

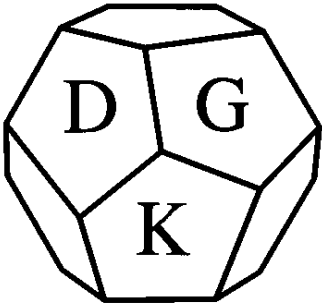


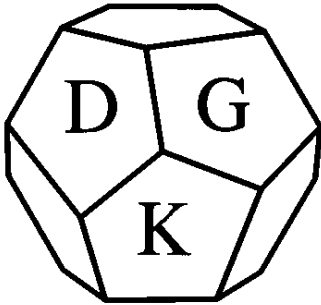
Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e. V.

Mitteilungen

Heft 54

Oktober 2024





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, Hilgenberg 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

Vorsitzende: Prof. Dr. Ute Kolb
Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Centre for High Resolution Electron Microscopy
Duesbergweg 10-14, 55128 Mainz
Tel: 06131 39 24154
E-Mail: kolb@uni-mainz.de

Stellvertretender Vorsitzender: Prof. Dr. Thomas Schleid
Universität Stuttgart, Institut für Anorganische Chemie
Pfaffenwaldring 55, 70569 Stuttgart
Tel: 0711 685 64239, Fax: 0711 685 54239
E-Mail: schleid@iac.uni-stuttgart.de

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

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

Vorsitzender des Nationalkomitees: Prof. Dr. Norbert Sträter
Universität Leipzig, Biotechnologisch-Biomedizinisches Zentrum
Deutscher Platz 5, 04103 Leipzig
Tel: 0341 97 31311
E-Mail: strater@bbz.uni-leipzig.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@ruhr-uni-bochum.de

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

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

ich freue mich, als neu gewählte Vorsitzende der DGK dieses Grußwort verfassen zu dürfen und bedanke mich nochmals für ihr Vertrauen.

Fachtagungen als Foren zu einem intensiven, persönlichen Austausch sind für unsere wissenschaftliche Arbeit unerlässlich. Die DGK unterstützt diese Formate und fördert besonders jüngere WissenschaftlerInnen. Außerdem stärkt die Zusammenarbeit mit anderen Verbänden, auf nationaler, europäischer und internationaler Ebene, die Kristallographie. Die besonderen Augenblicke eines Jahres und wichtige Ereignisse unserer Gesellschaft sind in unseren DGK-Jahresheften festgehalten. Vielen Dank an Prof. Dr. Dirk C. Meyer und Dr. Hartmut Stöcker für ihre langjährige Redaktionsarbeit.

So fanden unsere „Kristallographischen Festspiele“ in Bayreuth in Form der 32. DGK-Jahrestagung vom 18. bis 21. März 2024 mit fast 300 Teilnehmern und 29 Ausstellern statt. Vielen Dank an die lokalen Organisatoren Prof. Dr. Natalia Dubrovinskaia, Prof. Dr. Sander van Smaalen und Prof. Dr. Leonid Dubrovinsky samt ihrem Team. In Bayreuth wurde, neben dem Vorstand, auch die Zusammensetzung des Nationalkomitees, sowie zwei der insgesamt fünf Preiskomitees neu gewählt. Vielen Dank an alle, die sich hier bisher eingebracht haben und zukünftig engagieren werden. Die bereits begonnene Reorganisation der DGK-Arbeitskreise auf neun kompakte Arbeitskreise, wurde durch die Wahl der SprecherInnen und ihrer VertreterInnen konsolidiert. Dies ist jetzt auch auf der Homepage der DGK im Bereich der neuen AKs wiedergegeben.

Wir freuen uns auf die 33. DGK-Jahrestagung, die vom 10. bis 13. März 2025 in Hannover unter der Organisation von apl. Prof. Dr. rer. nat. Claus Rüscher und seinem Team stattfinden wird. In diesem Rahmen ist ein GDCh-Vernetzungstreffen, wie es in Frankfurt 2023 bereits erfolgreich durchgeführt wurde, geplant.

Auch in diesem Jahr förderte die DGK mit fünf Reisestipendien zum 34. *European Crystallographic Meeting* (ECM 34 vom 26. bis 31. August 2024 in Padova, Italien) und drei Reisestipendien zur *European Crystallography School* (ECS vom 24. bis 30. Juni 2024 in Nancy, Frankreich) junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Die nächste ECS findet vom 22. bis 29. Juni 2025 in Ohrid, Mazedonien statt.

Die Arbeiten zur erstmaligen Ausrichtung des *28th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCr)* in Berlin vom 18. bis 25. August 2029 im Estrel Hotel und Estrel Congress Center sind bereits in vollem Gange.

Unsere Gesellschaft lebt besonders von der aktiven Teilnahme aller Kristallographen. Daher möchte ich an dieser Stelle die Bitte um die Erstellung von Beiträgen zum Jahresheft und der Homepage, Vorschläge zu PreisträgerInnen oder die Durchführung von Kursen und Schulen äußern.

Ich freue mich, Sie auf den kommenden Veranstaltungen zu treffen und hoffe auf eine anregende und zukunftsorientierte Zusammenarbeit.



Ihre Ute Kolb
(DGK-Vorsitzende)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum	3
Vorstand der DGK	4
Vorwort	5
Inhaltsverzeichnis	6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie am 19.03.2024	9
Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters	19
Rückblick auf die 32. Jahrestagung der DGK	22
9 th European Crystallography School (ECS9) in Nancy: Ein kurzer Erlebnisbericht	29
Berichte vom 26. Kongress der IUCr in Melbourne	33

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht des AK1 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“	43
21. DMG-Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“	47

Personalia:

Jubilare 2024	53
Verstorbene Mitglieder	57
Lieselotte-Templeton-Preise 2024	58
Max-von-Laue-Preis 2024 an Ella M. Schmidt	63
Will-Kleber-Gedenkmünze 2024 an Kay Diederichs	66
Carl-Hermann-Medaille 2024 an Juri Grin	69
Hans Burzlaff	72

Ankündigungen:

33 rd Annual Meeting of the DGK	77
Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2025	78
Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2025	80
Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2025	82
Aufruf zu Nominierungen für den Lieselotte-Templeton-Preis 2025	84
Aufruf zu Nominierungen für den Waltrude und Friedrich Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2025	86
Tagungen und Termine	88
Homepages von DGK, DMG und DGKK	95
Aufnahmeformular	97
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	99
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten	100

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

AM 19.03.2024, UM 13:00 BIS 14:30 UHR
IN DER GREAT HALL K9 DES TAGUNGSHOTELS ARVENA KONGRESS
IN BAYREUTH

Bei den meisten der angesetzten Wahlen mussten Stimmzettel zeitaufwendig ausgezählt werden, da diese als geheime Wahl durchgeführt werden müssen. Darüber hinaus konnte in der Regel eine nachfolgende Wahl erst nach Auszählung der vorherigen Wahl beginnen. Aus diesem Grund wurden mehrere andere Tagesordnungspunkte vorgezogen und jeweils während der Auszählungen behandelt. In diesem Protokoll sind sie in ihrer ursprünglichen Reihenfolge aufgeführt.

1 Begrüßung der Teilnehmer

Der Vorsitzende, Thomas Schleid, eröffnet die Sitzung um 13:00 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 1033 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 52 Anwesenden erreicht. In die Teilnehmerliste haben sich 78 Personen eingetragen.

3 Annahme der Tagesordnung

Der Tagesordnungspunkt 18 „Sonstiges“ wird auf 17 vorgezogen, sodass die Ankündigung der 33. Jahrestagung 2025 in Hannover letzter Punkt der Tagesordnung ist. Die Tagesordnung wird dann ohne weitere Veränderungen, wie versandt, angenommen.

4 Genehmigung des Protokolls

Das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 28.03.2023 wird, wie in Heft 53 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 Natalia Dubrovinskaia, Leonid Dubrovinsky und Sander van Smaalen für die Vorbereitung der Jahrestagung. Es ist erfreulich, dass die Tagungen jetzt wieder wie üblich in Präsenz stattfinden können. Er stellt die vom Vorstand vorgeschlagene Nachfolgerin als Vorsitzende, Ute Kolb, vor. Die Ausrichtung des 28. Kongresses der IUCr 2029 wurde in Melbourne wie von uns beantragt an die DGK vergeben. Die Neustrukturierung der Arbeitskreise wird mit den konstituierenden Sitzungen auf dieser Tagung vorerst abgeschlossen sein und die inhaltliche Arbeit wird hoffentlich aufleben. Es lässt sich sagen, dass die Gesellschaft die Herausforderungen durch Covid recht gut überstanden hat. Zum Abschluss wird noch auf die Ausschreibung von Reise stipendien für Studenten zum ECM in Padua hingewiesen.

6.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Thorsten Gesing berichtet von der Delegiertenversammlung der IUCr in Melbourne im vergangenen Jahr. Erfreulicherweise wurden wieder mehr Deutsche in die Kommissionen der IUCr gewählt. Ein Antrag zum Ausschluss Russlands aus der IUCr hatte im Vorfeld zu heftigen Diskussionen im Nationalkomitee und Vorstand der DGK geführt. Die tatsächliche Behandlung auf der Delegiertenversammlung war dann antiklimatisch; es wurde beschlossen, den Antrag nicht zur Entscheidung anzunehmen, da formelle Voraussetzungen nicht erfüllt seien. Im Rahmen dieser Diskussion in der DGK wurden auch grundsätzliche Erwartungen an das Abstimmungsverhalten der deutschen Delegation diskutiert; Deutschland hat in der Delegiertenversammlung der IUCr vier Stimmen. Es wurde vom Vorstand nach ausführlicher Diskussion auf der Vorstandssitzung entschieden: „Die einzelnen Delegierten sind in ihrem Stimmverhalten grundsätzlich an die Vorgaben des NK gebunden sowie, soweit vorliegend, an Beschlüsse des Vorstands der DGK. Ein einheitliches Abstimmungsverhalten der gesamten Delegation ist notwendig. Sollte kein mehrheitliches Votum der Delegation herbeigeführt werden können, dann muss Stimmhaltung erfolgen.“

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Töbrens berichtet: Die DGK hat derzeit 1044 Mitglieder, davon 231 Frauen, 802 Männer und 11 unpersönliche Mitglieder. Erfreulicherweise ist die Mitgliederzahl gegenüber dem Vorjahr um 6 gestiegen. Trotzdem gibt die Altersstruktur der Mitgliedschaft Anlass zur Sorge; von den persönlichen Mitgliedern sind derzeit 344 älter als 65 Jahre. Dies ist eine Folge der zahlenstarken Gründergeneration.

Allerdings sind in diesen Zahlen recht viele Mitglieder enthalten, von denen keine Kontaktmöglichkeit bekannt ist und von denen auch keine Mitgliedsbeiträge eingehen. Die bevorstehende Bereinigung der Mitgliederliste wird möglicherweise zu einer Reduktion der ausgewiesenen Gesamtzahl der Mitglieder um bis zu 375 führen. Diese Situation ist immer noch auf die gesetzliche Umstellung des Abbuchungsverfahrens auf SEPA zurückzuführen, welches die Erstellung einer neuen Datenbank und einen Wechsel der Bank notwendig machte. Aufgrund der hierdurch entstandenen Probleme bei der Abbuchung der Beiträge konnte nicht sicher festgestellt werden, dass ein Mitglied tatsächlich nichtzahlend ist, sodass sicherheitshalber keine Bereinigung der Liste erfolgte. Hinzu kommt, dass diese nicht-kontaktierbaren Mitglieder kaum Kosten hervorrufen, da zum Beispiel kein Postversand der „Mitteilungen“ an sie stattfindet. Diese Probleme sind jetzt behoben und eine Bereinigung der Mitgliederdatenbank steht bevor. Es ist zu vermuten, dass ein großer Teil dieser Problemfälle auf die Altersgruppe über 65 entfällt.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann berichtet: Die Finanzaufstellung ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Zur Organisation der IUCr2029 wird eine GmbH gegründet werden, um das finanzielle Risiko zu begrenzen. Das hierfür zurückgestellt Kapital wird um 25.000 € erhöht.

Im Rahmen der Tagesordnungspunkte 6.4 und 6.5 kam es zu lebhaften Diskussionen. Insbesondere Natalia Dubrovinskaia und Leonid Dubrovinski gaben zu Protokoll, dass sie mit der Handhabung der Mitgliederliste nicht einverstanden sind.

6.5 Bericht der Kassenprüfer

Der Bericht der Kassenprüfer liegt schriftlich vor: Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2023 wurde von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) und Ullrich Pietsch (Universität Siegen) am 13. März 2024 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 2023 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

Wir möchten darauf aufmerksam machen, dass die erfolgreiche Bewerbung der DGK um die Ausrichtung der IUCr Tagung 2029 in Berlin zu ersten Ausgaben geführt hat, die die Kassenprüfer explizit unterstützen. Weitere Ausgaben dazu werden in den nächsten Jahren folgen. Die Aufstockung des Kapitals für die eventuelle Gründung einer GmbH zur Organisation der IUCr2029 um 25.000 € wird befürwortet.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Der Bericht von Claudia Weidenthaler und Jürgen Schreuer liegt schriftlich vor:

Im Berichtszeitraum fand am 15./16.02.2024 in Bad Honnef die Frühjahrssitzung des Vorstands und Beirats der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) statt.

Entsprechend dem Ergebnis der Wahlen im Herbst 2023 sind die Vorstandspositionen der DMG ab 01.01.2024 wie folgt besetzt:

Engerer Vorstand:

- Vorsitzender: Horst Marschall
- Stellv. Vorsitzender (und designierter Vorsitzender für die Amtsperiode 25/26): Frank Schilling
- Schriftführerin: Ina Alt
- Schatzmeister: Klaus-Dieter Grevel

Erweiterter Vorstand (jeweils Vorsitz und Stellvertretung):

- Sektion Petrologie und Petrophysik: Esther Schwarzenbach, Max Wilke
- Sektion Geochemie: Audrey Bouvier, Hella Wittmann-Oelze
- Sektion Angewandte Mineralogie: Daniel Vollprecht, Claudia Weidenthaler
- Sektion Kristallographie: Uta Helbig, Michael Fischer
- Young Mineralogists: Laura Czekay, Paul Krause
- AK Museen und Sammlungen: Dorothee Kleinschrot, Christin Kehrer
- AK Rohstoffforschung: Max Frenzel, Manuel Keith
- AK Schule und Hochschule: Gilla Simon, Lutz Hecht
- AK Archäometrie und Denkmalpflege: Andreas Kronz, Katrin Westner

Als Vertretung der DMG im Vorstand der DGK wurden Jürgen Schreuer und Claudia Weidenthaler bestätigt.

Die DMG misst der Öffentlichkeitsarbeit zukünftig größere Bedeutung bei und beabsichtigt diese erheblich zu intensivieren.

Für das *European Journal of Mineralogy* (EJM) war das erste Jahr als *Full Open Access Journal* erfolgreich. Bei 93 eingereichten Manuskripten und ca. 10 % Ablehnungsquote betrug die Zeit von der Einreichung bis zur Publikation im Median ca. 5 Monate; der *Impact Factor* ist auf 2,1 gestiegen. Im Jahr 2024 werden Kosten von 52 €/Seite für Mitglieder der Trägergesellschaften erhoben.

Doktorandenkurse 2024: Die aktuelle Liste ist unter

<https://www.dmg-home.org/aktuelles/doktorandenkurse> verfügbar.

Zukünftige Tagungen:

- 18.–24.08.2024: emc², Dublin, Irland, <https://emc-2024.org>, zugleich DMG-Jahrestagung 2024
- 14.–18.09.2025: GeoGöttingen, Gemeinschaftstagung DMG, DGGV, PalGes, zugleich DMG-Jahrestagung 2025

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

David Rafaja berichtet: Auch in diesem Jahr findet unsere Jahrestagung bedauerlicherweise gleichzeitig mit der DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie (SKM) statt. Im kommenden Jahr wird dies nicht der Fall sein; die Tagung der DPG findet dann am 16.–21. März 2025 statt. Für 2026 sollten die Termine sofern möglich frühzeitig abgestimmt werden.

6.8 Bericht des Kontaktes zur GDCh

Oliver Oeckler berichtet: Die Zusammenarbeit zwischen der DGK und der GDCh-Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung hat sich gut und freundschaftlich entwickelt.

Beginnend mit dem gemeinsamen Workshop „Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie“, der bereits zweimal am MPI für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden stattfand, folgte im Anschluss an die DGK-Tagung 2023 in Frankfurt ein Vernetzungstreffen, bei dem sich gemeinsame Interessen umfassend bestätigt haben. Ein solches Treffen ist für 2025 wieder vorgesehen.

Auf dem Wissenschaftsforum Chemie in Leipzig 2023 gab es eine *Session* über neue Entwicklungen in der Kristallchemie, zu der Kristallographen herzlich eingeladen waren. Dort trug u. a. Ute Kolb in einer *Keynote Lecture* vor.

Auch zwischen den „Young Crystallographers“ und den „Jungen Festen“ gibt es regen Austausch bei der Planung von Workshops.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen

Hartmut Stöcker und Dirk Meyer berichten schriftlich: Die Redaktion der DGK-Mitteilungen dankt allen Autoren für die Mitarbeit am letzten Heft, das im letzten Sommer hoffentlich alle Mitglieder erreicht hat.

Bitte denken Sie daran, Ihre gemeldete Anschrift – z. B. per Webformular auf der DGK-Homepage – auf dem aktuellen Stand zu halten.

Für das neue Heft möchten wir alle Mitglieder zu Beiträgen ermuntern. Gerne hilft die Redaktion bei der Umsetzung. Redaktionsschluss ist der 31. Mai 2024.

6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Die neuen Arbeitskreise sind bereits in der Webseite der DGK eingepflegt. Die inhaltliche Gestaltung kann aber nur durch die Arbeitskreise selbst erfolgen. Deswegen sollten sich die Mitarbeiter der Arbeitskreise Zugang zu den Textbearbeitungssystemen der Webseite besorgen.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird per Akklamation ohne Gegenstimmen entlastet.

8 Wahl des Vorstands

Es gab keine weiteren Kandidaturen zusätzlich zum satzungsgemäßen Vorschlag des amtierenden Vorstands. In den neuen Vorstand gewählt wurden:

1. Vorsitzende	Ute Kolb	(Ja 74, Nein 0, Enthaltung 0)
2. Stellvertretender Vorsitzender	Thomas Schleid	(Ja 73, Nein 0, Enthaltung 1)
3. Schriftführer	Daniel Többens	(Ja 74, Nein 0, Enthaltung 0)
4. Schatzmeister	Christian Lehmann	(Ja 73, Nein 0, Enthaltung 0)

Im Rahmen dieses Tagesordnungspunktes entzündete sich eine heftige Diskussion über das Verfahren der Kandidatensuche für den Vorstand, insbesondere ob es möglich und sinnvoll oder sogar notwendig sei, eine Kandidatur mehrerer Personen zu erreichen. Das Thema soll auf der nächsten Sitzung des Vorstands besprochen werden. Es wurde darum gebeten, dass der Vorschlag des Vorstands an alle DGK-Mitglieder weitergeleitet wird, um weitere Diskussionen zu ermöglichen.

9 Annahme der Beitragsordnung

9.1 Erhöhung der Mitgliedsbeiträge ab 2025

Die Erhöhung der Beiträge für ordentliche Mitglieder und Mitglieder im Ruhestand um 10,- € bei gleichzeitigem Wegfall der von diesen Mitgliedern erbetenen Spende in Höhe von 5,- € sowie die Erhöhung der ermäßigten Beiträge um 5,- € wird einstimmig angenommen. Diese Änderung gilt für die Mitgliedsbeiträge ab dem Jahr 2025.

Die neuen Jahresbeiträge sind dann:

A Ordentliche Mitglieder	45 €
B Studentische Mitglieder	15 €
D Doktoranden	15 € auf Antrag
E Stellungslose Mitglieder	15 € auf Antrag
F Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand	20 € auf Antrag
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.

9.2 Änderung der zeitlichen Begrenzung der Ermäßigung für Doktoranden

Der Antrag, die zeitliche Begrenzung der Ermäßigung für Doktoranden bis zum 31. Lebensjahr auf Antrag um die Kindererziehungszeiten nach § 56 SGB VI zu verlängern, wird nach ausgiebiger Diskussion zurückgezogen. Stattdessen wird ohne Gegenstimmen beschlossen, die grundsätzliche zeitliche Begrenzung zu streichen und durch eine Anzeigepflicht zur Beibehaltung der Ermäßigung zu ersetzen. Diese lautet: *Es wird davon ausgegangen, dass Mitglieder über 31 Jahre die Promotion beendet haben, sofern dies nicht anders angezeigt wird.*

10 Arbeitskreise

10.1 Umbenennung des neuen AK5 „Biologische Kristallographie“ in „Strukturbiologie“

Von den Ansprechpartnern des neuen Arbeitskreises AK5 „Biologische Kristallographie“ wurde im Vorfeld der Wunsch geäußert, diesen in „Strukturbiologie“ umzubenennen. Dieser Begriff sei im Feld der tatsächlich in diesem Arbeitskreis vertretenen Wissenschaftler verbreitet und erfreue sich einer viel höheren Akzeptanz verbunden mit einem besseren Erkennungswert. Der Antrag führte zu einer heftigen Diskussion, wobei insbesondere angeführt wurde, dass die einheitliche Systematik in der Benennung der thematischen Arbeitskreise 5 bis 9 mit der Endung „Kristallographie“ erhalten bleiben sollte. Vorschläge weiterer Namensalternativen führten zu einer völlig unübersichtlichen Lage. Letztendlich wurde beschlossen, das Thema zu vertagen und dem Arbeitskreis Gelegenheit zu geben, dies zunächst intern zu diskutieren.

10.2 Arbeitskreissitzungen auf der Jahrestagung

Die Termine für die konstituierenden Sitzungen der neuen Arbeitskreise auf der Jahrestagung wurden vorgestellt. Der Arbeitskreis „JKYC – Junge Kristallographen“ trat am Dienstagabend zusammen. Für die anderen Arbeitskreise waren am Mittwochnachmittag zwei Zeiten von jeweils 45 Minuten reserviert. Dabei traten die Arbeitskreise „Lehre der Kristallographie“, „Theoretische Methoden“, „Chemische Kristallographie“ und „Materialwissenschaftliche Kristallographie“ parallel zusammen. Anschließend erfolgten dann wieder zeitgleich die Sitzungen der Arbeitskreise „Experimentelle Methoden“, „Biologische Kristallographie“, „Physikalische Kristallographie“ und „Mineralogische Kristallographie“.

Die Ausweisung von Zeiten, die ausschließlich für die Treffen der Arbeitskreise reserviert und ohne parallele Konkurrenzveranstaltungen sind, wird ausdrücklich begrüßt und soll bei zukünftigen Jahrestagungen beibehalten werden.

11 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 per Akklamation wiedergewählt.

12 Wahl dreier Mitglieder in das Nationalkomitee

Drei der sechs Mitglieder des Nationalkomitees mussten neu gewählt werden. Von den bisherigen Mitgliedern verbleiben Helmut Ehrenberg, Natalia Dubrovinskaia und Norbert Sträter bis 2027 im Nationalkomitee. Thorsten Gesing und Andrzej Grzechnik schieden turnusgemäß aus. Anna-Lena Hansen hätte sich aufgrund ihrer vorherigen irregulären Wahl als Nachrückerin zur Wiederwahl stellen können, entschied sich aber dagegen. Die Wahl erfolgte als geheime Wahl in einem einzelnen Wahlgang, wobei jedes Mitglied bis zu drei Stimmen für verschiedene Kandidaten abgeben konnte. Das Wahlergebnis war:

- Joachim Breternitz 10 Stimmen
- Thomas Doert 25 Stimmen
- Tatiana Gorelik 21 Stimmen
- Nils Nöthling 14 Stimmen
- Oliver Oeckler 17 Stimmen

Damit wurden Thomas Doert, Tatiana Gorelik und Oliver Oeckler in das Nationalkomitee gewählt.

13 Wahl zum Komitee für den Max-von-Laue-Preis

Alle vier Mitglieder des Komitees mussten neu gewählt werden. Von den bisherigen Mitgliedern trat Matthias Zschornak zur Wiederwahl an, Manuel Hinterstein, Hermann Schindelin und Björn Winkler 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:

- Tatjana Barthel 42 Stimmen
- Volodymyr Bon 24 Stimmen
- Ella Schmidt 45 Stimmen
- Christian Schulz 28 Stimmen
- Claudia Weidenthaler 50 Stimmen
- Matthias Zschornak 37 Stimmen

Damit wurden Claudia Weidenthaler, Ella Schmidt, Tatjana Barthel und Matthias Zschornak in das Preiskomitee für die Vergabe des Max-von-Laue-Preises gewählt.

14 Wahl zum Komitee für den Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie

Alle drei Mitglieder des Komitees mussten neu gewählt werden. Eine Wiederwahl ist bei diesem Komitee unbegrenzt möglich. Die bisherigen Mitglieder Ulrich Schwarz, Thomas Doert und Ullrich Englert entschieden sich aber, von dieser Möglichkeit keinen Gebrauch zu machen. Die Wahl erfolgte als geheime Wahl in einem einzelnen Wahlgang, wobei jedes Mitglied bis zu drei Stimmen für verschiedene Kandidaten abgeben konnte. Das Wahlergebnis war:

- Sebastian Bette 41 Stimmen
- Thorsten Gesing 46 Stimmen
- Martin U. Schmidt 37 Stimmen
- Ingrid Span 47 Stimmen

Damit wurden Ingrid Span, Thorsten Gesing und Sebastian Bette in das Preiskomitee für die Vergabe des Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preises zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie gewählt.

15 Ausrichtung der IUCr-Konferenz 2029 in Berlin

Die Delegiertenversammlung der IUCr im Rahmen des 26. Kongresses der IUCr in Melbourne hat die Ausrichtung des 28. Kongresses der IUCr 2029 wie von uns beantragt an die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie vergeben. Die Tagung wird in Berlin stattfinden, in der Zeit vom 18. bis 25. August 2029. Tagungsort wird das Estrel Hotel und Estrel Congress Center Berlin sein. Manfred Weiss stellt den aktuellen Stand der Planungen, das Planungskomitee und die weiteren Schritte vor.

16 Jahrestagung 2026

Die 34. Jahrestagung 2026 wird in Lübeck stattfinden. Tagungsleiter ist Lars Redecke vom Institut für Biochemie der Universität zu Lübeck.

17 Sonstiges

Es liegen keine zusätzlichen Punkte vor.

18 Jahrestagung 2025

Die 33. Jahrestagung wird in der Zeit 10.–13. März 2025 in Hannover stattfinden. Tagungsleiter ist Claus Rüscher vom Institut für Mineralogie der Universität Hannover. Weitere Mitglieder der Tagungskommission sind Armin Feldhoff, Yasar Krysiak und Jesko Köhnke.

Der Sitzungsleiter schließt die Sitzung um 14:50 Uhr.

Aufgrund der unerwartet lebhaften Diskussion mehrerer Tagungsordnungspunkte kam es zu einer deutlichen Überziehung der für die Mitgliederversammlung eingeplanten Zeit; die Versammlung hätte planmäßig um 14:30 Uhr beendet werden sollen. Hierdurch verzögerte sich der Beginn des anschließend im selben Raum stattfindenden Mikrosymposiums. Eine rege Beteiligung der Mitglieder an der Versammlung ist natürlich erfreulich. Dies macht es allerdings erforderlich, dass in Zukunft der für die Mitgliederversammlung eingeplante Zeitraum mehr Sicherheitsspielraum enthält oder zumindest der Raum nicht direkt im Anschluss verwendet wird.



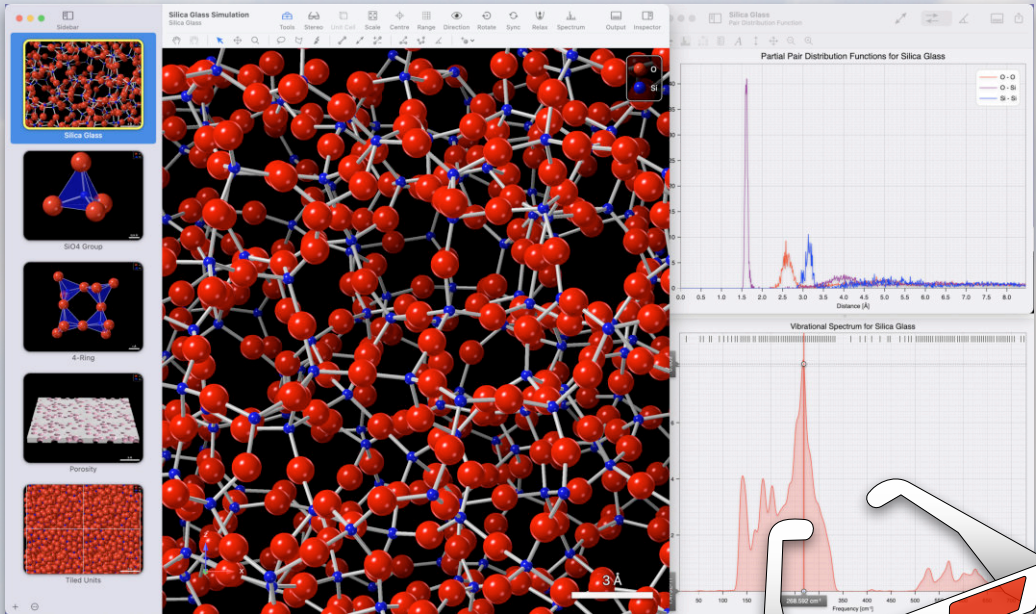
Daniel Többens
(Schriftführer)

NEW
version 11.2

ADVANCED MATERIALS MODELLING

CrystalMaker®

CrystalMaker® 11 builds on 30 years of award-winning visualization technology, adding breakthrough crystal- and molecular energy modelling on your desktop. Power tools packed into elegant, intuitive, uncluttered interfaces. Computational crystal chemistry made easy, accessible and affordable.



Visualizing an amorphous structure, with calculated pair distribution function & IR spectrum

New in Version 11

- Fast crystal energy modelling on your desktop
- Phonon calculation, dispersion curves, IR spectra
- Predict physical & thermodynamic properties
- Temperature/pressure simulations
- Crystal surface relaxation
- Molecular volume, surface area calculations
- Silicate/phosphate framework automation
- Dynamic red/blue stereo & auto perspective
- Refined user interfaces: more power, less clutter
- Includes deluxe "CrystalViewer" library browser



We write
Native
Software



for the
Best User
Experience

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



Anlage zu Punkt 6.4:

B E R I C H T D E S S C H A T Z M E I S T E R S

Einnahmen-Überschussrechnung 2023 der DGK			
Einnahmen 2023			
Mitgliedsbeiträge inkl. Laue-/Liebau-Preisgeld- Spenden	Bankeinzug 2023	20.620,00 €	21.532,28 €
	Barzahler 2023	715,00 €	
	Einnahme Dauermitglieder	197,28 €	
	Spenden	0,00 €	
	Beiträge rückwirkend	0,00 €	
Zinsen	Laue-Kapital	113,00 €	151,03 €
	weitere Sparkonten	38,03 €	
Umbuchung Liebau-Preisgeld			2.000,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	900,00 €	900,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			6.900,00 €
Summe Einnahmen			29.483,31 €
Ausgaben 2023			
Mitteilungen			-7.662,40 €
Mitgliedsbeiträge	Erstattungen	-120,00 €	-535,00 €
	Rücklastschriften	-415,00 €	
Administration	Bankgebühren	-394,28 €	-12.962,98 €
	Stornokosten	-21,24 €	
	Kapitalertragssteuer + Soli	-39,83 €	
	Büromaterial, Verwaltung	-2.118,66 €	
	Webseite	-1.677,45 €	
	IUCr2029	-8.711,52 €	
Verbände, Organisationen	ECA, BVMatW		-1.750,00 €
Arbeitskreise	Förderung	-4.778,66 €	-11.133,77 €
	Ausgaben	0,00 €	
Reisestipendien	IUCr Melbourne & ECS 8	-2.500,00 €	-11.133,77 €
	Umbuchungen	-2.845,00 €	
Liebau-Preisgeld	Auszahlung	0,00 €	-11.133,77 €
	Lieselotte-Templeton-Preis	F. Meurer & L. Wartner	
Summe Ausgaben			-34.044,15 €
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2023			
Einnahmen	4 neue Dauermitglieder	480,00 €	480,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2023		-197,28 €
Überschuss 2023			282,72 €
Rücklage IUCr 2029			
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin			25.000,00 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2023			-4.278,12 €

Kontoführung 2023 der DGK			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	664,37 €	1.177,02 €	512,65 €
Rücklage Dauermitglieder 910	1.986,01 €	2.268,73 €	282,72 €
Sonderkonto AK 1	1.786,41 €	2.676,93 €	890,52 €
Rücklage IUCr 2029	20.000,01 €	25.018,71 €	5.018,70 €
DKG-Cash 085	26.016,50 €	15.525,79 €	-10.490,71 €
Sparkasse	1500,04 €	924,84 €	-575,20 €
Laue-Kapital	60.000,00 €	60.083,20 €	83,20 €
Guthaben der DGK	111.953,34 €	107.675,22 €	-4.278,12 €

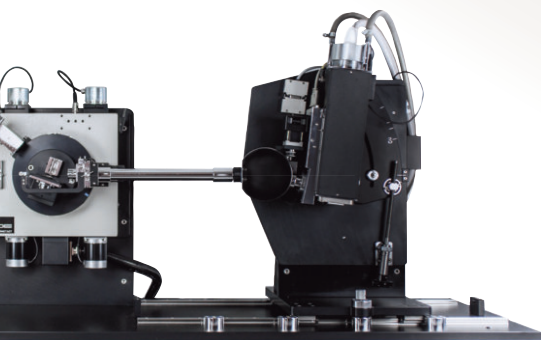
Jahresbilanz 2023 Liebau-Stiftung			
Einnahmen 2023			
Zinsen	Stiftungskapital		58,74 €
Spenden für Preisgeld			2.845,00 €
Summe Einnahmen			2.903,74 €
Ausgaben 2023			
Liebau-Preis 2023	nicht vergeben		0,00 €
Kosten Preisverleihung			0,00 €
Kapitalsteuer & Soli			-15,49 €
Summe Ausgaben			-15,49 €
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2023			2.888,25 €
Kontoführung 2023			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Stiftungskapital 870	31.176,82 €	34.065,07 €	2.888,25 €
Kapital der Stiftung	31.176,82 €	34.065,07 €	2.888,25 €

Christian Lehmann (Mülheim an der Ruhr)



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

RÜCKBLICK AUF DIE 32. JAHRESTAGUNG DER DGK



Liebe Kolleginnen und Kollegen,

als Vorsitzende der 32. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) freue ich mich, Ihnen meine Eindrücke von der vergangenen Veranstaltung und die Erfahrungen, die ich und die anderen beiden Mitglieder des lokalen Organisationskomitees (Prof. Dr. Sander van Smaalen, Laboratorium für Kristallographie, Universität Bayreuth, und Prof. Dr. Dr. h. c. Leonid Dubrovinsky, Bayerisches Geoinstitut, Forschungsinstitut für Experimentelle Geochemie und Geophysik, Universität Bayreuth) gesammelt haben, mitzuteilen. Zwischen dem 18. und 21. März 2024 haben wir 288 Kristallographen aus Deutschland und 13 anderen Ländern in Bayreuth begrüßt.

Die verschiedenen Bereiche der Kristallographie wurden in 28 Fachsitzungen (Microsymposia) behandelt, einschließlich eines „Lightning Talks“-Symposiums, das sich auf die Forschung junger Kristallographen fokussierte, und eines „Oral Posters“-Symposiums, das die Gelegenheit gab, ausgewählte Poster in 5-minütigen Vorträgen kurz vorzustellen (Abb. 1). Insgesamt wurden 136 Vorträge gehalten, darunter 26 „Lightning Talks“ und „Oral Posters“ sowie 4 Plenarvorträge. 107 wissenschaftliche Beiträge wurden als Poster präsentiert. Eine begleitende Industrieausstellung gab einen Einblick in moderne Technik und Software für Kristallographen.

Die Plenarvorträge waren die Höhepunkte der Konferenz. Ihre Referenten sind weltweit führende Spezialisten auf verschiedenen Gebieten der Kristallographie:

- Prof. Dr. Randy John Read (AlphaFold in Strukturbiologie) von der Universität Cambridge, Cambridge Institute for Medical Research (UK),
- Dr. Marc de Boissieu (aperiodische Kristalle) von der Universität Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP (Frankreich),
- Dr. Eugenia Peresypkina (Kristallographie der Supramoleküle) und
- Prof. Dr. Maxim Bykov (Hochdruckkristallographie), beide von der Goethe-Universität Frankfurt, Institut für Anorganische und Analytische Chemie (Deutschland).

Das lokale Organisationskomitee hat sein Bestes getan, um moderne Standards bei der Organisation der DGK-Jahrestagung 2024 in Bayreuth umzusetzen. Insbesondere im Gegensatz zu früheren DGK-Konferenzen, die auf Universitätsgeländen organisiert wurden, fand die 32. DGK-Tagung in Bayreuth in einem speziellen Kongresshotel (ARVENA Kongress Hotel Bayreuth) statt, sodass die Unterbringung der Teilnehmer und der Veranstaltungsort unter einem Dach waren. Außerdem setzten wir den Beginn der Konferenz auf 14:00 Uhr fest, eine Stunde später als in den Vorjahren. All dies ermöglichte die am besten besuchte Eröffnungszeremonie seit jeher (Abb. 2). Die Mittagessen wurden vor Ort organisiert (die Kosten dafür waren in der Konferenzgebühr enthalten), was ununterbrochene Diskussionen erleichterte und die Networking-Möglichkeiten über die Mikrosymposienräume hinaus erhöhte (Abb. 3) und eine wirklich familiäre Atmosphäre unter den Kristallographen schuf (Abb. 4). Dies wurde von den Teilnehmern sowohl vor Ort als auch nach der Veranstaltung sehr geschätzt, wie aus ihrem Feedback hervorging.

Der gesellige Abend im berühmten Bayreuther Restaurant „Liebesbier“ (Abb. 5) bot eine fröhliche Zeit an einem Ort, der leckeres Essen und die größte Auswahl an Bieren, die man in Bayreuth finden kann, in einer wirklich gemütlichen Atmosphäre anbot.

Der Zeitplan des Treffens war ein wichtiger Punkt der Organisation. Nach gründlichen Diskussionen entschied das lokale Organisationskomitee, das „1×30 + 3×20“-Schema für alle Mikrosymposien in vier parallelen Sitzungen zu übernehmen. Das bedeutet, dass von den vier geplanten Vorträgen bei jedem MS ein eingeladener Vortrag von 30 Minuten und drei reguläre Vorträge von jeweils 20 Minuten gehalten wurden. Da alle Sitzungen parallel stattfanden, konnte man leicht seinem eigenen Plan folgen und nicht überlappende Präsentationen bei verschiedenen MS besuchen. Eine Konferenz-Fotosession wurde in Bayreuth zum ersten Mal eingeführt (Abb. 6).

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die DGK-Tagung 2024 als eine unschätzbare Plattform zum Wissensaustausch, Ideenaustausch und zur Förderung von Kooperationen innerhalb der lebendigen Kristallographie-Gemeinschaft diente. Ich bin zuversichtlich, dass es nicht nur neue Entdeckungen und Entwicklungen in diesem Bereich inspiriert hat, sondern auch unser Verständnis der Welt vertieft hat. Die aufschlussreichen Beiträge jedes Teilnehmers werden sicherlich einen kollektiven Einfluss auf den Fortschritt der kristallographischen Forschung haben. Ich freue mich darauf, nächstes Jahr beim *DGK Meeting* 2025 mehr darüber zu erfahren.

Mit freundlichen Grüßen

Prof. Dr. Dr. h. c. Natalia Dubrovinskaia
Materialphysik und Technologie bei extremen Bedingungen
Laboratorium für Kristallographie
Universität Bayreuth



Abbildung 1: „Oral Posters“-Microsymposium



Abbildung 2: Der erste Plenarvortrag gleich nach der Eröffnungszeremonie



Abbildung 3: Lunchpause



Abbildung 4: Die jüngsten Teilnehmer der Tagung



Abbildung 5: Social Evening im berühmten Bayreuther Restaurant „Liebesbier“



Abbildung 6: Gruppenfoto der Teilnehmer der Konferenz



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



Freiberg
Instruments

HR-SPSmap

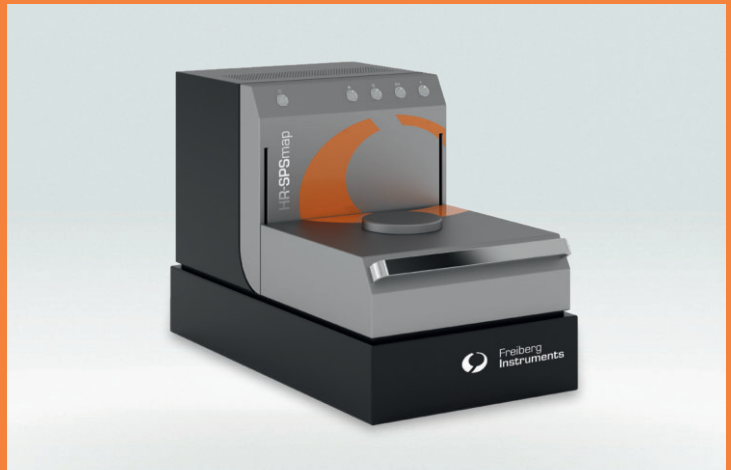
State-of-the-art Surface
Photovoltage (SPV)
analysis equipment

Materials

Si, SiC, GaN,
GaAs, InP,
Diamond, Ga₂O₃,
CdTe, CdZnTe,
AlN, Ge
and more



Learn more



Material research
and quality control

Measurement of
highly doped materials and epi layers

Wavelengths
255 to 1550 nm

Measurement speed
< 5 min. for 200 mm wafers

Time resolution
10 ns to 100 ms

9TH EUROPEAN CRYSTALLOGRAPHY SCHOOL (ECS9) IN NANCY: EIN KURZER ERLEBNISBERICHT

Die 9. European Crystallography School (ECS9) der *European Crystallographic Association* fand vom 24. bis zum 30. Juni 2024 in Nancy (Frankreich) statt. Die Veranstaltung bot eine umfangreiche Weiterbildung im Bereich der Kristallographie und in diesem Jahr insbesondere der Einkristalldiffraktometrie, nachdem sich nach der letzten ECS der Fokus auf ein Thema gewünscht wurde. Es nahmen insgesamt 60 Promotions- und Masterstudenten, PostDocs und wissenschaftliche Angestellte aus 25 verschiedenen Ländern auch außerhalb Europas teil, wobei das Geschlechterverhältnis nahezu ausgeglichen war. Wir drei (Promotions-)Studenten hatten das Privileg von der DGK mit Reisestipendien gefördert zu werden, die die Konferenzkosten vollständig abdeckten.

Nachdem die lange Anreise per Zug am Montag nach Nancy geschafft war, begann die *Summer School* um 16 Uhr mit der Anmeldung, Bezug der universitätseigenen Zimmer und Aufhängen der mitgebrachten Poster. Nachdem alle gut angekommen waren, begann die *Welcome Reception*, bei der erste Kontakte zu den zahlreichen anderen Teilnehmern geknüpft wurden, während es kleine französische Häppchen zur Verköstigung gab.



Abbildung 1: Luisa Wartner und Niklas Kost vor dem offiziellen Konferenzposter.



Abbildung 2: Melissa Janesch (links) während des PC-Tutorials zur Software OLEX zusammen mit dem OLEX-Entwickler Horst Puschmann (Mitte).

Am nächsten Morgen begann das wissenschaftliche Programm um 9 Uhr mit einer Einführung in die Theorie der Röntgenbeugung, welche das erste von fünf Hauptthemen der ECS war und uns noch einmal an alle Grundlagen erinnert hat, bevor wir tiefer in die Einkristalldatenanalyse eingestiegen sind. Allgemein ging es jeden Tag um ein neues großes Thema, zu dem wir jeweils Vorlesungen gehört haben und dann direkt unser Wissen in praktischen PC-Übungen anwenden und festigen konnten. In den Übungen haben wir hauptsächlich Programme zur Einkristalldatenauswertung kennen- und nutzengelernt. Dazu gehörten Apex von Bruker, OLEX2, MoPro und die Verwendung von CCDC als Datenbank für alle möglichen Kristallstrukturen aus organischen Molekülen.

Die auf die Einführung folgenden Hauptthemen waren: Strukturbestimmung und Analyse mithilfe von Einkristalldaten, Packungs- und Wechselwirkungsanalysen, Nutzung asphärischer Modelle zur besseren Verfeinerung von Einkristallstrukturen sowie am letzten Tag Kristallographie unter Druck und Photokristallographie, welches die Schwerpunkte des Kristallographie-Fachbereichs in Nancy sind. Die Referenten umfassten renommierte Wissenschaftler und Experten aus verschiedenen Bereichen der Kristallographie, die auch außerhalb der Vorlesungen die ganze Zeit mit dabei waren und für Fragen zur Verfügung standen. Hier sei z. B. einer der Entwickler der Verfeinerungssoftware OLEX2 Horst Puschmann zu nennen, der uns – wie kann es anders sein – mit in die Welt von OLEX2 genommen hat.

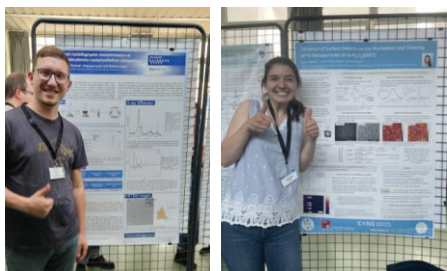


Abbildung 3: Niklas Kost und Luisa Wartner neben ihren Postern bei der Postersession.



Abbildung 4: Melissa Janesch und Niklas Kost während des Konferenzdiners im Gespräch mit Horst Puschmann.

Am Dienstag- und Mittwochabend fanden zusätzlich zu den Vorlesungen und Übungen die *Postersessions* der *Summer School* statt, bei denen unter anderem wir drei unsere Poster vorstellten. Auch der Austausch mit den anderen Teilnehmern und Experten blieb dabei nicht aus und es war sehr interessant zu sehen, wie viele unterschiedliche Bereiche doch zur Kristallographie gehören, da von Arzneimittelforschung über Katalyse bis zur Grundlagenforschung wirklich alles dabei war.

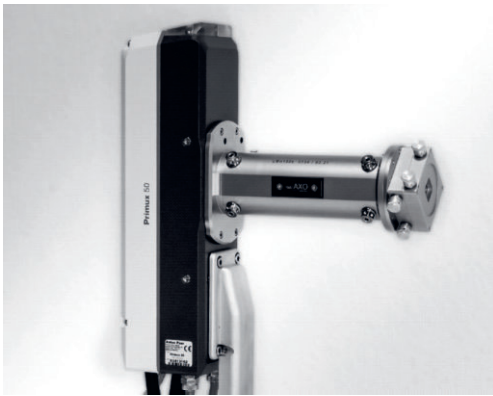
Ein Höhepunkt der ECS war das *Schooldinner* am Donnerstagabend, das noch mehr Gelegenheit zum informellen Austausch und auch etwas Erholung von den doch recht anstrengenden Tagen bot. Darüber hinaus wurde zum Abschluss am Sonntagmorgen eine Stadtführung durch die historische Altstadt von Nancy für uns organisiert, bei der wir noch mehr über die Geschichte Nancys und die Kunstrichtung *Art Nouveau* lernten, von der Nancy das zweite große Zentrum nach Paris in Frankreich war.



Abbildung 5: Gruppenbild der Teilnehmer der ECS vor der Social-Evening-Location.

Insgesamt war die ECS9 eine sehr interessante und vor allem lehrreiche *Summer School*, die viel Wissen über die zugrundeliegende Theorie und die zugehörige praktische Anwendung der verschiedenen Methoden in der Einkristallstrukturauswertung vermittelte. Sie bot ein weitgefächertes Angebot an abwechslungsreichen und attraktiven Vorträgen und gab den Teilnehmenden die Möglichkeit, selbständig in der Praxisphase unter Anleitung von exzellenten Fachleuten ihr Wissen anzuwenden. Was bei Tagungen natürlich nicht fehlen darf, ist der soziale Aspekt, der hier keinesfalls zu kurz kam. Sei es beim *Get Together* am ersten Abend, dem *Social Evening* oder in den reichlichen Kaffeepausen mit leckeren *Minicroissants* und *Pain au chocolat*. Wir konnten viel von der ECS mitnehmen und möchten uns daher hiermit noch einmal beim lokalen Organisationskomitee der Universität von Nancy und bei der DGK für die finanzielle Unterstützung bedanken.

Niklas Kost, Melissa Janesch und Luisa Wartner



AXO DRESDEN: X-ray sources, MLLs, coatings & 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 Laue Lenes (MLLs)

nanometer X-ray focusing and imaging

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



BERICHTE VOM 26. KONGRESS DER IUCR IN MELBOURNE

TINA WEIGEL (TU BERGAKADEMIE FREIBERG)

Der 26. Kongress der International Union of Crystallography (IUCr) fand vom 22. bis 29. August in Melbourne, Australien, statt. Im *Melbourne Convention and Exhibition Centre*, mit herrlichem Blick auf die Skyline von Melbourne am Yarra River, wurde den Teilnehmenden ein breites Spektrum an wissenschaftlichen Beiträgen aus allen Bereichen der Kristallographie geboten. Insgesamt gab es drei *Plenary Talks*, 29 *Keynote Talks* und 115 Microsymposien.

Neben dem wissenschaftlichen Programm wurden auch Tagesausflüge in die Umgebung von Melbourne, wie zum Beispiel nach *Phillip Island* oder entlang der *Great Ocean Road* angeboten. Besondere Highlights waren für mich die *Welcome Reception*, bei der es auch eine kleine Show mit einheimischen Tieren gab, und das *Conference Dinner* im Melbourne Museum. Beim *Conference Dinner* gab es neben Essen, Getränken, einem DJ und einer Band auch die Möglichkeit, durch die Ausstellung zu gehen und Dinosaurierskelette zu bestaunen.



Eröffnung des 26. Kongresses der IUCr in Melbourne



Dinosaurier-Skelett im Museum von Melbourne als Veranstaltungsort des Conference Dinner unter dem Motto „Night at the Museum“

Die Konferenz überzeugte neben dem umfangreichen wissenschaftlichen Programm vor allem durch die gute Organisation, das hilfsbereite Organisationsteam und die angenehme australische Lockerheit. Während der gesamten Konferenz herrschte eine sehr entspannte Atmosphäre, in der man gut alte Bekanntschaften pflegen oder neue Kontakte knüpfen konnte. Persönlich hat mir an der Konferenz besonders das breite Spektrum der Beiträge gefallen, bei denen ich immer wieder über den Tellerrand meiner eigenen Aktivitäten hinausschauen und neue Aspekte der Kristallographie kennenlernen konnte.

Ich selbst hatte die Möglichkeit, meine neuesten Forschungsergebnisse in einem Vortrag mit dem Titel „The structure of a ferroelectric, commensurate low temperature phase of YMn_2O_5 “ im Rahmen des Microsymposiums „Functionality from Broken Inversion Symmetry“ zu präsentieren. In diesem Microsymposium waren Emma McCabe und Anthony Phillips die *Chairs*, die die *Session* mit sehr vielen lieben Worten und Freundlichkeit leiteten. Der Vortrag war für mich eine wunderbare Gelegenheit, mich in der Vorbereitung und Präsentation wissenschaftlicher Ergebnisse zu üben und meine Ergebnisse zu diskutieren. Des Weiteren habe ich auf der Generalversammlung zusammen mit Manfred Weiss die Präsentation für die Bewerbung Berlins als Austragungsort für den IUCr-Kongress 2029 gehalten. Es freut mich sehr, dass auch diese Präsentation erfolgreich war und Berlin den Zuschlag für 2029 erhalten hat.

An dieser Stelle möchte ich mich bei der DGK für die großzügige finanzielle Unterstützung bedanken, die mir die Teilnahme an der IUCr ermöglicht hat. Ein großes Dankeschön geht auch an die Organisatoren des Kongresses, die diesen für mich zu einer äußerst lehrreichen, informativen und spannenden Veranstaltung gemacht haben.



Postersession mit Blick vom Kongresszentrum auf die Skyline von Melbourne am Yarra River

JANA STORSBERG (UNIVERSITÄT DUISBURG-ESSEN)

Meine Reise führte mich in das Land der Kängurus, Koalas und in diesem Jahr auch das Land der Kristallographie: Australien. Denn dort fand der 26. Kongress und die Generalversammlung der *International Union of Crystallography (IUCr)* statt. Vom 22. bis 29. August tummelten sich in Melbourne Kristallographen aus der ganzen Welt. Dank des großzügigen Reise-Stipendiums der DGK konnte ich daran teilnehmen.

Nach zwei Tagen Reise um die, wortwörtlich, halbe Welt war ich endlich in Melbourne, einer beeindruckenden Stadt, die zu den lebenswertesten der Welt gehört. Von dieser Einschätzung konnte ich mich nun selbst überzeugen und wurde nicht enttäuscht. Mit ihren vielen Wolkenkratzern erinnert sie zunächst an eine amerikanische Großstadt, doch die Nähe zum Meer und der Yarra River, der durch die Stadt fließt sowie die kostenfreie Tram, die man in der Innenstadt nutzen kann, überzeugen.

Die Konferenz fand im hochmodernen *Melbourne Convention and Exhibition Centre* statt. Dieser riesige Gebäudekomplex bot genug Platz für *Sessions*, Plenarvorträge, Workshops und Ausstellungen. Von dem ersten Eindruck erschlagen, versuchte man sich dort zurechtzufinden und ein persönliches Programm aus der Vielzahl von spannenden Vorträgen zu erstellen. Dabei reichte die Auswahl von *Sessions* zu Kristallstruktur oder Mineralogie, über biologische Themen wie Proteine und strukturelle Immunologie bis hin zur kristallographischen Anwendung in der Weltraumforschung.

Diese unterschiedlichsten Themen, die von Forschenden aus der ganzen Welt begleitet wurden, boten eine tolle Möglichkeit des interdisziplinären Austauschs, welcher mir als biologischer Anthropologin, die aktuell in der anorganischen Chemie promoviert, besonders wichtig ist. So ergab sich nach der *Session*, in der ich meinen Vortrag über die kristallographische Untersuchung von archäologischen Zähnen halten durfte, ein spannendes Gespräch über

Narwale. Das mag zuerst klingen, als gäbe es keinen Zusammenhang zu meiner Forschung. Allerdings ist das prominenteste Merkmal des Wals, welches oft fälschlicherweise als „Horn“ angesehen wird, eigentlich ein Zahn aus dem Kiefer des Kiefer des Narwals, der sich zu einem großen Stoßzahn entwickelt hat.

Eine besondere Veranstaltung war die Nacht im Museum. Begleitet von Livemusik, Häppchen und Getränken konnte man sich die Ausstellung des *Melbourne Museum* anschauen, mit Kollegen austauschen und einen außergewöhnlichen Abend verbringen.

Insgesamt bot die Konferenz eine tolle Möglichkeit, sich über verschiedenste Bereiche der Kristallographie zu informieren, Neues zu lernen, Menschen aus der ganzen Welt kennenzulernen, Forschungsprojekte zu teilen und neue Verbindungen zu knüpfen. So war die Teilnahme an dieser Konferenz eine große Bereicherung für meine Forschung, aber auch eine ganz wunderbare persönliche Erfahrung. Dafür möchte ich der DGK herzlich danken!

FLORIAN MEURER (UNIVERSITÄT REGENSBURG)

Der 26. IUCr-Kongress startete bereits am 21. August mit einem vielfältigen Programm an Workshops rund um die Kristallographie. Da ich tatkräftig bei dem Workshop zum kristallographischen Interface Olex2 mitwirkte, konnte ich in der restlichen Zeit nur einen weiteren Workshop besuchen. Hier entschied ich mich, den Sitzungen in der Quantenkristallographie zu lauschen und verschiedene Software auszuprobieren. Besonders interessant fand ich das Konzept der Q-Box, welche an den Standorten Southampton und Durham entwickelt wird, und den kompletten Prozess der Kleinmolekülkristallographie durch Einbindung der verschiedenen Softwares abzubilden und so reproduzierbar und besser nachvollziehbar zu machen.

Am Abend des 22.08. startete die Tagung dann offiziell mit eindrucksvollen Tanz- und Gesangseinlagen einer Aborigine-Gruppe. Am Tag darauf startete nun das wissenschaftliche Programm, in dem in über 100 Symposien über 200 Chairs ein abwechslungsreiches und spannendes Programm zusammenstellten.



*Ein strahlender Florian Meurer vor der Skyline Melbournes.
Sicht aus dem 3. Stock des MCEC (Melbourne Congress and Exhibition Center)*

Meine Highlights waren hier Beiträge zur Quantenkristallographie, Datenanalyse an Beispielen der *Cambridge Structural Data Base*, was jeder Kristallograph über Pulverdiffraktometrie wissen sollte, intermolekulare Interaktionen, sowie exotische Symposia die sich beispielsweise mit der Kristallographie im Weltall beschäftigten. Umrahmt wurden diese Beiträge von spannenden *Keynote*-Vorlesungen, die oft die Symposien noch einmal thematisch zusammenfassten und überblickten. Dazu konnte man sich jeden Tag an den vielen, phantastischen Postern der Beitragenden sattsehen und es gab eine Vielzahl an Tee-/Kaffeepausen.

In der großen Ausstellungshalle wurden neben den Ständen verschiedener Firmen und Vereinigungen rund um die Kristallographie und Röntgenspektroskopie auch zahlreiche „Gimmicks“ zur Schau gestellt: Ein großer Fullerenachbau mit Infotafeln sowie Nachbauten von Einheitszellen wichtiger Strukturen informierten Alt und Jung über die Vielfältigkeit der Kristallographie.

Dies alles verblasste jedoch ein wenig im Vergleich zum Herzstück der Ausstellung: ein Nachbau aus Plastikatomen eines Diamanten, welcher über fünf Tage von der Community erbaut wurde, am Ende fast 60.000 Atome umfasste und somit einen neuen Rekord darstellte. Einzig schade war, dass dieser Aufbau nur kurz erhalten blieb, bevor er wieder abgebaut werden musste.

Abseits davon gab es ein abwechslungsreiches Freizeitprogramm in dem beispielsweise Hersteller wie Dectris zu einer Feier einluden, die wohl noch länger als Maßstab für Feiern auf kristallographischen Konferenzen gelten dürfte. Etwas sportlicher ging es bei Rigaku zu: Hier wurde ein „Fun Run“ in den *Royal Botanical Gardens Victoria* mit einer Länge von 5 km organisiert, bei dem ich eine neue persönliche Bestzeit, die ich hier besser nicht nennen mag, über diese Strecke erreichte.

Melbourne selbst war die perfekte Stadt für diese Tagung: Obwohl die IUCr26 faktisch im australischen Winter stattfand, waren die Temperaturen im angenehmen Bereich zwischen 5 und 22 Grad, was ebenfalls sehr zum Erkunden dieser wunderschönen Stadt einlud. Besonders der *Albert Park* war ein wunderschöner Ort, um den Sonnenaufgang vor dem Stadtpanorama voller Wolkenkratzer zu betrachten. Die Stadt selbst bot mit Gebäuden aus dem 19. Jahrhundert und vielen modernen Wolkenkratzern eine großartige Mischung aus Sehenswürdigkeiten und trendigen Cafés, Pubs und Restaurants, welche seinesgleichen sucht.

Nach neun Tagen voller Programm, Aufregung und Wissenschaft endete die Konferenz am 29.08. und die Teilnehmer traten die teils sehr lange Rückreise an. Insgesamt freue ich mich schon auf die nächsten Tagungen der IUCr in Calgary, Kanada sowie in Berlin und hoffe sehr, auch dort teilnehmen zu können.

PIA LANGE (UNIVERSITÄT STUTTGART)

My journey to Melbourne, known as Australia's cultural capital, began with an international flight, via a short layover in Singapore, landing at Tullamarine Airport. The efficient public transportation system quickly whisked me to the heart of the city, which welcomed me with its vibrant energy and diverse experiences. My journey was a blend of cultural exploration and professional growth, with an alighting conference on crystallography at the Melbourne Convention and Exhibition Centre at its heart.



*The Yarra river always guaranteed a beautiful view of the city's skyline.
The morning sun promised a good start into the day.*

The Convention and Exhibition Center, where the IUCr2023 was held, is located within walking distance to the cosmopolitan, vibrant Central Business District of Melbourne and the free of charge Trams took us out and about this city after the final lecture of the day at the IUCr congress. As I went for quick morning runs every other day, I had the opportunity to explore the city before and after the conference.

I visited iconic landmarks like Federation Square, with its distinctive architecture, and ran through the Royal Botanic Gardens, experiencing the rowing club culture on the Yarra River amidst the bustling city. Queen Victoria Market as well as the Southern Market offered a delightful blend of fresh products, artisanal goods, and a bustling atmosphere and wherever I went, good coffee was offered.

Melbourne's artistic scene with the small alleys and lanes left a lasting impression on me. I even watched street artists draw live and a quick visit to ACDC lane was absolutely worth it. The city's thriving cultural atmosphere was truly inspiring to refresh the mind and head into each day at the conference with full spirit.

The Melbourne Convention and Exhibition Centre provided a fantastic backdrop for the IUCr conference. Attending was a valuable experience that allowed me to exchange ideas and knowledge with professionals from diverse backgrounds. The conference offered insights into the latest advancements in crystallography and its applications.

During the conference, I had the privilege of attending sessions focused on inorganic chemistry research that heavily relies on crystallography. Crystallography, with its ability to reveal the precise atomic and molecular arrangements in crystalline materials, is so interesting to experience. Researchers presented their work on various inorganic compounds, including coordination complexes, metal-organic frameworks, and organometallic compounds.



Impressions on the CBD of Melbourne, vibrating alley life on the left and views from the Victoria market on the right.

My trip to Melbourne was an unforgettable blend of cultural enrichment, culinary delights, and personal as well as academic growth. The city's lively spirit, cultural scene, and natural beauty make it a must-visit destination. The IUCr2023 posed a great opportunity and educational dimension to my journey, providing insights into the fascinating world of inorganic chemistry research.

One of the highlights of my Melbourne journey was the opportunity to reconnect with friends and colleagues from previous conferences. Melbourne served as a meeting point for us, transcending borders and bringing together individuals from different corners of the world. Over shared meals and conversations, we reminisced about our earlier encounters in Frankfurt (DGK 2023), Versailles (ECM 2022), and Prague (IUCr 2021). These reunions reinforced the global nature of academic and professional networks, and it was heartwarming to see familiar faces and forge stronger connections across international boundaries. Our discussions extended beyond our respective fields, fostering the exchange of ideas and experiences that enrich both our personal and professional lives.

I'd like to express my gratitude to the people I met during this journey, from the friendly locals who shared their insights to my fellow conference attendees, who made the event informative and engaging. I thank the DGK for their generous scholarship, which enabled me to attend this beautiful and well-organized conference.

DIE ARBEITSKREISE DER DGK
BERICHTEN

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

Das Jahr 2023/24 war für die Jungen Kristallographen (YC) der DGK ein ganz besonderes Jahr, da es unser 10-jähriges Bestehen als Arbeitskreis in der DGK umschloss. Daher fand unser diesjähriges Treffen am Deutschen Elektronensynchrotron (DESY) in Hamburg auch unter dem Titel „10th Anniversary Meeting of the Young Crystallographers at DESY“ statt. Hier konnten die Teilnehmenden des Meetings Deutschlands vielfältigste und größte Einrichtung für Photonenzissenschaft einmal hautnah erleben. Besonders die Führung über den DESY-Campus, mit dem eindrucksvollen Tunnel des HERA-Experiments zur Aufklärung der Struktur von Protonen, sowie die *Hands-on*-Experimente an verschiedenen Beamlines von PETRAIII, sowie die Besichtigung des European XFELs, waren Highlights des Meetings.

Darüber hinaus gab es – wie üblich bei den Treffen der Jungen Kristallographen – neben spannenden wissenschaftlichen Vorträgen unsere bewährten *Lightning Talks*, bei denen die Teilnehmenden ihr mitgebrachtes Poster in einem maximal fünfminütigen Vortrag bewerben sollten. Für ihre Kombination aus Vortrag und Poster wurden Jury Yvonne Wagenhäuser, Manuel Schulze und Joohye Bang mit Preisen von STOE bedacht. Ein ausführlicherer Bericht zu unserem Jubiläumstreffen geschrieben von Marilia de Oliveira Guimaraes lässt sich in unserem Blog finden:

<https://dgk-home.de/10th-anniversary-meeting-of-the-young-crystallographers-at-desy>



Blick in die Tiefen HERAs...



... und HERAs riesiger Detektor für winzigste Teilchen.

*Ausschnitt aus dem Blogbeitrag zum Jubiläumstreffen am DESY
von Marilia de Oliveira Guimaraes für den Blog der YC*

Richtig international wurde es für die Jungen Kristallographen noch vor unserem Jubiläumstreffen. Mit der IUCr26 im fernen Melbourne, Australien, flogen Mitglieder der YC auf die Südhalbkugel, um der größten internationalen Kristallographiekonferenz beizuwohnen. Hier präsentierte Melanie Nentwich unser bisheriges Schaffen auf einem Poster, während Tina Weigel gemeinsam mit Manfred Weiß erfolgreich für die Vergabe der IUCr2029 an Berlin warb. Eine Perspektive von Tina Weigel und Florian Meurer zur IUCr in Melbourne kann ebenfalls in unserem Blog gelesen werden:

<https://dgk-home.de/iucr-congress-in-melbourne-de>

Ebenso in Melbourne wurde Melanie Nentwich vom internationalen Kristallographiejournal IUCrJ eingeladen, die vergangenen zehn Jahre des Arbeitskreises in einem Sonderartikel zum 75-jährigen Bestehen der IUCr zu verfassen. Einen kurzen Übersichtsartikel anlässlich unseres Jubiläums konnten wir dann zu Beginn des Jahres 2024 im organisatorischen Kreis der Jungen Kristallographen ausarbeiten und in der Zeitschrift *Acta Crystallographica E* veröffentlichen (siehe <https://doi.org/10.1107/S2056989024001695>).

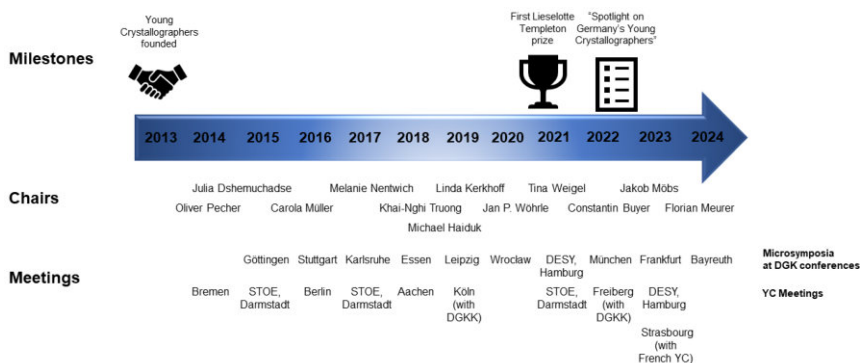


Abbildung der Treffen sowie Vorsitzende der Jungen Kristallographen seit ihrer Gründung im Jahr 2013. Abbildung aus <https://doi.org/10.1107/S2056989024001695>.

Anfang des Jahres wurde außerdem zum dritten Mal der von den YC initiierte Lieselotte-Templeton-Preis verliehen. Dieses Jahr wurden Ben Ebel (RWTH Aachen) und Lukas Nusser (LMU München) für exzellente Masterarbeiten im Themenbereich der Kristallographie ausgezeichnet. Die Laudatio von Tilmann Leisegang zum Preis finden Sie weiter hinten in dieser Ausgabe der DGK-Mitteilungen.

Damit war das Jahr jedoch noch nicht vorbei, denn es folgte noch die Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, welche im März 2024 im idyllischen Bayreuth stattfand. Gleich zum Auftakt gab es einen direkt ausgebuchten *Science Slam* in der örtlichen Kneipe „Liebesbier“ organisiert von STOE. Wie üblich veranstalteten die YC außerdem ein *Lightning Talk Symposium*, um den Posterpräsentierenden eine Möglichkeit zu geben, ihr Thema in einem kurzen Vortrag zu bewerben. Im ebenso traditionellen *Get Together* der Jungen Kristallographen durften die Teilnehmenden den spannenden Vorträgen der Preisträger des Lieslotte-Templeton-Preises lauschen. Anschließend wurden Anushka Gosh und Alena Shlyaykher für herausragende Poster- sowie Lightning-Talk-Beiträge mit dem STOE-Posterpreis ausgezeichnet.

Außerdem wurde ein neuer Zuwachs der Jungen Kristallographen bekanntgegeben: Anushka Gosh, die sich auch bereits in unserem Blog vorgestellt hat (<https://dggk-home.de/meet-the-people-anushka-gosh>), verwaltet seit Ende 2023 die *Social-Media*-Präsenz der Jungen Kristallographen. Abschließend wurde noch Jakob Möbs turnusgemäß von Florian Meurer im Amt des *Chairs* der Jungen Kristallographen abgelöst und mit Irina Dimitrova ein neuer Co-Chair der YC gewählt.

Damit freuen wir uns auf das kommende Jahr und hoffen auf rege Teilnahme an unserem diesjährigen Treffen bei Rigaku Europe SE (30.09.-02.10.) in Neu-Isenburg!

Weitere Infos sind auf unserer Homepage (<https://dggk-home.de/arbeitskreise/jkyc>) und dem dort verlinkten Blog einsehbar.

Florian Meurer (Regensburg), Irina Dimitrova (Berlin) und Jakob Möbs (Marburg)

PhotonJetMAX-S

Maximum Flexibility,
Maximum Flux



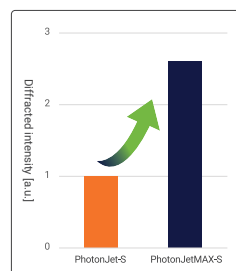
A new high-performance sealed tube source from Rigaku Oxford Diffraction

Features

- More than twice the diffracted intensity
- Long tube lifetimes
- Rigaku's patented* divergence control

Benefits

- Faster data collections
- Access to more challenging samples
- Zero additional cost of ownership**



* European Patent EP3364421A1
**Versus PhotonJet-S



Rigaku

POWERING NEW PERSPECTIVES

BERICHT ZUM

21. DMG-SHORTCOURSE „ANWENDUNGEN DER FESTKÖRPER- NMR-SPEKTROSKOPIE IN DER MINERALOGISCHEN UND GEOWISSENSCHAFTLICHEN FORSCHUNG“

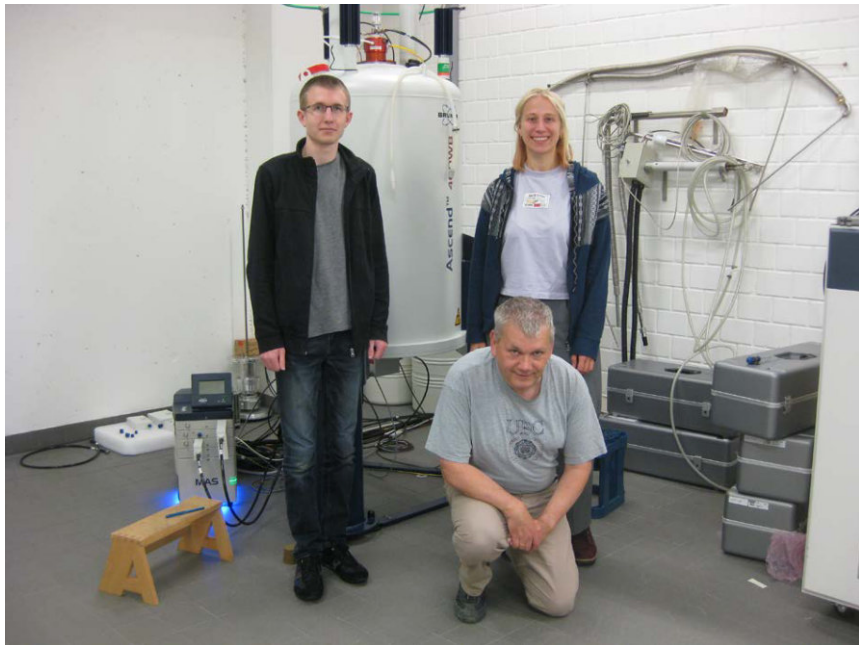
BOCHUM, 21. – 24.05.2024

Auch in diesem Jahr fand wieder der von der DMG und DGK angebotene Shortcourse „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ vom 21. bis 24. Mai statt, nun bereits zum 21. Mal. Der Kurs wurde unter der Leitung von Dr. Michael Fechtelkord an der Ruhr-Universität Bochum durchgeführt und bot für die Teilnehmenden aus verschiedenen Fachrichtungen die Möglichkeit sowohl eine Einführung in die Grundlagen der NMR-Spektroskopie zu erhalten als auch deren vielfältige Anwendungen kennenzulernen. Am Vormittag eines jeden Kurstages wurden theoretische Grundlagen besprochen. Danach erfolgte der praktische Teil, in dem Proben präpariert und Messungen am Gerät durchgeführt wurden. Nachmittags wurden die Messungen ausgewertet.

Am ersten Tag erfolgte zuerst eine theoretische Einführung in die NMR-Spektroskopie. Dabei wurden ihre Stärken und Schwächen, ihre Anwendungsgebiete, die physikalischen Grundlagen und die Funktionsweise behandelt, ebenso der Geräteaufbau und die historische Entwicklung. Daraufhin wurden Kenntnisse zur ^1H -Spin-Gitter-Relaxation vermittelt, die beispielhaft an Messungen (mit Hilfe des Programms Topspin) von Tetramethylammoniumiodid veranschaulicht wurden. Hierbei wurde auch die Abhängigkeit der aufgenommenen Spektren von der Messtemperatur gezeigt. Bei der Auswertung auf Papier konnten die Aktivierungsenergien und Korrelationszeiten für die Signale bestimmt werden. Der Tag endete in gemütlicher Runde bei Essen und Getränken in der Kneipe „Filou“ am Buscheyplatz.

Der zweite Tag befasste sich mit den Wechselwirkungen der magnetischen dipolaren Kopplung und der chemischen Verschiebung. Dabei wurde auch das Verfahren *Magic Angle Spinning* (MAS) vorgestellt, welches ermöglicht, Anisotropieeffekte zu entfernen. Diese Technik wurde auch bei der Messung von ^{29}Si -, ^{19}F -, und ^1H -Spektren von synthetischem Phlogopit angewandt. Nach einer Einführung in das Programm DmFit2021 anhand einiger Übungen, nämlich einfachen Lorentz- und Gausslinienformen, Einbindung der Seitenbanden und der Anpassung von Linienformen mit Anisotropie der chemischen Verschiebung, wurden die aufgenommenen MAS-NMR-Spektren mit dieser Software ausgewertet.

Am dritten Kurstag des Shortcourses ging es um die Anwendungsmöglichkeiten von Multipulstechniken mit dem Hahn'schen Echo und die Grundlagen des Kreuzpolarisations-experiments (CP). Der Praxisteil beinhaltete ein kontaktzeitabhängiges CPMAS-Experiment an Kaolinit, bei dem die Atomabstände zwischen Si- und H-Kernen bestimmt wurden. Dies erfolgte unter Verwendung des Tabellenkalkulationsprogramms Excel.



Während der vorherigen Tage wurden Proben mit einem Kernspin von $I = \frac{1}{2}$ untersucht, am letzten Tag standen jedoch Quadrupol-Kerne (Spinquantenzahl $I > \frac{1}{2}$) im Mittelpunkt. Im theoretischen Teil wurden nun verschiedene NMR-Methoden wie „Double Rotation“ (DOR), „Multi-Quanten-Magic-Angle-Spinning“ (MQMAS) und „Satellite Transition Spectroscopy“ (SATRAS) vorgestellt. Praktisch wurden von ^{23}Na in Glaubersalz und ^{27}Al in Korund mittels MAS- und SATRAS-Techniken die Quadrupolkopplungskonstanten untersucht und die Spektren anschließend ausgewertet.

Die vier Kurstage reichten zwar mit Sicherheit nicht aus, um die gesamte Bandbreite der NMR-Festkörperspektroskopie vollständig zu erfassen, jedoch konnten wir dank umfassenden Erklärungen eine gute Vorstellung davon entwickeln, welche Informationen die Methode über ein Material liefern kann und es wird uns helfen die potenzielle Anwendung für zukünftige Projekte besser einzuschätzen. Deswegen möchten wir uns hier bei Dr. Michael Fechteltord für den gelungenen Shortcourse und das gelernte Wissen herzlich bedanken.

Martina Paetsch (MPI Stuttgart) und Florian Rafalski (FAU Erlangen-Nürnberg)

DECTRIS

new

PILATUS 4

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

A wide dynamic range

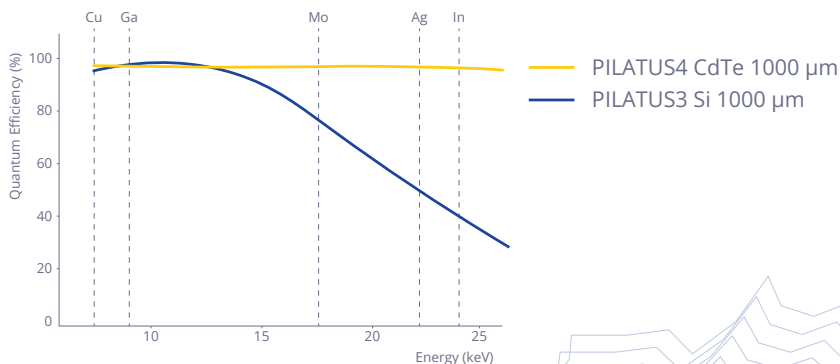
Superior count rates and zero detector background

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



PERSONALIA

JUBILARE 2024

90 Jahre

Dr. Gertrud Bissert	Miltenberg
Siegfried Brauny	Dresden
Prof. Dr. Eckhard Hinze	Gießen
Dr. Lars Ickert	Berlin
Dr. Volkhard Jung	Karlsruhe
Prof. Dr. Henning von Philipsborn	Regensburg
Dr. Heinz Hans Walter Preuß	Potsdam
Dr. Rudolf Schicht	Engen
Dr. Achim Zedler	Rüdesheim am Rhein

85 Jahre

Prof. Dr. Eberhard Born	Garching
Dr. Jürgen Buschmann	Berlin
Prof. Dr. Alfred Gieren	Innsbruck
Dr. Karl-Friedrich Hesse	Kiel
Prof. Dr. Kurt Hümmer	Karlsruhe
Prof. Dr. Ursula Krämer	Dresden
Dr. Günter Liehr	Erlangen
Prof. Dr. Hans-Jörg Lindner	Darmstadt
Dr. Gerhard Mieke	Darmstadt
Prof. Dr. Wolfgang Friedrich Müller	Darmstadt
Prof. Dr. Joachim Pickardt	Berlin
Prof. Dr. Wolfram Saenger	Berlin
Dr. Volker Schramm	Saarbrücken
Prof. Dr. Georg E. Schulz	Freiburg
Dr. Joachim Sieler	Leipzig
Dr. Karlheinz Taxer	Frankfurt
Prof. Dr. Ulf Thewalt	Ulm

80 Jahre

Prof. Dr. Wulf Depmeier	Kiel
Prof. Dr. Eckhart Förster	Jena
Prof. Dr. Klaus Funke	Münster
Prof. Dr. Rolf Klaska	Ennigerloh
Prof. Dr. Kurt Klepp	Linz
Prof. Dr. Werner Massa	Marburg
Prof. Dr. Wolfgang Neumann	Berlin
Dr. Heinz Rotter	Freiburg
Prof. Dr. Robert Schwarzer	Clausthal
Dr. Harm Wulff	Greifswald

75 Jahre

Dr. Jan Willem Bats	Frankfurt
Dr. Gerhard Cordier	Darmstadt
Prof. Dr. Peter Häussler	Chemnitz
Dr. Jürgen Ketterer	Marly
Prof. Dr. Andreas Magerl	Erlangen
Dr. Norbert Mattern	Dresden
Prof. Dr. Gerd Meyer	Hadsten
Prof. Dr. Manfred Mühlberg	Köln
Dr. Matthias Müller	Jena
Prof. Dr. Reinhard Nesper	Zürich
Heinz-Jürgen Schmidt	Berlin
Dr. Michael Serafin	Gießen
Karsten Tellert	Erlangen
Dr. Angelika Teresiak	Dresden

70 Jahre

Dr. Peter Adelman	Karlsruhe
Dr. Gerhard Blockus	Ludwigshafen
Dr. Herta Effenberger	Wien
Prof. Dr. Reinhard Fischer	Bremen
Prof. Dr. Peter Gille	München
Detlev Götz	Almelo
Dr. Robert Haberkorn	Saarbrücken
Dr. Nikolaus Herres	Buchs
Dr. Susanne Herting-Agthe	Berlin
Prof. Dr. Rolf Hilgenfeld	Lübeck
Dr. Gerhard Klebe	Marburg
Dr. Ursula Probst	Gundelfingen
Prof. Dr. Georg J. Roth	Aachen
Dr. Heidrun Sowa	Göttingen
Dr. Gerhard Steinmann	Karlsruhe
Dr. Dmitri Svergun	Hamburg

65 Jahre

Hartmut Almen	Höchberg
Ross John Angel	Padova
Dr. Thomas Bergunde	Heilbronn
Dr. Anna Bieniok	Salzburg
Dr. Peter Daniels	Bayreuth
Rolf Elak	Kiel
Dr. Ralph Golbik	Halle
Prof. Dr. Christiane A. Helm	Greifswald
Dr. Michael Herrmann	Pfingsttal
Prof. Dr. Rainer Hock	Erlangen
Dr. Mark Könnecke	Villigen PSI
Prof. Christian L. Lengauer	Wien
Prof. Dr. Reinhard Neder	Erlangen
Dr. Martin Nieger	Helsinki
Dr. Detlev Opper	Kassel
Christoph Schwarte	Marburg
Dr. Klaus Wurst	Innsbruck
Dr. Günter Zimmermann	Berlin

VERSTORBENE MITGLIEDER

Dr. Jörg Trempler

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

† 28. Juni 2023

Dr. Hans-Anton Graf

Hahn-Meitner-Institut Berlin

† 30. Dezember 2023

Prof. Dr. Hans Burzlaff

Lehrstuhl für Kristallographie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

† 21. April 2024

Dr. Walter Rothammel

EMAG ECM GmbH

† 17. Mai 2024

LIESELOTTE - TEMPLETON - PREISE 2024



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. In diesem Jahr sind dies: Tobias Beck, Holger Kohlmann und ich, die Vorsitzenden der Jungen Kristallographen, Jakob Möbs und Florian Meurer, und der Vorsitzende unserer Gesellschaft, Thomas Schleid.

Wir freuen uns sehr, nun bereits zum dritten 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, die die Nichte des Physikers und Nobelpreisträgers Otto Stern ist. Ihre Arbeiten an der *University of California* in Berkeley zu Absorptionskorrektur, Röntgendiffraktion und anomaler Dispersion beeinflussten insbesondere Proteinkristallographen, aber auch Chemiker und Physiker. Zudem war sie den jungen Studierenden durch ihre herzliche Persönlichkeit bekannt. Sie vereinte damit Exzellenz und Herzlichkeit mit ihrem Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs. In diesem Sinne wollen wir heute den Preis in ihrem Namen für zwei herausragende Studierendenarbeiten verleihen.

Insgesamt sind drei sehr spannende Vorschläge eingegangen. Im Rahmen der Evaluierung hatten wir damit die Freude, in andere Arbeitsgebiete und Themen einzutauchen und auch 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 und sie gleichzeitig motivieren auch für das nächste Jahr zahlreiche Vorschläge einzureichen.

Kommen wir nun zu den diesjährigen Preistragenden. Dies sind:

- Herr M. Sc. Ben Ebel von der RWTH Aachen und
- Herr M. Sc. Lukas Nusser von der LMU München.

Lassen Sie mich kurz die beiden Honorees würdigen.

BEN EBEL (RWTH AACHEN)



Ben Ebel wurde für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem Titel „Synthese und Charakterisierung neuartiger Liganden für die Titan(IV)-Koordination“ ausgezeichnet. Die Arbeit fertigte er in der Arbeitsgruppe von Iris Oppel, am Institut für Anorganische Chemie, Lehr- und Forschungsgebiet Supramolekulare Koordinationschemie der RWTH Aachen an. Herr Ebel studierte Chemie.

Den Gegenstand der Masterarbeit bildete die Untersuchung eines Catecholat-Ligandensystems auf Tris(2-aminoethyl)amin-Basis (TREN), dessen Komplexbildung mit Titan(IV) und die Einlagerung weiterer Metallkationen in eine Kavität des Titankomplexes. Ziel war die Synthese verschiedener Verbindungen für die medizinische Anwendung im Bereich der Positronen-Emissions-Tomographie (PET), eines der wichtigsten bildgebenden Verfahren für z. B. metabolische Prozesse in der Medizin. Da die Zahl der Positronen-emittierenden Nuklide, die bereits medizinisch genutzt werden können, limitiert ist, besteht das Interesse an weiteren Positronen-Emittern und somit an der Synthese von Ti(IV)-Koordinationsverbindungen und deren Koordinationschemie. Und genau damit beschäftigte sich Herr Ebel. Er stellte spezielle Liganden her, die er anschließend kristallisierte und umfangreich als Festkörper und in Lösung charakterisierte.

Mithilfe der Einkristalldiffraktometrie sowie der NMR und Elektronenspray-Ionisationsmassenspektrometrie (ESI-MS) gewann er Erkenntnisse zur Koordinationschemie und der Selektivität der unterschiedlichen Koordinationsstellen der Liganden und beobachtete auch tautomeres Verhalten. Er konnte eine bereits bekannte Kristallstruktur einer Vorstufe des Liganden neu kristallisieren, hochauflösend vermessen und mit aktuellen quanten-kristallographischen Verfeinerungsmethoden modellieren. So gelang es ihm, die verschiedenen inter- und intramolekularen Wasserstoffbrücken unter Berücksichtigung der chemischen Bindung konsistent zu beschreiben.

Für einen monometallischen Ti-Komplex konnte er trotz kristallographischer Herausforderungen, wie monokliner Winkel nahe 90°, Verzwilligung, Fehlorderungen von Lösungsmitteln und Anionen, erfolgreich eine Strukturlösung erhalten und anschließend die Lage der Wasserstoffatome modellieren. Ein weiterer hetero-bi-metallischer Ti/Ca-Komplex konnte ebenfalls erfolgreich von Herrn Ebel kristallisiert und charakterisiert sowie die Ein- und Auslagerung des Calcium-Kations untersucht werden.

Seine Arbeiten mündeten bereits in eine Kooperation mit dem Universitätsklinikum Aachen zur Stabilitätsuntersuchung der Komplexe *in vivo* und mit dem Forschungszentrum Jülich zur Erzeugung von Ti-basierten Radiotracer und Positronenemittern.

Seine Betreuerin, Iris Oppel, schreibt über ihn: „Insgesamt legte [er] eine sehr gut leserliche Masterarbeit [vor], die nicht nur durch die Fülle der Ergebnisse, sondern auch durch die Sorgfalt und Tiefe, mit der die erhaltenen Ergebnisse analysiert werden, besticht.“ Und weiter: „[Herr Ebel] ist ein absoluter Ausnahme-Jungwissenschaftler, der in allen Bereichen (Forschung und Lehre) meinen Arbeitskreis und die Anorganische Chemie in Aachen bereichert.“

Dem schließen wir uns als Preiskomitee an und freuen uns nun, Herrn Ebel die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2024 zu übergeben.

LUKAS NUSSER (LMU MÜNCHEN)



Herr Nusser wurde für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem Titel „Synthese und Strukturchemie der ersten Caesium-Mercurid-Oxide“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Constantin Hoch, in der Anorganischen Chemie der Ludwig-Maximilians-Universität München an. Herr Nusser hat Chemie und Biochemie studiert.

Gegenstand der Masterarbeit war die Herstellung der ersten „echten“ Mercurid-Anionen. Quecksilber bzw. Hydrargyrum (Hg) hat besondere Eigenschaften, wie z. B. ein niedriger Schmelzpunkt, ein edler chemischer Charakter und damit verknüpft viele Besonderheiten der Quecksilber-Chemie. Diese sind in der Elektronenkonfiguration begründet. Die Elektronenhülle mit abgeschlossenen s-, f- und d-Schalen wird durch relativistische Effekte noch weiter stabilisiert, sodass das Quecksilber-Atom besonders inert ist und wie ein Edelgas erscheint. Diese Besonderheit führt dazu, dass die Bildung von Anionen (wie es zum Beispiel für die benachbarten Elemente Gold, Platin, Thallium oder Blei häufig beobachtet wird) sehr ungünstig ist. Es reagiert mit Alkali-, Erdalkali- oder Lanthanoidmetallen zu Amalgamen, die allesamt metallische Eigenschaften aufweisen. Vielfach wurde daher angenommen, dass Quecksilber prinzipiell gar keine Anionen bilden kann.

Durch Reaktion von Caesium mit Quecksilber und einer Sauerstoffquelle konnte Herr Nusser das Mercurid-Anion durch die Einlagerung in die ionische Matrix zusammen mit Oxid-Anionen stabilisieren. So gelang es anhand von vier neuartigen Quecksilber-Oxiden das würfelförmige $[\text{Hg}_8]^{6-}$ -Anion zu untersuchen. Dazu verwendete er neben der Röntgeneinkristallstrukturanalyse auch spektroskopische und thermochemische Analysen. Gerade die Röntgenstrukturanalyse erforderte sorgfältiges Arbeiten. Einerseits waren die Proben sehr luftempfindlich und damit die Präparation geeigneter Einkristalle herausfordernd. Andererseits stellten die hohen Absorptionskoeffizienten der Verbindungen und die Lokalisierung des Sauerstoffatoms neben den schweren Elementen Caesium und Quecksilber besondere Ansprüche an Messstrategie und Absorptionskorrektur. Bereits Lieselotte Templeton hatte damals, auch motiviert durch ihre Arbeiten an Caesium-Verbindungen, ihr bekanntes Absorptionsprogramm erarbeitet.

Für eine fünfte Verbindung konnte Herr Nusser das $[\text{Hg}_{12}]^{6-}$ -Anion in der bislang nicht gekannten Gestalt zweier flächenverknüpfter Würfel bestimmen. Dies bietet Anlass zur Annahme, dass die Strukturchemie der Mercuride vielfältig ist und zukünftig weitere Verbindungen gefunden werden.

Sein Betreuer, Constantin Hoch, schreibt: „Die Arbeiten von Herrn Nusser können als Paradigmenwechsel bezeichnet werden.“ Ob sie tatsächlich einen Paradigmenwechsel einleiten, können wir als Preiskomitee nicht sagen. Wohl aber, dass uns die profunde, detailreiche und umfassende Arbeit überzeugt hat.

Daher freuen wir uns, Herrn Nusser nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2024 zu übergeben.

Tobias Beck (Universität Hamburg)
Holger Kohlmann (Universität Leipzig)
Tilman Leisegang (TU Bergakademie Freiberg)
Florian Meurer (Universität Regensburg)
Jakob Möbs (Universität Marburg)
Thomas Schleid (Universität Stuttgart)

MAX-VON-LAUE-PREIS 2024 AN ELLA M. SCHMIDT

IN ANERKENNUNG IHRER ARBEITEN FÜR EINEN NEUARTIGEN ANSATZ
ZUR QUANTITATIVEN ANALYSE DER DIFFUSEN STREUUNG MITTELS DER
DREIDIMENSIONALEN DIFFERENZ-PAARVERTEILUNGSFUNKTION



Es ist mir eine Freude und Ehre, ihnen heute die diesjährige Preisträgerin des Max-von-Laue-Preises, Frau Prof. Dr. Ella Schmidt vorstellen zu dürfen. Die DGK zeichnet sie heute für ihre herausragenden Arbeiten auf dem Gebiet der Strukturanalyse fehlgeordneter Materialien aus.

Frau Schmidt hat Physik in Erlangen in dem forschungsorientierten Studiengang studiert. Das bedeutete ein vertieftes Studium, welches sehr früh an die Forschung heranführen soll. Frau Schmidt hat dieses Studium mit Auszeichnung und einer Masterarbeit zum Thema „Photonengeneration und Photoemission an Metall-Nanospitzen“ absolviert.

Ich selber durfte Frau Schmidt dann in ihrer Doktorarbeit betreuen, mit der ich sie an ihren heutigen Forschungsschwerpunkt und an die Kristallographie herangeführt habe. Die grobe Zielsetzung war die Analyse diffuser Streuung an Einkristallen, ein Thema, das auch heutzutage noch als esoterisch und schwierig gilt und einzustufen ist. Auf Grund der Vielzahl an möglichen Baufehlertypen und der schier unendlichen Möglichkeiten diese un- beziehungsweise lediglich nah-geordnet in einen Kristall einzubauen gibt es dazu immer noch keinen Ansatz, der mit den direkten Methoden der Strukturbestimmung der gemittelten Struktur vergleichbar wäre.

Frau Schmidt hat sich sehr schnell in dieses ihr völlig neue Gebiet eingearbeitet und einen extrem cleveren Algorithmus entwickelt, der es erlaubt in Strukturen aus mehreren fehlgeordneten Molekülen diese Verteilungsprinzipien deutlich klarer aus den Beugungsdaten herauszuarbeiten. Im Prinzip ist schon lange bekannt, dass sich die diffuse Streuung einer molekularen Struktur berechnen lässt als das Produkt aus der Streuung der Verteilungsfunktion und der Differenz der Streuung der beiden Molekülarten. Frau Schmidt gelang es nun die experimentellen Daten durch den Faktor der Differenzstreuung zu teilen. Die Schwierigkeiten, die es zu überwinden galt, waren die vielen Bereiche, in denen die Differenzstreuung null ist und somit eine Division unmöglich macht, zu identifizieren, zu maskieren und vor allem überhaupt herauszuarbeiten, welche Molekülpaare heranzuziehen sind.

Das zweite Thema Ihrer Doktorarbeit, mit welchem ich sie besonders herausgefordert habe, passt besonders gut zu unserem Tagungsort Bayreuth. Dank der Arbeiten von Sander van Smaalen ist die Strukturanalyse modulierter Strukturen durch die Anwendung des periodischen Superraumkonzeptes sehr gut etabliert. Dank meiner Herausforderung gelang es Frau Schmidt auch in diesen Superraum Unordnung hineinzubringen und damit eine Möglichkeit aufzuzeigen nahezu beliebige diffuse Streuung elegant aus einem fehlgeordneten Superraum über den Schnitt in den tatsächlichen Kristallraum zu berechnen.

Dank all dieser ausgezeichneten Arbeiten wurde die Dissertation von Frau Schmidt mit *summa cum laude* ausgezeichnet und auch von der an der FAU sehr angesehenen Staedtler-Stiftung als die beste naturwissenschaftliche Doktorarbeit ausgezeichnet. Damit wurde es Zeit für mich Ella in die Ferne zu entlassen.

Frau Schmidt konnte sich erfolgreich auf eine PostDoc-Stelle bei Andrew Goodwin in Oxford bewerben. Andrew ist sicherlich einer der weltweit führenden Forschungspersönlichkeiten auf dem Gebiet der Fehlordnung und Ella konnte in seiner Gruppe viele neue Anregungen aufgreifen. Stellvertretend möchte ich hier nur eine Publikation aus der Zeit herausgreifen. In dieser Arbeit konnte Ella wunderbar aufzeigen, welche deutlich verbesserten Ansätze zur Beschreibung fehlgeordneter Strukturen sich durch die Kombination passender Theoriefunktionen ergeben. Ella konnte elegant aufzeigen, dass die Kombination mit der Mean-Field-Theorie die Analyse gegenüber den klassischen Monte-Carlo-Simulationen deutlich verbessert.

Aus Andrew's Sicht wohl bedauerlicherweise endete Ellas PostDoc-Zeit schon nach wenig mehr als einem Jahr durch ihre Berufung auf die Professur für Kristallographie und Geomaterialforschung an der Universität Bremen. Die hervorragende Wertschätzung, die Ellas wissenschaftliche Arbeit findet, äußert sich nicht zuletzt darin, dass diese Berufung gerade mal gut zwei Jahre nach ihrer Promotion erfolgte.

Auch in Bremen befasst sich Ella weiterhin mit fehlgeordneten Materialien und diffuser Streuung. Auch hier nur kurz herausgegriffen seien die Arbeiten zur Anwendung der 3D- Δ -PDF. Dieses auf diffuse Streuung erweiterte Konzept der Pattersonfunktion bzw. des einkristallinen Äquivalents der extrem populär gewordenen Pulver-PDF zeichnet sich derzeit durch eine rasant anwachsende Wertschätzung aus.

Ella hat zu dieser Thematik zum Beispiel Daten an kubisch stabilisiertem Zirkonia gemessen, sowohl mit Röntgen als auch mit Neutronen, da die Fehlordnung vor allem durch den Sauerstoff verursacht wird. Damit ist dies ein Paradebeispiel für die Komplementarität der Röntgen- und Neutronenstreuung. Dank ihrer Kontakte zu Lukas Palatinus konnte Ella hier noch eins draufsetzen und zusätzlich an demselben Material eine 3D- Δ -PDF mit Elektronenbeugung messen. Damit ist dieser Datensatz nicht nur der weltweit erste Elektronenbeugungsdatensatz, sondern sicherlich auch das erste Material, bei dem zur Analyse Röntgen, Neutronen und Elektronenbeugung zusammenkamen.

Reinhard Neder (FAU Erlangen-Nürnberg)

WILL - KLEBER - GEDENKMÜNZE 2024 AN KAY DIEDERICHS

FÜR HERAUSRAGENDE BEITRÄGE AUF DEM GEBIET DER
MAKROMOLEKULAREN KRISTALLOGRAPHIE, INSBESONDERE FÜR DIE
ENTWICKLUNG NEUER METHODEN ZUR AUSWERTUNG VON DIFFRAKTIONS-
DATENSÄTZEN UND ZUR VERFEINERUNG VON ATOMMODELLEN



Sehr geehrte Damen und Herren, liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist mir eine ausgesprochene Freude die Laudatio für den diesjährigen Preisträger der Will-Kleber-Gedenkmünze, Prof. Kay Diederichs, zu halten. Mit der Will-Kleber-Gedenkmünze zeichnet die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie herausragende wissenschaftliche Beiträge aus. Durch die Auszeichnung von Kay Diederichs für seine Beiträge auf dem Gebiet der makromolekularen Kristallographie, insbesondere für die Entwicklung neuer Methoden zur Auswertung von Diffraktionsdatensätzen und zur Verfeinerung von Atommodellen, ist diese Intention der Gedenkmünze in besonderem Maße realisiert worden.

Kay Diederichs studierte Physik an den Universitäten Münster und Freiburg. Seine Promotionsschrift fertigte er in Freiburg im Zeitraum von 1986 bis 1990 im Fachbereich Chemie in der Arbeitsgruppe von Prof. Georg Schulz an, zu der Zeit ein Wegbereiter der Proteinkristallographie und Strukturbioogie in Deutschland, welcher 2019 mit der Carl-Hermann-Medaille der DGK ausgezeichnet wurde. Thema der Promotionsschrift von Kay Diederichs war die Kristallstrukturanalyse der Adenylatkinase aus Rinderherzmitochondrien.

Nach seiner Promotion zog es Kay Diederichs in die Arbeitsgruppe von Prof. Andy Karplus an die *Cornell University* in Ithaca im Staate New York, ausgestattet mit einem Feodor-Lynen-Stipendium der Alexander-von-Humboldt-Stiftung. Dort gelang ihm die Kristallstrukturaufklärung von GMCSF, einem menschlichen Cytokin und Wachstumsfaktor, welche beide zusammen in der Zeitschrift *Science* veröffentlichten. Die erfolgreiche wissenschaftliche Zusammenarbeit mit Andy Karplus hielt Kay Diederichs auch nach seinem Wegzug aus den USA bis zum heutigen Tag aufrecht.

Im Jahr 1991 zog es ihn wieder nach Deutschland und zwar in die Arbeitsgruppe von Prof. Wolfram Welte ans Institut für Biophysik und Radiobiologie der Universität Freiburg. Nach dem Ruf von Wolfram Welte an die Universität Konstanz folgte er diesem und habilitierte dort im Jahr 1999 im Fachbereich Biologie. Nach mehreren Versuchen Kay Diederichs aus Konstanz wegzuberufen, zum Beispiel als Professor an das *Karlsruhe Institute of Technology* oder als Professor an die *University of Nottingham* in England, wurde er im Jahr 2004 zum ordentlichen Professor für Molekulare Bioinformatik an der Universität Konstanz ernannt, wo er auch heute noch tätig ist.

Die wissenschaftliche Leistung von Kay Diederichs ist immens und wird unter anderem durch 180 Publikationen in hochrangigen wissenschaftlichen Journalen belegt – davon 7 in der Zeitschrift *Science*, 2 in *Nature*, mehrere in *Nature Structural Biology*, *Nature Communications* und *Nature Methods*. Zwei dieser Publikationen eignen sich besonders gut zum Zeigen, warum Kay Diederichs weltweit ein bekannter Name in der Proteinkristallographie ist. Zum einen eine Publikation in der Zeitschrift *Nature Structural Biology* aus dem Jahr 1997 mit dem Titel: „Improved R-factors for diffraction data analysis in macromolecular crystallography“, zum anderen eine Publikation in der Zeitschrift *Science* aus dem Jahr 2012 mit dem Titel: „Linking crystallographic model and data quality“. Während erstere laut *Web of Science* bis zum heutigen Datum ca. 800 Mal zitiert wurde, wurde letztere um die 1400 Mal zitiert.

In beiden Publikationen entwickelte Kay Diederichs grundlegend neue Indikatoren, um die Qualität von Proteindiffraktionsdatensätzen sowie die Qualität und Genauigkeit der aus den Datensätzen abgeleiteten Proteinstrukturen zu evaluieren. Wie Sie sicherlich wissen, „leidet“ die Proteinkristallographie unter dem begrenzten Streuvermögen von Proteinkristallen. Wegen des ungünstigen Verhältnisses von experimentellen Datenpunkten (*vulgo* Reflexen) zur Anzahl der zu bestimmenden Atomparameter (Koordinaten plus Temperaturfaktoren) entspricht das Lösen einer Proteinkristallstruktur dem Lösen eines typischen unterbestimmten Problems. Die Arbeiten von Kay Diederichs ermöglichen einen fundamental neuen Zugang erstens zur Abschätzung der Datenqualität und zweitens bezüglich des Zusammenhangs von Daten- und Modellqualität. Ohne auf Details einzugehen, haben die Arbeiten von Kay Diederichs nachhaltig den Umgang und die Auswertung von Diffraktionsdatensätzen verändert. Hierbei hat er sich insbesondere der Evaluierung und Abschätzung des Informationsinhalts der Reflexe der höchsten Auflösungsschale gewidmet (Stichwort *RMEAS*, *CC**). Gleichzeitig schützen die von ihm vorgeschlagenen Indikatoren und Strukturverfeinerungsprotokolle (Stichwort *twinn refinement*) vor einer „Überverfeinerung“ der Atommodelle, einer Problematik, welche solchen unterbestimmten Problemen inhärent ist. Die von ihm eingeführten Indikatoren haben Einzug in alle gängigen Proteinkristallographieprogramme gehalten. Hierzu gehört auch das weltweit benutzte und ursprünglich von Wolfgang Kabsch entwickelte Auswertprogramm XDS, für dessen Pflege und Weiterentwicklung Kay Diederichs bis zum heutigen Tag sehr viel Zeit aufwendet.

Im Gespräch mit Kay Diederichs machte er mich auf eine weitere Publikation aufmerksam, nämlich eine Publikation von 2017 in *Acta Crystallographica Section D*, in der er eine generell anwendbare Methode zur multidimensionalen Skalierung vorstellt. Er selbst zählt diese Publikation zu einer seiner größten wissenschaftlichen Leistungen, auch wenn er selbst zugeben muss, dass diese Publikation bis jetzt erst wenig Beachtung gefunden hat – ich selbst hege wenig Zweifel, dass dies sich sicherlich bald ändern wird.

Neben seinen Forschungsaktivitäten hat sich Kay Diederichs auch immer sehr stark in der Ausbildung der nächsten Generation von Kristallographen engagiert und steht somit fraglos in der Tradition von Will Kleber. So unterhält Kay Diederichs zwei kristallographische WIKIS, und zwar WIKI-CCP4 und WIKI-XDS, die täglich von hunderten Kristallographen konsultiert werden. Kay Diederichs ist auch ein weltweit sehr gefragter Vortragender und Tutor (Stichwort CCP4 und DGK) und hat sich im Laufe seiner Karriere bei mehr als 100 kristallographischen Trainingsveranstaltungen als Tutor eingebracht.

Bitte erlauben Sie mir im Folgenden auch ein paar persönliche Worte zu Kay Diederichs als außergewöhnlichen Menschen zu sagen. Viele hier im Saal kennen Kay schon sehr lange, inklusive meiner eigenen Person, da wir alle zusammen zur selben Zeit in Freiburg bei Prof. Georg Schulz promovierten. Kay war mir und anderen hier im Saal ein paar Jahre voraus und für viele von uns ein klassisches *role model*. Kay war auch damals schon ein respekt-einflößender, sehr ernsthafter Mensch, jedoch gleichzeitig immer unglaublich hilfsbereit und zu jeder Zeit bereit, sein immenses Kristallographiewissen mit uns zu teilen. So hat er uns unter anderem auch in die Geheimnisse der damaligen VAX/VMS-Computer sowie in das Programmieren mit Fortran77 eingewiesen. Kay war auch immer schon ein sehr wissbegieriger und neugieriger Mensch und an eine Gegebenheit kann ich mich sehr gut erinnern. Und zwar erklärte er mir um 1990 herum, dass er aus reiner Neugier gerade versucht ein neuronales Netzwerk zu programmieren, um die Sekundärstruktur von Proteinen vorherzusagen. Heute sind neuronale Netzwerke und künstliche Intelligenz in aller Munde. Kay aber ahnte 1990 schon, dass „da was dran sein könnte“ und war damit seiner Zeit ganz offensichtlich weit voraus. Diese Neugier, sein wissenschaftliches unabhängiges Denken und seine immense Großzügigkeit, sein Wissen mit anderen zu teilen, hat sich Kay über seine ganze wissenschaftliche Karriere hinweg aufrechterhalten.

Mich freut es besonders, dass mit der Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze an Kay Diederichs fundamental methodische Arbeiten geehrt werden, ein Forschungsgebiet, das es im Kontext der hiesigen Universitätslandschaft zusehends schwer hat. Die Auszeichnung von Kay Diederichs unterstreicht zum einen die Lebendigkeit dieser Forschung in Deutschland und zum anderem kann man sich wünschen, dass diese Auszeichnung jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern Mut zuspricht, sich auf dem Gebiet der Methodenentwicklung zu engagieren. Die internationale Anerkennung der Arbeiten von Kay Diederichs sowie die Übernahme der von ihm vorgeschlagenen Validierungs- und Qualitätsindikatoren in die weltweit am häufigsten verwendeten kristallographischen Programmpakete legen eindeutig Zeugnis darüber ab, wie spannend theoretische Forschung sein kann.

Sehr geehrter Prof. Diederichs, lieber Kay, ganz herzlichen Glückwunsch zur Verleihung der Will-Kleber-Gedenkmünze 2024.

Yves Muller (FAU Erlangen-Nürnberg)

CARL-HERMANN-MEDAILLE 2024 AN JURI GRIN

FÜR GRUNDLEGENDE BEITRÄGE ZUR KRISTALLCHEMIE INTERMETALLISCHER
VERBINDUNGEN UND INSBESONDERE ZUM EINFLUSS DER REALSTRUKTUR
AUF CHEMISCHE BINDUNG UND PHYSIKALISCHE EIGENSCHAFTEN



Sehr geehrte Damen und Herren!

Heute haben wir uns hier beim Ehrenabend der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie versammelt, um die Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2024 an Prof. Juri Grin zu feiern. Sein wissenschaftliches Werk ist äußerst vielfältig und steht für die Untersuchung zahlreicher grundlegender Aspekte des Zusammenhangs zwischen Defekten in intermetallischen Verbindungen und ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften. Seine Impulse haben nicht nur experimentell das Gebiet der Kristallographie um wesentliche Aspekte der Charakterisierung von Realstrukturen erweitert, sondern seine Entwicklung quantenchemischer Techniken im Ortsraum schufen einen neuartigen Zugang zur Beschreibung chemischer Bindungen.

Sein Lebenswerk umfassend darzustellen würde den Zeitrahmen dieser Veranstaltung sprengen. Daher möchte ich mich hier auf die Teilgebiete der Galliumverbindungen und der Clathrate beschränken. Seine Beiträge zum sogenannten „intergrowth concept“, zur Lage-selektiven Katalyse, zur Darstellung neuer Elementmodifikationen aus Zintl-Phase sowie zu komplexen intermetallischen Verbindungen muss ich dagegen an dieser Stelle vernachlässigen. Juri Grin wurde am 23.07.1955 in Lviv (Ukraine) geboren und studierte von 1972 bis 1980 an der dortigen Universität Chemie. Die Ergebnisse der Promotion bei Prof. Dr. Evgenij Gladyshevsky schufen die Grundlage für eine umfangreiche Monographie über intermetallische Verbindungen des Galliums (auf Russisch), die auch heute noch als Standardreferenz dient.

Er blieb diesem Gebiet bis in die jüngste Zeit treu und konnte beispielsweise die lange unverstandene Phasenbreite von EuGa_{2+x} strukturell deuten. Diese ist darauf zurückzuführen, dass in der Kristallstruktur ein Teil der Europiumatome durch Galliumdreiecke ersetzt werden kann, so dass die exakte Summenformel präziser als $\text{Eu}_{1-x}\text{Ga}_{2+3x}$ formuliert werden sollte. Ebenso blieb das magnetische Verhalten der Verbindung FeGa_3 lange Zeit unverstanden, bis Juri Grin und Mitarbeiter seines Arbeitskreises eine geringe Phasenbreite nachweisen konnten. Die revidierte Zusammensetzung gemäß $\text{Fe}_{1+x}\text{Ga}_3$ spiegelt auch wider, dass die überschüssigen Eisenatome Leerstellen der Kristallstruktur teilweise besetzen und nur diese Minoritätskomponente Träger eines paramagnetischen Moments ist.

Juri Grin wechselt im Jahr 1991 mit einem Alexander von Humboldt-Stipendium erst an das Max-Planck-Institut für Metallforschung, um anschließend am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung zu arbeiten. In diesem Umfeld wurde auch sein Interesse am Gebiet der Defektchemie intermetallischer Käfigverbindungen geweckt. Dies sollte einer der Schwerpunkte seiner wissenschaftlichen Arbeit in den nächsten Jahren werden. Besonders nach seinem Wechsel im Jahr 1998 als zunächst Forschungsgruppenleiter, später Direktor am neu gegründeten Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden wurde das Gebiet intensiv weiterbearbeitet.

Es ist die Defektchemie intermetallischer Käfigverbindungen, für die Juri Grin heute weltbekannt ist. Clathrate weisen einen Elektronenüberschuss auf, da Verbindungen wie $\text{Cs}_8\text{Si}_{46}\cdot 8\text{e}$ ausschließlich vierbindiges Silicium enthalten, das keine Elektronen aufnimmt. Durch sorgfältige Strukturuntersuchungen konnten Defekte nachgewiesen werden, die im Idealfall in einer Zusammensetzung $\text{Cs}_8\text{Si}_{44}\square_2$ resultieren. Da die eine Leerstelle tetraedrisch umgebenden Atome je ein Elektron pro Defekt aufnehmen, entspricht diese Zusammensetzung einer elektronenpräzisen Situation gemäß $\text{Cs}_8[(4\text{b})\text{Si}^0]_{36}[(3\text{b})\text{Si}^-]_8\square_2$.

In der Folge entwickelte Juri Grin nicht nur die Chemie, sondern auch die Physik intermetallischer Gerüstverbindungen entscheidend weiter. Die Palette der Aktivitäten wurde um die Entwicklung innovativer Synthesemethoden erweitert, die Zugang zu Clathraten durch Oxidation intermetallischer Phasen ermöglichen. Auch im Bereich der anwendungsorientierten Forschung gelangen Meilensteine, u. a. bei der Untersuchung von Käfigverbindungen zur thermoelektrischen Stromerzeugung.

Mit seinen vielfältigen und qualitativ hochwertigen Beiträgen zur Chemie intermetallischer Verbindungen und Materialien hat sich Juri Grin als einer der sichtbarsten Akteure in diesem Feld profiliert und auch international etabliert. Sein wissenschaftliches Lebenswerk umfasst mehr als 800 Artikel in Fachzeitschriften und Büchern.

Die Sichtbarkeit von Juri Grin spiegelt sich aber nicht allein in dieser eindrucksvollen Zahl wider, sondern auch in seinen zahlreichen akademischen Ehrungen und freundschaftlichen Kontakten zu Wissenschaftlern weltweit. Als Dozent und akademischer Lehrer kann Juri Grin auf die Ausbildung von mehr als zwanzig Doktoranden zurückblicken, sieben ehemalige Mitarbeiter haben sich für Rufe an verschiedene Universitäten qualifiziert und diese angenommen (Ukraine, Deutschland, USA und China).

Wir wünschen Professor Juri Grin in seiner kürzlich begonnenen Zeit als Direktor emeritus ein wenig mehr Zeit für die Familie und seine Hobbies außerhalb der Wissenschaft. Wir sind zuversichtlich, auch zukünftig einen wertvollen Berater bei einer Tasse Kaffee oder grünem Tee treffen zu können. Herzlichen Glückwunsch.

Ulrich Schwarz (MPI CPFS Dresden)

HANS BURZLAFF

04.07.1925 – 21.04.2024

Am 21.04.2024 ist der Lebensweg von gut 92 Jahren für Hans Burzlaff zu Ende gegangen. Geboren am 18.02.1932 in Schlawe in Pommern, war seine Kindheit und Jugend von Krieg und Nachkrieg mit Flucht und Vertreibung überschattet. In Schleswig-Holstein fand die Familie eine neue Heimat, wo er seine Schulausbildung fortsetzte und das Studium der Mathematik und Physik in Kiel begann, das er 1961 mit der Promotion im Fach Mineralogie abschloss.

H. Burzlauffs weitere akademische Laufbahn wurde geprägt durch E. Hellner, der es sich zur Aufgabe gemacht hatte, den im Zusammenbruch des Dritten Reiches weitgehend verlorengegangenen Wissenschaftszweig der Röntgenstrukturanalyse im Nachkriegs-Deutschland wiederzubeleben. Insbesondere Hellners Wechsel nach Marburg als Nachfolger von Carl Hermann, der noch wesentlichen Anteil an der Wissenschaftsgeschichte der Röntgenkristallographie hatte, bot H. Burzlaff ein hervorragendes Umfeld, um aktuelle Arbeiten kennenzulernen und eigene Ideen zu entwickeln. Besonders die von J. Karle und H. Hauptman entwickelten „Direkten Methoden“, die später auch mit dem Nobelpreis bedacht wurden, regten ihn an und sollten neben intensiven Bemühungen um Entwicklung von Geräten und Verbesserung der Messtechnik das Hauptarbeitsgebiet werden.

In Erlangen hatte der Mineraloge und spätere Rektor Th. Ernst die Bedeutung einer eigenständigen Kristallographie für die Naturwissenschaftliche Fakultät erkannt und betrieb deshalb mit großem Einsatz die Einrichtung eines Lehrstuhls für Kristallographie. H. Burzlaff wurde 1971 zum ersten Inhaber dieses Lehrstuhls berufen. Aufgrund der interdisziplinären Struktur dieses Faches mit zahlreichen Vernetzungen im Bereich der naturwissenschaftlichen Fakultät war der Lehrstuhl zunächst keinem Institut zugewiesen. Es entwickelten sich sehr erfolgreiche Kooperationen mit der Chemie, Mineralogie, Mathematik, Pharmazie und Physik. Dem Rat von E. Mollwo folgend, wurde dieser Lehrstuhl in das Institut für Angewandte Physik eingegliedert.

Unter der Leitung von H. Burzlaff entwickelte sich der Erlanger Lehrstuhl für Kristallographie zu einem Zentrum kristallographischer Forschung im Bereich der Grundlagenforschung und in der Messtechnik. Ein besonderes „Schmankerl“ ist die in Zusammenarbeit mit K. Hümmer gelungene praktische Realisierung der Messung von Mehrstrahlinterferenzen an nicht-idealen Kristallen mit Hilfe eines selbstentwickelten Sechskreis-Diffraktometers.

H. Burzlaff hat als akademischer Lehrer einer Generation von Studenten, auch in der Zeit des „Studentenbergs“, mit großer Sorgfalt Grundkenntnisse im Fach Kristallographie vermittelt, als Senator seinen Beitrag zur akademischen Selbstverwaltung geleistet, war langjähriger Mitherausgeber der *Acta Crystallographica* und Vorsitzender der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie. In den letzten Dienstjahren hat er sich besonders der Systematik der vielen Hunderttausend bis heute bestimmten Kristallstrukturen gewidmet, die in zahlreichen Datenbanken ruhen und deren wissenschaftlicher Informationsgehalt zu den submarinen Schätzen gehört, die noch der Bergung harren. Außerdem sind seine Beiträge zu den *International Tables for Crystallography* zu erwähnen, an deren Neuauflage er bis zuletzt gearbeitet hat. Im Jahr 2008 wurde sein Lebenswerk mit der Carl-Hermann-Medaille geehrt.

Die Mitarbeiter des Instituts danken Hans Burzlaff für seine Lebensleistung, mit der er dem Erlanger Lehrstuhl für Kristallographie internationale Geltung verschafft hat. Seine freundliche Art und Verbundenheit mit unserem Lehrstuhl werden uns auch weiterhin in der Erinnerung begleiten.

Helmuth Zimmermann,
Rainer Hock, Reinhard Neder, Tobias Unruh und alle Mitglieder des Lehrstuhls für
Kristallographie und Strukturphysik

ANKÜNDIGUNGEN



33rd ANNUAL MEETING
of the GERMAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY (DGK)

10–13 MARCH 2025
HANNOVER

www.dgk-conference.de

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN MAX-VON-LAUE-PREIS 2025

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:

Prof. Dr. Ella M. Schmidt
Kristallographie und Geomaterialforschung
Fachbereich 05 Geowissenschaften
Universität Bremen
Postfach 330 440
28359 Bremen
Telefon: 0421 218 65161
E-Mail: ella.schmidt@uni-bremen.de

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 2025 in Hannover statt.

Einsendeschluss: **30. November 2024**

Preiskomitee für den Max-von-Laue-Preis:

<https://dgk-home.de/intern/gremien/komitee-fuer-den-max-von-laue-preis>

Preisordnung:

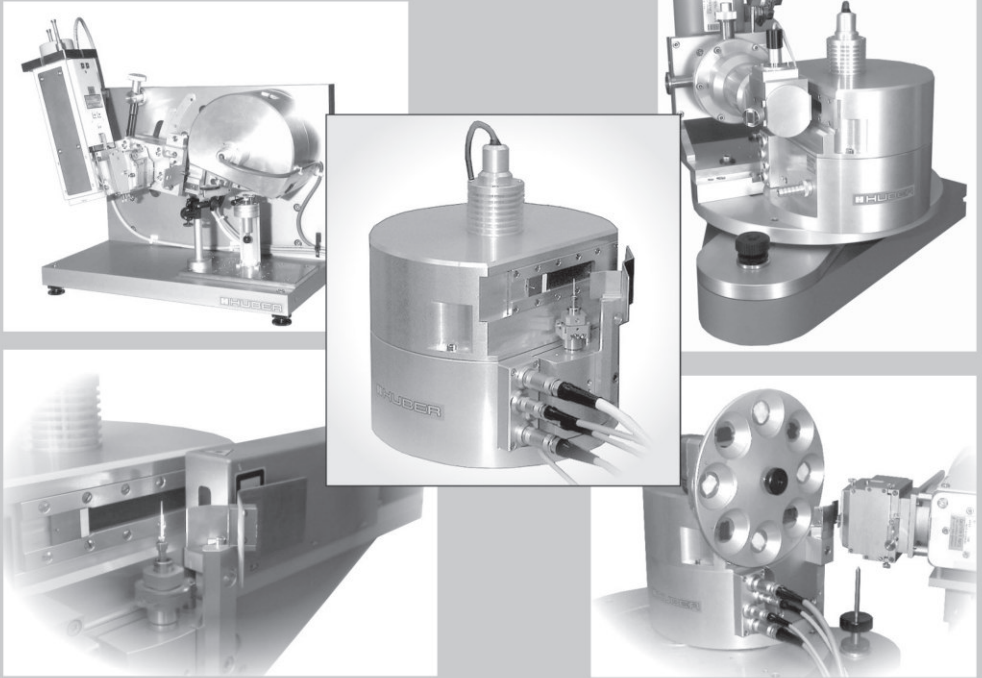
<https://dgk-home.de/intern/statut-satzungen/ordnung-fuer-den-max-von-laue-preis>

Bisherige Preisträger:

<https://dgk-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-des-max-von-laue-preises>

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

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL - KLEBER - GEDENKMÜNZE 2025

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 **30.11.2024** 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

Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze:

<https://dgk-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-der-will-kleber-gedenkmuenze/>

Preisordnung:

<https://dgk-home.de/intern/statut-satzungen/ordnung-und-satzung-der-will-kleber-gedenkmuenze/>

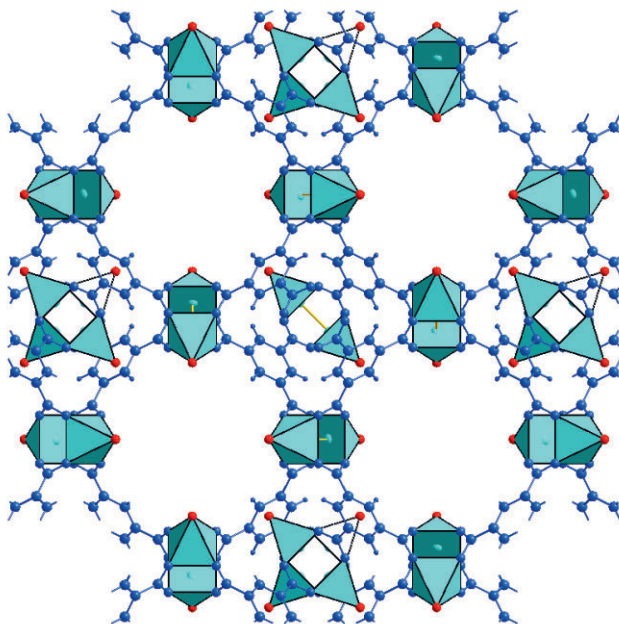
Bisherige Preisträger:

<https://dgk-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-der-will-kleber-gedenkmuenze/>



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Version 5.1

Version 5.1 unseres Grafikprogramms **Diamond** beinhaltet eine Reihe neuer Funktionen, die sich insbesondere für die Arbeit mit **Metal Organic Frameworks (MOF)** eignen:

Das neue Untermenü *Edit/Extended Selection* bietet Kommandos zur gezielten Auswahl von (Molekül-)Fragmenten oder von symmetrie-äquivalenten Atomen und Bindungen, *Build/Destroy* neue Kommandos zum Entfernen *nicht* ausgewählter Atome und Bindungen.

Mit den Kommandos *Copy Style* und *Paste Style* können jetzt auch Eigenschaften mehrerer verschiedener Objekte (Atome, Bindungen etc.) auf einmal übertragen werden.

Design schemes lassen sich jetzt auch gezielt aus ausgewählten Fragmenten erstellen und auf (ausgewählte) Fragmente anderer Strukturbilder anwenden. So kann man z.B. verschiedenen organischen Linkern spezifische Farbschemata zuweisen.

Version 5.1 von Diamond wird im September 2024 erscheinen. Sie ist für lizenzierte Nutzer der aktuellen Version 5 sowie lizenzierte Nutzer von Version 4.x kostenlos. Weitere Infos finden Sie unter:

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



**CRYSTAL
IMPACT**

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

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

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL - HERMANN - MEDAILLE 2025

Die Carl-Hermann-Medaille ist die höchste Auszeichnung auf dem Gebiet der Kristallographie, die die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie vergibt. Sie ist nach dem deutschen Physiker und Professor für Kristallographie Carl Hermann (1898–1961) benannt. Carl Hermann war nicht nur ein ausgezeichnete Wissenschaftler, er wurde auch posthum als Gerechter unter den Völkern geehrt.

Auch im kommenden Jahr wird die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie wieder die **Carl-Hermann-Medaille** verleihen und zwar für das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten auf dem Gebiet der Kristallographie.

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen bis zum **30.11.2024** zuzusenden. Alle Mitglieder der DGK sind 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

Preiskomitee für die Carl-Hermann-Medaille:

<https://dgk-home.de/intern/gremien/komitee-fuer-die-carl-hermann-medaille/>

Preisordnung:

<https://dgk-home.de/intern/statut-satzungen/satzung-carl-hermann-medaille/>

Bisherige Preisträger:

<https://dgk-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-der-carl-hermann-medaille/>



SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

APEX5 - The world's most powerful crystallographic software package

Unleash the Power of Efficiency

- Increased productivity with smart automation.
 - Say goodbye to repetitive tasks with intelligent automation.
- Best accessibility with a user-friendly interface.
 - Navigate with ease thanks to intuitive design, making complex tasks simple.
- Reduced operational costs with cloud-based solutions.
 - Eliminate the need to maintain physical hardware infrastructure.

Transform the way you work with APEX5.

Experience the pinnacle of performance, innovation, and cloud connectivity.

For more information, visit bruker.com/apex5

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN LIESELOTTE-TEMPLETON-PREIS 2025

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen im Jahr 2025 erneut 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 auf dem Ehrenabend der 33. Jahrestagung der DGK in Hannover verliehen.

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

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 2024

Preiskomitee für den Lieselotte-Templeton-Preis:

<https://dkg-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-des-lieselotte-templeton-preises/>

Preisordnung:

<https://dkg-home.de/intern/statut-satzungen/satzung-fuer-den-lieselotte-templeton-preis/>

Bisherige Preisträger:

<https://dkg-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-des-lieselotte-templeton-preises/>



MATCH!

Phase Analysis using Powder Diffraction

Neue Version 4 bietet Profile Fitting Search-Match

Das neue "Profile Fitting Search-Match" wird durch Klick auf diesen Button gestartet.

Per Selektionskriterium wurden hier die zu prüfenden Kandidaten auf Zementmaterialien beschränkt.

Bei Verwendung des Profile Fitting Search-Match gibt es eine neue Spalte "Dj(Rwp)" in der Candidate List, in der die hypothetische Reduktion des Rwp-Werts durch Selektion dieser Phase angezeigt wird.

Zwei Phasen wurden bereits selektiert.

Match! führt gerade eine weitere "Profile Fitting Search-Match"-Rechnung auf 6 CPU Cores aus, um die dritte Phase zu bestimmen. Die Candidate List wird hierbei wiederholt aktualisiert.

Color	Qual.	Entry	Formula	Cryst.	Candidate phase	2theta shift	I scale fct.	I/c	Dj(Rwp)	FoM
C	96-120-0010	Al Ca2 Fe O5	O	Calcium iron(III) aluminate	-0.151	0.1812	2.26	-1.21	1.0000	
C	96-100-8725	Al Ca2 Fe O5	O	Iron(III) aluminum oxide b...	-0.075	0.1818	1.94	-0.67	0.5562	
C	96-500-0041	Ca O4 S	O	Calcium sulfate (Anhydrite)	-0.021	0.0346	1.63	-0.42	0.3510	
C	96-900-4097	Ca O4 S	O	Anhydrite	-0.023	0.0345	1.68	-0.41	0.3425	
C	96-100-0040	Al6 Ca9 O18	C	Calcium cyclo-hexaaluminate	-0.580	0.1988	3.22	-0.23	0.2724	

Running profile fitting search-match on all 6 CPU core(s)...

Das neue Profile Fitting Search-Match (PFSM) ist eine leistungsfähige Alternative zum klassischen, peak-basierten Search-Match, die insbesondere bei Phasen mit geringem Anteil von Vorteil ist: Für jedes zu prüfende Referenz-Diffraktogramm wird das Profil berechnet und an das experimentelle Profil angepasst. Erst dann werden die Güte der Übereinstimmung (Rwp-Wert → FoM) berechnet und die Kandidaten entsprechend sortiert. Hierfür wird **keine Peaksuche benötigt!**

Das **Update auf Version 4** ist bei gültiger Update-Berechtigung **kostenlos**. Eine **kostenlose Testversion** sowie weitere Informationen sind hier verfügbar:

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



**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>

AUF RUF ZU NOMINIERUNGEN
FÜR DEN
WALTRUDE UND FRIEDRICH LIEBAU-
PREIS ZUR FÖRDERUNG DER
INTERDISZIPLINARITÄT
DER KRISTALLOGRAPHIE 2025

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

Seit seiner Erstvergabe 2010 wurde der Preis fünfmal vergeben. Unter den Preisträgern finden sich sowohl Wissenschaftler verschiedener Fachrichtungen als auch bildende Künstler. Nach einer zweijährigen Pause wird der Interdisziplinaritätspreis in diesem Jahr wieder ausgelobt.

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

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

Vorschläge mit kurzer Begründung werden bis Samstag, den 30. November 2024, erbeten und sind per E-Mail bei den Mitgliedern der Preiskommission einzureichen:

Dr. Sebastian Bette
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
E-Mail: s.bette@fkf.mpg.de

Prof. Dr. Thorsten Gesing
Institut für Anorganische Chemie & Kristallographie der Universität Bremen
E-Mail: gesing@uni-bremen.de

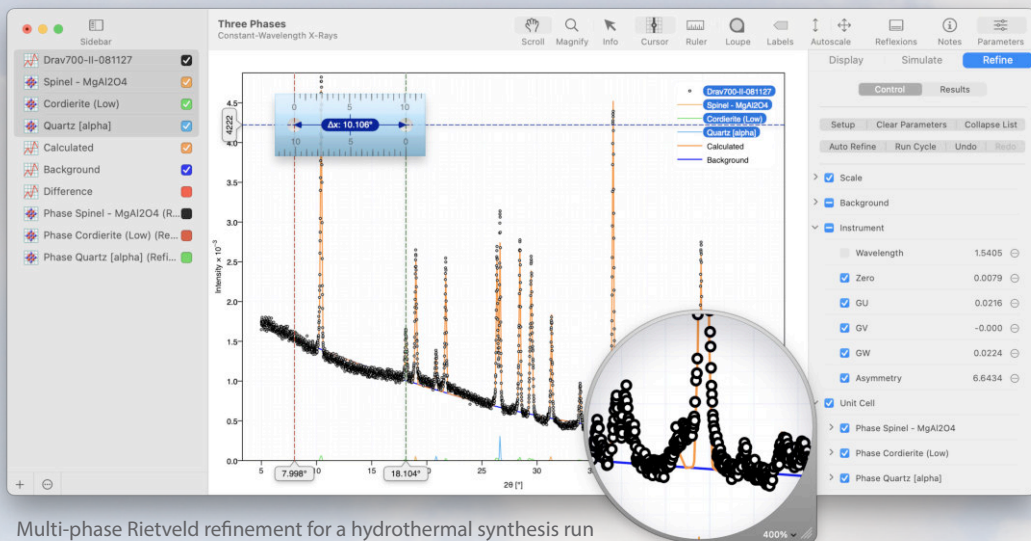
Prof. Dr. Ingrid Span
Bioanorganische Chemie an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
E-Mail: ingrid.span@fau.de

NEW
version 7

POWDER DIFFRACTION MADE EASY

CrystalDiffract[®] 7

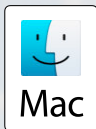
CrystalDiffract[®] 7 brings x-ray and neutron powder diffraction to your desktop for rapid characterization of experimental data. Simulate diffraction with real-time adjustment of sample and instrumental parameters; identify unknown materials with comprehensive (and subscription-free) Phase ID; and refine crystal structures quickly and easily, thanks to our unique high-performance Rietveld structure refinement.



Multi-phase Rietveld refinement for a hydrothermal synthesis run (as measured at GFZ Potsdam by Prof Vincent van Hinsberg)

Key Features in Version 7

- Quick, easy multi-phase Rietveld refinement
- Fully automated (with manual overrides)
- Automatic background subtraction
- Comprehensive Phase ID
- Real-time diffraction simulations
- Compare observed & simulated in same window
- Dynamic mixture control
- Simulate strain/size, preferred orientation, etc.
- Live diffraction updates with CrystalMaker
- Integrated structures library



We write
Native
Software



for the
Best User
Experience

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



TAGUNGEN UND TERMINE

September 2024

- 01.09. – 28.09.2024 **X-Ray and Neutron Science – International Student Summer Programme**
Grenoble, Frankreich
Kontakt: <https://workshops.ill.fr/event/406/page/541-overview-and-programme>
- 02.09. – 13.09.2024 **26th JCNS Laboratory Course Neutron Scattering**
Jülich und Garching
Kontakt: <https://www.fz-juelich.de/en/jcns/expertise/conferences-and-workshops/labcourse>
- 08.09. – 13.09.2024 **13th International Conference on Inelastic X-ray Scattering (IXS2024)**
Himeji, Japan
Kontakt: <http://ixs2024.jasri.jp>
- 16.09. – 20.09.2024 **Small Angle Neutron and X-ray Scattering from biomolecules in solution – EMBO practical course**
Grenoble, Frankreich
Kontakt: <https://meetings.embo.org/event/24-sax>
- 16.09. – 18.09.2024 **Stanford-SLAC Cryo-EM Center (S2C2) Single-Particle Cryo-Electron Microscopy Image Processing Workshop**
Stanford, CA, USA
Kontakt: <https://s2c2.slac.stanford.edu/events/2024-05-30-single-particle-cryo-electron-microscopy-cryo-em-image-processing-workshop>
- 16.09. – 20.09.2024 **Struktura 2024**
Loučná nad Desnou, Tschechische Republik
Kontakt: <https://www.xray.cz/xray/csca/kol2024/default.htm>
- 16.09. – 20.09.2024 **Sommerschule „Kristallographie“ 2024**
Warendorf
Kontakt: <https://www.tu-braunschweig.de/taac/zentrale-einrichtungen/roentgenstrukturanalyse/sommerschule-kristallographie>
- 20.09. – 22.09.2024 **VI LACA School: Quantum Crystallography**
Montevideo, Uruguay
Kontakt: <https://www.laca2024.pedeciba.edu.uy/satellite-events>

- 22.09. – 25.09.2024 **SMARTER-8**
Aveiro, Portugal
Kontakt: <https://smarter8.events.chemistry.pt>
- 22.09. – 27.09.2024 **SSRL and LCLS Annual Users' Meeting**
Stanford, CA, USA
Kontakt: <https://web.cvent.com/event/8c2bdf8d-08a1-41c5-b24e-390d039d9be2>
- 23.09. – 27.09.2024 **Fall 2024 Tomography and Cryo-FIB Workshop**
Madison, WI, USA
Kontakt: <https://explore.wisc.edu/LP=2218>
- 23.09. – 27.09.2024 **Single particle cryo-EM course for beginners**
Leeds, Großbritannien
Kontakt: <https://astbury.leeds.ac.uk/facilities/wellcome-mrc-training-in-cryoem/single-particle-cryo-em-course-for-beginners>
- 23.09. – 26.09.2024 **VI Latin American Crystallographic Association Meeting**
Montevideo, Uruguay
Kontakt: <https://www.laca2024.pedeciba.edu.uy/inicio>
- 25.09. – 28.09.2024 **IUCr High Pressure Workshop**
Lund, Schweden
Kontakt: www.iucr-hpw2024.org
- 30.09. – 02.10.2024 **11th Meeting of the Young Crystallographers at Rigaku**
Neu-Isenburg
Kontakt: <https://rigaku.com/products/crystallography/young-crystallographers-meeting-2024>

Oktober 2024

- 08.10.2024 **CCDC Virtual Workshop: First Steps in Protein-Ligand Docking With GOLD**
Online
Kontakt: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/events/virtual-workshops/ccdc-virtual-workshop-first-steps-in-protein-ligand-docking-with-gold>

- 14.10. – 18.10.2024 **Wellcome-MRC Cryo-ET Sample Preparation Workshop 2024**
Didcot, Großbritannien
Kontakt: <https://www.diamond.ac.uk/Instruments/Biological-Cryo-Imaging/eBIC/Training/Courses-and-workshops/2024-EventsCW/Wellcome-MRC-Cryo-ET-Sample-Prep-Workshop-2024.html>
- 16.10. – 17.10.2024 **7th cryoNET Symposium**
Aarhus, Dänemark
Kontakt: <https://events.au.dk/cryonetsymposium2024>
- 20.10. – 25.10.2024 **6th International Symposium on Halogen Bonding (ISXB6)**
Dubrovnik, Kroatien
Kontakt: <https://isxb6.hkd.hr>
- 22.10.2024 **CCDC Virtual Workshop: ConQuest to Mercury – From Searching to Data Analysis**
Online
Kontakt: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/events/virtual-workshops/ccdc-virtual-workshop-conquest-to-mercury-from-searching-to-data-analysis/>

November 2024

- 03.11. – 08.11.2024 **SAS2024 (The XIX Edition of the International Small-Angle Scattering Conference)**
Taipei, Taiwan
Kontakt: <https://www.sas2024.tw/site/page.aspx?pid=901&sid=1535&lang=en>
- 04.11. – 05.11.2024 **3rd SMX Workshop – MX at Sirius**
São Paulo, Brasilien
Kontakt: <https://sites.usp.br/wfs>
- 04.11. – 08.11.2024 **CCP-EM/Diamond Icknield Workshop**
Harwell, Großbritannien
Kontakt: <https://web.cvent.com/event/f2f3f4f9-f5e3-4aaf-83f2-8d79372e37e0/summary>
- 05.11.2024 **CCDC Virtual Workshop: Introduction to Pharmacophore Searching Using CSD-CrossMiner**
Online
Kontakt: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/community/events/virtual-workshops/ccdc-virtual-workshop-introduction-to-pharmacophore-searching-using-csd-crossminer>

- 08.11. – 10.11.2024 **Japanese Crystallographic Association Annual Meeting**
Nagoya, Japan
Kontakt: <https://musr.nagoya-u.ac.jp/CrSJ2024>
- 10.11. – 15.11.2024 **Sagamore XX Conference on Quantum Crystallography**
Delhi, Indien
Kontakt: <https://www.snu.edu.in/conferences/Sagamore2024>
- 11.11. – 12.11.2024 **ARC CCEMMP Research Symposium 2024: Cryo-EM and membrane proteins**
Melbourne, Australien
Kontakt: <https://ccemmp.org/events/arc-ccemmp-research-symposium-2024>
- 12.11. – 13.11.2024 **7th Austrian cryoEM Symposium**
Wien, Österreich
Kontakt: <https://www.imp.ac.at/research/cryo-em-symposium>
- 24.11. – 30.11.2024 **2024 International Workshop on Magnetic Crystallography**
Dongguan, Guangdong, China
Kontakt: <http://iwmc2024.ihep.ac.cn/index.html>

Dezember 2024

- 01.12. – 06.12.2024 **AsCA 2024**
Selangor, Malaysia
Kontakt: <https://www.asca2024.com>
- 02.12. – 09.12.2024 **IUCr-Unesco-Rigaku LACA OpenLab 2024**
São Carlos, Brasilien
Kontakt: <https://www.ifsc.usp.br/lamucre/asssets/pages/openlab2024.php>

Januar 2025

- 28.01. – 30.01.2025 **10th International Congress on Electron Tomography – TOMO10**
Melbourne, Australia
Kontakt: <https://www.electron-tomography.org>

Februar 2025

- 04.02. – 07.02.2025 **In-situ structural biology: Expanding the toolbox for structural cell biology**
Heidelberg
Kontakt: <https://www.embl.org/about/info/course-and-conference-office/events/iss25-01>

März 2025

- 10.03. – 13.03.2025 **33rd Annual Meeting of the German Crystallographic Society**
Hannover
Kontakt: <https://dgg-conference.de>
- 16.03. – 21.03.2025 **DPG-Frühjahrstagung der Sektion Kondensierte Materie**
Regensburg
Kontakt: <https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2025/dpg-fruehjahrstagung-regensburg>

Mai 2025

- 11.05. – 15.05.2025 **EMAS 2025 – 18th European Workshop on Modern Developments and Applications in Microbeam Analysis**
Mataro, Spanien
Kontakt: <https://www.microbeamanalysis.eu/events/event/85-emas-2025-18th-european-workshop-on-modern-developments-and-applications-in-microbeam-analysis>

hilgenberg

THE GLASS PROFESSIONALS

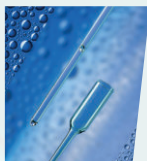
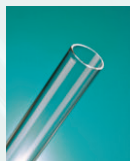
XRD-TUBES | MARK TUBES

We offer various standard Mark tubes for a wide range of applications. With an extremely thin wall thickness of only approx. 10 μm our Mark tubes are particularly suitable for high-precision measurements. Thanks to the wide funnel at the upper edge, samples can be easily filled into even the smallest diameter tubes.



In addition to our standard products, we position ourselves on the market with customized products. We are happy to manufacture your specific Mark tubes according to your specifications. Ask directly for your product configuration: info@hilgenberg-gmbh.de

In addition to our range of Mark tubes, discover our numerous accessories for their use.



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:

<https://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:

<https://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

<https://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

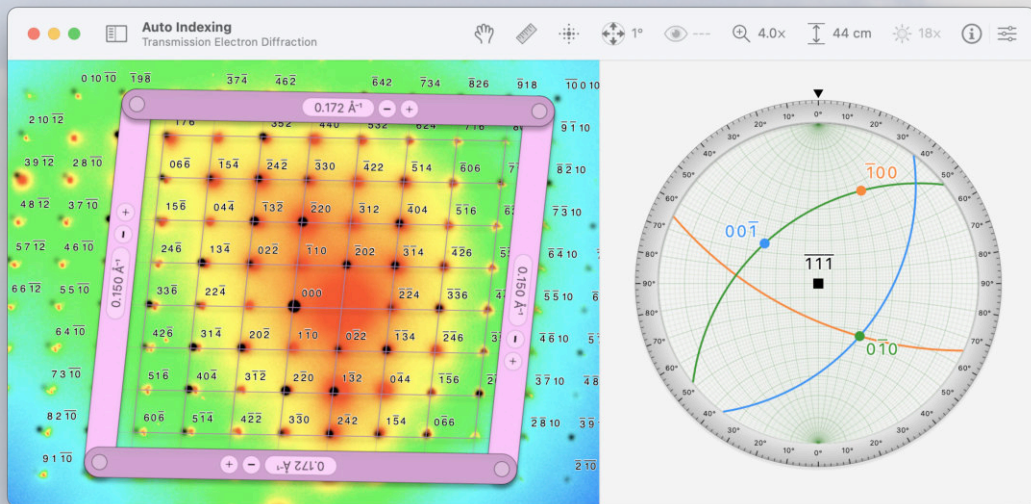
NEW
version 5.1

EXPLORE DIFFRACTION SPACE

TM

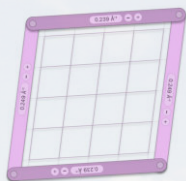
SingleCrystal

SingleCrystal 5 is the easiest way to understand diffraction properties of crystals. Simulate multi-phase X-ray, neutron and electron diffraction. Visualize reciprocal lattices, Brillouin zones, crystal shapes and stereographic projections. Create virtual diffraction experiments using Fast Fourier Transforms. Auto-index observed patterns with the Smart Grid tool: it's a must-have for all electron microscopists.

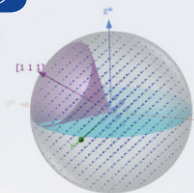


Auto-indexing an observed TEM pattern using the Smart Grid tool (left), with stereographic projection (right)

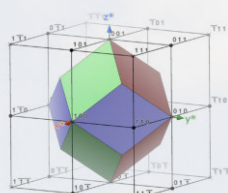
New in Version 5



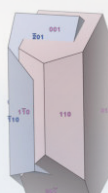
Smart Grid



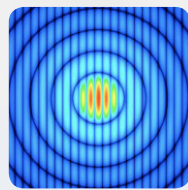
3D Visualization



Brillouin Zones



Crystal Shapes



Fourier Transforms



We write
Native
Software



for the
Best User
Experience

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • England

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



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 die
Vorsitzende der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. (DGK)
Prof. Dr. Ute Kolb

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 ²	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 ³	

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 Es wird davon ausgegangen, dass Mitglieder über 31 Jahre die Promotion beendet haben, sofern dies nicht anders angezeigt wird.

³ 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://dggk-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 22.12.2023 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 19. März 2024 beschlossen.

DATENSCHUTZERKLÄRUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE BEZÜGLICH PERSONENBEZOGENER MITGLIEDERDATEN

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

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

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

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

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

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