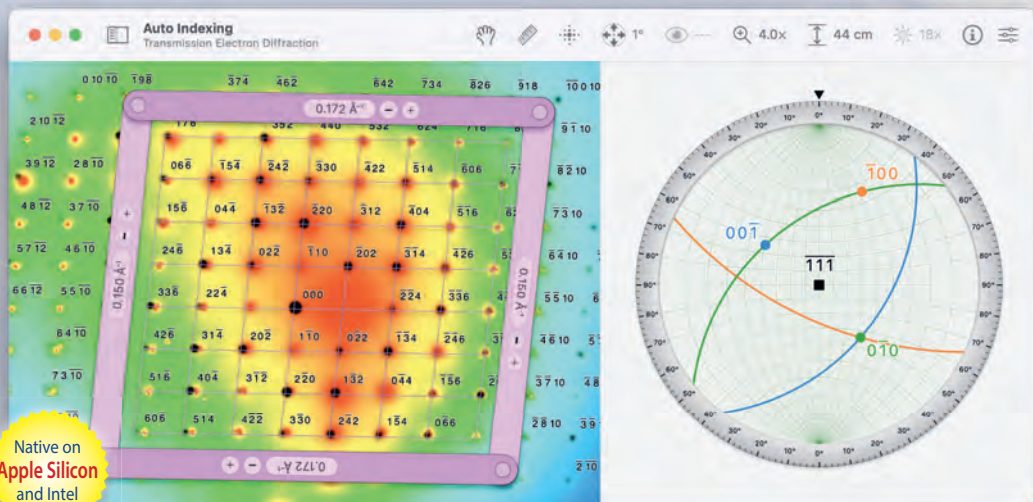
Dr. Manfred Weiss
Helmholtz-Zentrum Berlin
Albert-Einstein-Str. 15
12489 Berlin-Adlershof
Tel.: 030 8062 13149
E-Mail: *manfred.weiss@helmholtz-berlin.de*

NEW
Version 5

EXPLORE DIFFRACTION SPACE

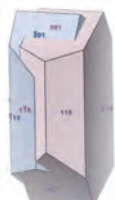
SingleCrystalTM

SingleCrystal 5 is the easiest way to visualize and understand diffraction properties of crystals. Simulate multi-phase X-ray, neutron and electron diffraction. Visualize reciprocal lattices, Brillouin zones and stereographic projections. Auto-indexing tools let you quickly determine your crystal's orientation. Elegant, Easy, Efficient.

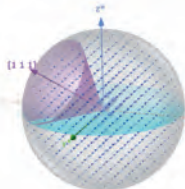


Auto-indexing an observed TEM pattern using the Smart Grid tool

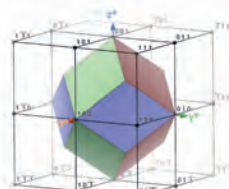
NEW FEATURES IN VERSION 5



Morphology



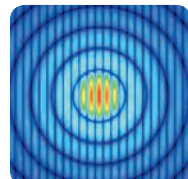
Diffraction in 3D



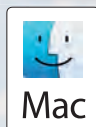
Brillouin Zones



Auto Grid



Fourier Transforms



CrystalMaker Software
30 Years of Innovation

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN LIESELOTTE-TEMPLETON-PREIS 2024

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen auch im Jahr 2024 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 32. Jahrestagung der DGK, dann in Bayreuth, verliehen.

Der Preis wird jährlich an bis zu maximal drei Preisträger oder Preisträgerinnen 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 Kandidaten und Kandidatinnen vorzuschlagen. Bitte geben Sie diese Ausschreibung auch an Kollegen und Kolleginnen weiter. Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder der DGK, Mitglieder fachnaher und assoziierter Gesellschaften und andere interessierte Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen.

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

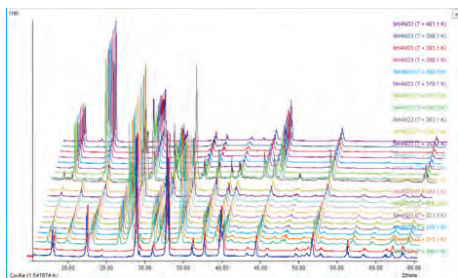
Einsendeschluss: 30. November 2023



MATCH!

Phase Identification from Powder Diffraction

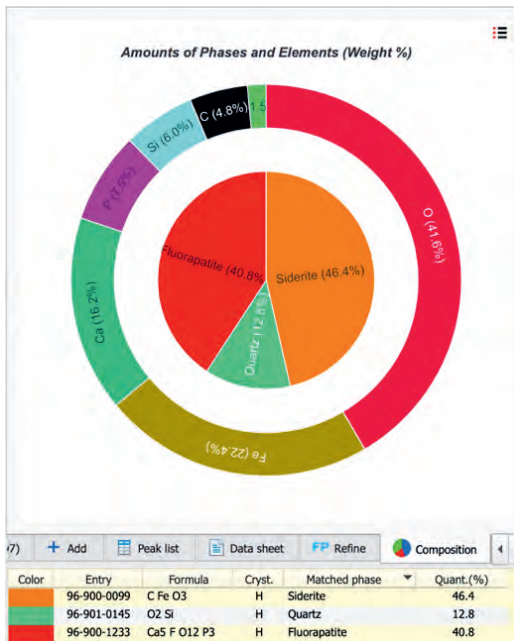
Neuerungen in den letzten Versionen



„3D“-Vergleich mehrerer Diffraktogramme, z.B. zur Analyse von Phasenübergängen



Dark mode: Kontrastärmere Darstellung für geringes Umgebungslicht



Übersichtliche Ausgabe der Ergebnisse der qualitativen und quantitativen Analyse als **Kuchendiagramm**

Match! läuft unter Windows, macOS und Linux. Eine **kostenlose Testversion** sowie weitere Informationen sind auf unserer Webseite verfügbar:

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



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>

TAGUNGEN UND TERMINE

August 2023

- 17.08. – 19.08.2023 **International Workshop on Improving Data Quality and Quantity in XAFS Spectroscopy (Q2XAFS2023)**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://www.iucr.org/resources/commissions/xafs/iucr-2023-satellite-q2xafs2023>
- 19.08. – 22.08.2023 **IUCr Crystallographic Computing School**
Melbourne, Australien
Kontakt: <http://www.cryst.chem.uu.nl/lutz/IUCrSchool2023>
- 19.08. – 21.08.2023 **IUCr Electron Crystallography School 2023**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://sites.google.com/monash.edu/ecs2023/home>
- 21.08.2023 **Recent Advances in Crystallographic Fragment Screening Satellite Workshop**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://www.ansto.gov.au/whats-on/recent-advances-crystallographic-fragment-screening>
- 22.08. – 29.08.2023 **26th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr2023)**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://iucr2023.org>
- 22.08.2023 **Raw diffraction data reuse: the good, the bad and the challenging**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://www.iucr.org/resources/data/commdat/melbourne-workshop>
- 22.08.2023 **X-Ray Absorption Fine Structure (XAFS) Workshop**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://www.iucr.org/resources/commissions/xafs/iucr-2023-xafs-workshop>

September 2023

- 04.09.2023 **GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2023**
Leipzig
Kontakt: <https://www.wifo2023.de>

- 04.09. – 08.09.2023 **25th Conference on Organometallic Chemistry (EuCOMC XXV)**
Madrid, Spanien
Kontakt: <https://congresosalcala.fgua.es/eucomc2023>
- 05.09. – 08.09.2023 **International Symposium on Industrial Crystallization**
Glasgow, Großbritannien
Kontakt: <https://www.isic2023.com>
- 05.09. – 12.09.2023 **EMBO practical course: Image processing for cryo-electron microscopy**
London, Großbritannien
Kontakt: <https://meetings.embo.org/event/23-cryo-em-image-processing>
- 07.09. – 08.09.2023 **STOE User Meeting 2023**
Darmstadt
Kontakt: <https://www.stoe.com/meetings/stoe-in-person-user-meeting>
- 10.09. – 15.09.2023 **Physics of Viruses**
Bad Honnef
Kontakt: https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2023/physics_of_viruses
- 18.09. – 22.09.2023 **School for Master Students: Quantum Dynamics – Fundamentals and Realizations**
Dresden
Kontakt: <https://www.pks.mpg.de/quant23>
- 21.09. – 22.09.2023 **12th German-French Workshop on Oxide, Dielectric and Laser single crystals (WODIL 2020)**
Berlin
Kontakt: <https://www.ikz-berlin.de/~oxide/2023>
- 24.09. – 29.09.2023 **International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order**
Evian, Frankreich
Kontakt: <https://complex-orders.grenoble.cnrs.fr>
- 25.09. – 27.09.2023 **Summer School “Advanced methods for the characterization of applied materials”**
Mülheim an der Ruhr
Kontakt: <https://dgk-home.de/en/meeting/summer-school-advanced-method>

- 26.09. – 29.09.2023 **1st French-German Young Crystallographers' Meeting**
Straßburg, Frankreich
Kontakt: <https://www.ycm1.xyz>
- 26.09. – 29.09.2023 **International Workshop on Advanced Ceramics (IWAC09)**
Limoges, Frankreich
Kontakt: <https://www.iwac09.unilim.fr>

Oktober 2023

- 04.10. – 05.10.2023 **6th CryoNET Symposium**
Stockholm, Schweden
Kontakt: <https://www.scilifelab.se/event/6th-cryonet-symposium-in-stockholm>
- 04.10. – 06.10.2023 **10th Anniversary Meeting at DESY**
Hamburg
Kontakt: <https://dgk-home.de/aks/jkyc/hamburg-2023/>
- 09.10. – 12.10.2023 **JCMS Workshop 2023 “Trends and Perspectives in Neutron Scattering: Future Instruments at Pulsed Sources”**
Tutzing
Kontakt: <https://www.fz-juelich.de/en/jcms/expertise/conferences-and-workshops/jcms-workshops/jcms-workshop2023>
- 10.10. – 11.10.2023 **Bruker AXS European SC-XRD Users Meeting**
Karlsruhe
Kontakt: <https://www.bruker.com/de/news-and-events/events/sc-xrd-user-meeting.html>
- 13.10.2023 **New York City Integrative Structural Biology Symposium (NYC-ISB23)**
New York, USA
Kontakt: <https://nysbc.org/nyc-isb23>
- 20.10. – 22.10.2023 **11th HeCrA Conference**
Larissa, Griechenland
Kontakt: <https://sites.google.com/view/hecra2023/home>

Januar 2024

- 04.01. – 07.01.2024 **14. Theoworkshop 2024 | jDPG – Kritische Phänomene und Phasenübergänge**
Freusburg
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2024/jdpg-theoworkshop-2024>

März 2024

- 04.03. – 08.03.2024 **DPG-Frühjahrstagung (Teilchenphysik)**
Karlsruhe
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2024/dpg-fruehjahrstagung-karlsruhe>
- 11.03. – 15.03.2024 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Photonik**
Freiburg
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2024/dpg-fruehjahrstagung-freiburg>
- 17.03. – 22.03.2024 **87. Jahrestagung der DPG und DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie**
Berlin
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2024/dpg-fruehjahrstagung-berlin>
- 18.03. – 21.03.2024 **32nd Annual Meeting of the German Crystallographic Society**
Bayreuth
Kontakt: <https://dgk-conference.de>

DECTRIS

new

PILATUS 4

DECTRIS' latest HPC detectors for fast data acquisition with large area and high quantum efficiency

A wide dynamic range

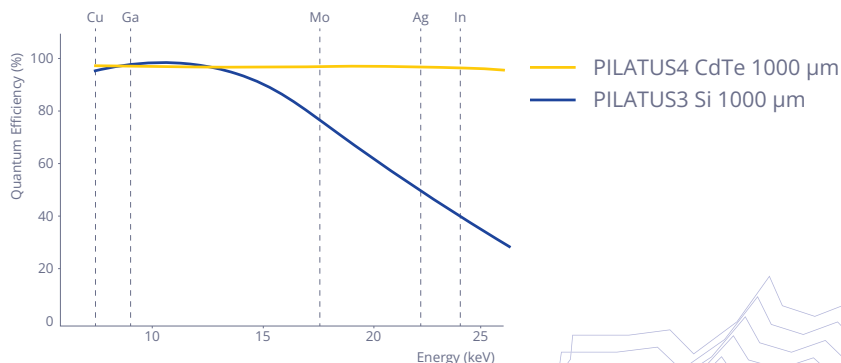
Superior count rates and zero detector background

Large & efficient

Active areas of up to 155 x 162 mm, with more than 95% quantum efficiency

Versatile

High quantum efficiency from Cu to In; four energy-discriminating thresholds for polychromatic applications



For more
information
scan here

dectris.com



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

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

<http://dgk-home.de>

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

WWW-Redakteur:

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

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

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

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

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

WWW-Redakteur:

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

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

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

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

<http://www.dgkk.de>

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

WWW-Administratoren:

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

ANTRAG AUF AUFNAHME IN DIE

DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

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

An den

Vorsitzenden der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK),
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 | [] | Junge Kristallographen |
| AK 2 | [] | Lehre der Kristallographie |
| AK 3 | [] | Experimentelle Methoden |
| AK 4 | [] | Theoretische Methoden |
| AK 5 | [] | Biologische Kristallographie |
| AK 6 | [] | Chemische Kristallographie |
| AK 7 | [] | Physikalische Kristallographie |
| AK 8 | [] | Mineralogische Kristallographie |
| AK 9 | [] | Materialwissenschaftliche Kristallographie |

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 Max-von-Laue-Preis 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 28. März 2023 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 steuerrechtlichen Bestimmungen bis zu zehn Jahre ab der schriftlichen Bestätigung des Austritts durch den Vorstand aufbewahrt.