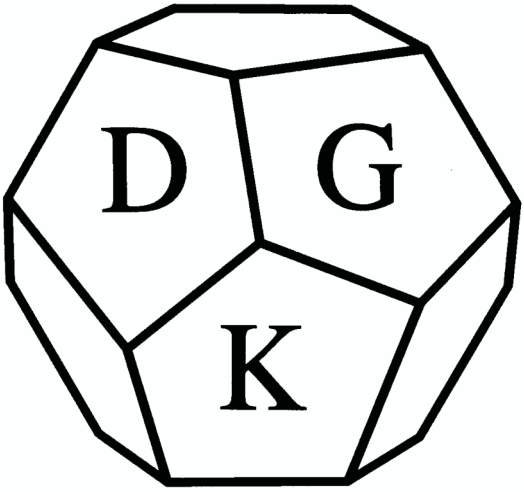
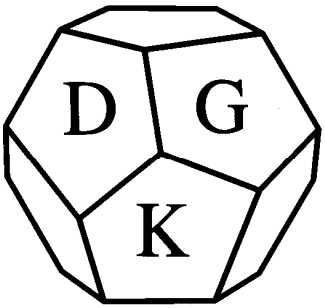
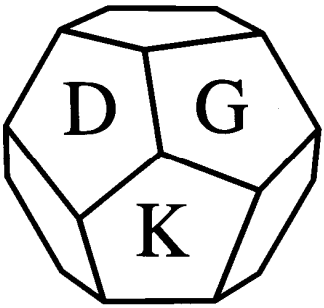


Deutsche Gesellschaft
für Kristallographie e.V.

Mitteilungen

Heft 55 Juli 2025


D
G
K



Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben (verantwortlicher Redakteur: Prof. Dirk C. Meyer, Freiberg). Sie erscheinen zur Zeit jährlich. 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 SE, Crystal Impact GbR, CrystalMaker 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
E-Mail: *schleid@iac.uni-stuttgart.de*

Schriftführer: Dr. Daniel M. Többens
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin
Tel.: 030 8062 43296
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
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
E-Mail: *schreuer@ruhr-uni-bochum.de*

Vertreterin der DPG: Prof. Dr. Susan Schorr
Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
& Freie Universität Berlin, Arbeitsbereich Mineralogie-Petrologie
Hahn-Meitner-Platz 1, 14109 Berlin
Tel.: 030 8062 42317
E-Mail: *susan.schorr@helmholtz-berlin.de*

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

mit unserem Jahresheft blicken wir sowohl auf die vielfältigen Aktivitäten unserer Gesellschaft zurück als auch auf unsere zukünftigen Vorhaben voraus.

Ganz vorne steht natürlich die 33. Jahrestagung, die in Hannover vom 10. bis 13. März 2025 mit über 330 Teilnehmenden und 46 Ausstellern stattfand. Mit sechs exzellenten Plenarvorträgen und zahlreichen Mikrosymposien bot die Tagung ein inspirierendes Forum für den wissenschaftlichen Austausch. Schon zum dritten Mal waren wir in Hannover willkommener Gast und danken Prof. Claus Rüscher und seinem Team für die hervorragende Organisation.

Bereits jetzt freue ich mich auf die 34. DGK-Jahrestagung, die vom 25. bis 28. Februar 2025 in der historischen Hansestadt Lübeck unter der Organisation von Prof. Lars Redecke und seinem Team stattfinden wird. Für 2027 planen wir eine gemeinsame Tagung mit der Polnischen Gesellschaft für Kristallographie in Dresden. Diese Kooperation knüpft an die erfolgreiche gemeinsame Tagung 2020 in Breslau an und unterstreicht die gewachsene Zusammenarbeit zwischen unseren beiden Gesellschaften. Dresden als traditionsreicher Wissenschaftsstandort bietet ideale Voraussetzungen für einen fruchtbaren wissenschaftlichen Austausch über Ländergrenzen hinweg.

Fachtagungen als Foren zu einem intensiven, persönlichen Austausch sind für unsere wissenschaftliche Arbeit unerlässlich. Daher fördert die DGK die Teilnahme junger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler am *35. European Crystallographic Meeting* (ECM35) vom 25. bis 29. August 2025 in Poznań/Lviv mit fünf Reisestipendien. Bereits im Juni konnten wir zwei Stipendien für die *10. European Crystallography School* vom 22. bis 29. Juni 2025 in Ohrid, Nordmazedonien, vergeben. Erstmals fördern wir auch zwei Teilnahmen an der *International School on Electron Crystallography* bzw. *Quantum Crystallography* vom 30. Mai bis 7. Juni 2025 in Erice, Italien. Die *11. European Crystallography School* (ECS11) ist für 2026 in Stockholm geplant. Das *36. European Crystallographic Meeting* (ECM36) findet im August 2027 in Prag, Tschechien statt. Der *27. Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography* wird vom 11. bis 18. August 2026 in Calgary, Kanada abgehalten. Wir freuen uns auf einen intensiven internationalen wissenschaftlichen Austausch und werden dort aktiv für den 28. IUCr-Kongress in Berlin vom 18. bis 25. August 2029 werben.

Ich lade Sie herzlich ein, sich weiterhin aktiv in unsere Gesellschaft einzubringen – durch wissenschaftliche Beiträge, Nominierungen für unsere Preise oder die Mitarbeit in den Arbeitskreisen – und freue mich, Sie auf den kommenden Veranstaltungen zu treffen. Nur so können wir eine lebendige Kristallographie in Deutschland und international ermöglichen.

Ihre Ute Kolb
(DGK-Vorsitzende)

INHALTSVERZEICHNIS

Impressum 3

Vorstand der DGK 4

Vorwort 5

Inhaltsverzeichnis 6

Redaktionelle Beiträge:

Protokoll zur Mitgliederversammlung der DGK am 11.03.2025 9

Anlage zu Punkt 6.4: Bericht des Schatzmeisters 15

Rückblick auf die 33. Jahrestagung der DGK 18

Berichte vom 34. European Crystallographic Meeting in Padua 23

Bericht über die 60. International School of Crystallography in Erice 30

Berichte zum 61st Course of Quantum Crystallography in Erice 34

Die Arbeitskreise der DGK berichten:

Bericht des AK1 „Junge Kristallographen“ / „Young Crystallographers“ 41

Bericht zum Rietveld and Pair Distribution Function (PDF) Analysis Workshop 45

Bericht des AK3 „Experimentelle Methoden“ 48

Bericht des AK4 „Theoretische Methoden“ 50

Impressionen von der Jahrestagung aus Sicht des AK5 „Biomolekulare Kristallographie“ 52

Bericht des AK6 „Chemische Kristallographie“ 55

Bericht des AK7 „Physikalische Kristallographie“ 58

Bericht des AK8 „Mineralogische Kristallographie“ 60

Bericht des AK9 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“ 62

Personalia:

Jubilare 2025 67

Verstorbene Mitglieder 69

Lieselotte-Templeton-Preise 2025 70

Max-von-Laue-Preis 2025 an Nicholas Pearce 76

Will-Kleber-Gedenkmünze 2025 an Regine Herbst-Irmer 79

Carl-Hermann-Medaille 2025 an Udo Heinemann 81

Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis 2025 an Maja Klevanski 85
Achim Kleebe 91
George Sheldrick 93
Ekhard Salje 95
Horst Küppers 99

Ankündigungen:

34th Annual Meeting of the DGK 105
Aufruf zur Mitwirkung in den Preiskomitees 106
Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2026 107
Aufruf zu Nominierungen für die Will-Kleber-Gedenkmünze 2026 108
Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2026 109
Aufruf zu Nominierungen für den Lieselotte-Templeton-Preis 2026 110
Tagungen und Termine 111

Homepages von DGK, DMG und DGKK 115
Aufnahmeformular 117
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 119
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie bezüglich personenbezogener Mitgliederdaten 120

PROTOKOLL ZUR

MITGLIEDERVERSAMMLUNG DER DEUTSCHEN GESELLSCHAFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE E. V.

AM 11.03.2025, VON 18:15 BIS 19:45 UHR

IM RAUM E001 DES HAUPTGEBÄUDES
DER LEIBNIZ UNIVERSITÄT HANNOVER

1 Begrüßung der Teilnehmer

Die Vorsitzende, Ute Kolb, eröffnet die Sitzung um 18:20 Uhr.

2 Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird durch eine Zählung der Teilnehmer festgestellt. In die Teilnehmerliste haben sich 57 Mitglieder eingetragen. Nach §9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; bei derzeit 963 persönlichen Mitgliedern ist dieses Quorum bei 49 Anwesenden erreicht.

3 Annahme der Tagesordnung

In Abänderung der versandten Tagesordnung wird der Tagesordnungspunkt 6.5 „Bericht der Kassenprüfer“ nach hinten, vor die Entlastung des Vorstands, verschoben und ist dann TOP 6.11. Ein zusätzlicher Tagesordnungspunkt „Abstimmung zur Umbenennung des Arbeitskreis 5“ wird als TOP 9.5 ergänzt.

4 Genehmigung des Protokolls

Das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 19.03.2024 wird, wie in Heft 54 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 der Vorsitzenden

Ute Kolb dankt Claus Rüscher und dem lokalen Organisationskomitee für die Vorbereitung der DGK-Jahrestagung.

Für 2024 konnte die Erstattung des IUCr-Mitgliedsbeitrags durch die DFG eingeworben werden. Der Antrag zur Übernahme des Beitrags für das Jahr 2025 durch die DFG wird eingereicht, sobald der Bericht der IUCr 2023 vorliegt.

Die DFG hat um Vorschläge zur Verbesserung der Fächerstruktur gebeten. In Absprache mit dem Vorstand wird um die Wiedereinsetzung des Fachs Kristallographie gebeten. Wir erhoffen, dass damit dedizierte Forschungsanträge im Bereich der Kristallographie besser platziert werden können. Es wird klargestellt, dass es hierbei nicht um die Wiederherstellung des früheren Fachs „Mineralogie, Petrologie, Kristallographie“ geht, sondern um ein eigenständiges Fach „Kristallographie“.

6.2 Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Norbert Sträter berichtet: Das Nationalkomitee hat den Antrag von Thomas Doert auf finanzielle Unterstützung der „International School on Aperiodic Crystals“ als *Satellite Meeting* der ECM-35 durch die IUCr mit einem von der IUCr in solchen Fällen verlangten Schreiben unterstützt. Auf dem *ECA Council Meeting* wurde das Nationalkomitee durch Tatiana Gorelik vertreten.

Die Zusammensetzung des *ECA Executive Committee* für die Amtsperiode 2024–2027 ist:

- *President* – Arie van der Lee (Université de Montpellier, Frankreich)
- *Vice President* – Jan Dohnálek (Academy of Sciences of the Czech Republic)
- *Treasurer* – Antonia Neels (EMPA, Switzerland)
- *Secretary* – Andy Maloney (Cambridge Crystallographic Data Centre, UK)
- *Education Coordinator* – María José Sánchez-Barrena (Instituto de Química Física “Blas Cabrera”, Spanien)
- *Officer* – Klaudia Hradil (Technische Universität Wien, Österreich)
- *Officer* – Chiara Massera (Universität Parma, Italien)
- *Officer* – Katarzyna Jarzembska (Universität Warschau, Polen)
- *Officer* – Andrea Ienco (ICCOM – CNR, Italien)

Bevorstehende und geplante Veranstaltungen sind:

- ECM35 (2025) Poznan/Lviv, Polen/Ukraine – Roman Gladyshevskii (Lviv), Grygoriy Dmytriv (Lviv), Maciej Kubicki (Poznan). Die Organisation ist schwieriger als gewöhnlich, da das Organisationskomitee in zwei Ländern sitzt, von denen sich eines im Kriegszustand befindet, geht aber voran.
- ECM36 (2027) Prag, Tschechische Republik – Radek Kuzel
- ECM37 (2028) Athen, Griechenland – Kostas Bethanis
- ECS10 (22.–29.06.2025) Ohrid, Nordmazedonien – Panče Naumov
- ECS11 (21.–27.06.2026) Stockholm, Schweden – Ken Inge

Die Beiträge für individuelle Mitglieder der ECA wurden erhöht und betragen jetzt 25 € für ein Jahr und 100 € für fünf Jahre. Der reduzierte Mitgliedsbeitrag beträgt 10 € pro Jahr.

6.3 Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet: Die DGK hat derzeit 975 Mitglieder, davon 218 Frauen, 746 Männer und 11 unpersönliche Mitglieder. Insgesamt 26 Eintritten stehen 27 Abgänge gegenüber, davon 12 Todesfälle, 11 Austritte und 4 nachgetragene Austritte, deren früheres Austrittsschreiben nicht korrekt angekommen war. Obwohl dies ausgeglichen ist, weisen die Gesamtzahlen trotzdem eine signifikante Reduktion gegenüber 2024 auf. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Mitgliederliste von Einträgen gesäubert wurde, die seit längerem mit ihren Beiträgen rückständig sind und auch nicht kontaktiert werden konnten. Eine weitere Korrektur in ähnlicher Höhe ist für das laufende Jahr absehbar, danach aber vorerst nicht mehr.

6.4 Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann berichtet; die Finanzaufstellung ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Der bisherige Plan zur Gründung einer GmbH für die Organisation der IUCr 2029 zur Begrenzung des finanziellen Risikos wurde aufgehoben; der Durchführungsvertrag mit Conventus wird eine Übernahme des Risikos durch Conventus enthalten.

6.6 Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

Jürgen Schreuer ist aufgrund dringender Privatangelegenheiten abwesend. Ute Kolb trägt für ihn vor:

Die Mitgliederzahl der Deutschen Gesellschaft für Mineralogie ist mit etwa 1200 Mitgliedern stabil. Trotzdem forciert die DMG insbesondere die Öffentlichkeitsarbeit und die Förderung der Jungen Mineralogen. Insbesondere der Mineralogische Lehrkoffer hat sich bei der Darstellung nach Außen als Erfolg gezeigt. Allerdings sind der Übernahme der DMG-Strategie durch die DGK Grenzen gesetzt; die DMG hat einen deutlich höheren finanziellen Umsatz von etwa 400.000 Euro pro Jahr.

Die DMG hat eine Aufarbeitung der Geschichte der Gesellschaft in der NS-Zeit durch einen unabhängigen Historiker in Auftrag gegeben. An dieser Stelle wird angemerkt, dass diese Frage sich für die DGK nicht stellt, da unsere Gesellschaft erst deutlich später gegründet wurde. Allerdings waren zwei Namensgeber der von uns vergebenen Preise, Carl Hermann und Will Kleber, zu dieser Zeit aktiv. Ob und gegebenenfalls wie hier eine Überprüfung sinnvoll ist, soll auf der nächsten Sitzung des Vorstands diskutiert werden.

6.7 Bericht des Vertreters der DPG im Vorstand

Der Vorstand hat in Absprache mit David Rafaja und Susan Schorr beschlossen, Susan Schorr als Vertreterin der DGK in der Deutschen Physikalischen Gesellschaft zu benennen. Der wechselseitige Vertreter der DPG im Vorstand der DGK wurde zwar bisher in der Regel in Personalunion besetzt, wird aber von der DPG entschieden. Susan Schorr und David Rafaia werden den zuständigen Gremien der DPG vorschlagen, auch ihrerseits Susan Schorr zu benennen.

6.8 Bericht des Kontaktes zur GDCh

Leider konnte in diesem Jahr kein Vernetzungstreffen im Anschluss an die Tagung organisiert werden. Für die kommenden Jahre ist dies aber geplant.

6.9 Bericht des Redakteurs der DGK-Mitteilungen &
6.10 Bericht des Redakteurs der Homepage

Diese beiden Tagesordnungspunkte entfallen, da in TOP 10 ausgiebig über die Publikationsorgane der DGK diskutiert wird.

6.11 Bericht der Kassenprüfer

Der Bericht der Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Ullrich Pietsch liegt schriftlich vor:

Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2024 wurde von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) und Ullrich Pietsch (Universität Siegen) am 25. Februar 2025 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 2024 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

7 Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird einstimmig, ohne Enthaltungen entlastet.

8 Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Es stehen drei Kandidaten als Kassenprüfer zu Verfügung. Eine geheime Wahl wird nicht beantragt; es wird offen abgestimmt: Alexandra Friedrich erhält 50 Stimmen, Ullrich Pietsch 15 Stimmen, Roman Fedorov 36 Stimmen. Damit sind Alexandra Friedrich und Roman Fedorov zu den Kassenprüfern gewählt. Der Vorstand dankt Ullrich Pietsch für seinen jahrelangen Einsatz in diesem Amt.

9 Beschluss der Beitragsordnung

Die Beitragsordnung bleibt unverändert so, wie sie auf der Mitgliederversammlung 2024 beschlossen wurde:

A	Ordentliche Mitglieder	45 €
B	Studentische Mitglieder	15 €
D	Doktoranden [1]	15 € auf Antrag
E	Stellungslose Mitglieder	15 € auf Antrag
F	Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand [2]	20 € auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder [3]	nach Vereinbarung mit dem Vorstand

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

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

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

Diese Beitragsordnung wird einstimmig, ohne Enthaltungen angenommen.

9.5 Abstimmung zur Umbenennung des Arbeitskreises 5

Der Arbeitskreis 5 „Biologische Kristallographie“ beantragt eine Umbenennung in „Biomolekulare Kristallographie“, da dieser Begriff in der relevanten Community höhere Akzeptanz genießt. Im Vorfeld wurde das Thema intensiv im Arbeitskreis und im Beirat diskutiert. Der Antrag wird ohne Gegenstimmen, mit 10 Enthaltungen angenommen.

10 Mitteilungen der DGK – zukünftige Erscheinungsform und Besetzung der Redaktion

Die „Mitteilungen“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie wurden in den letzten Jahren von einem an der TU Bergakademie Freiberg beheimateten Team erstellt: Prof. Dr. Dirk C. Meyer (Organisator), Dr. Hartmut Stöcker (Redakteur), Dr. Tilmann Leisegang (Werbeanzeigen) und Dr. Melanie Nentwich (DESY, ehemals TU Freiberg, Veranstaltungskalender). Die aktuelle Redaktion möchte aber demnächst diese Aufgabe abgeben. Es werden neue RedakteurInnen gesucht! Hinzu kommt, dass auch die Druckerei, die bislang Druck und Versand durchführte, ihren Betrieb einstellen wird. Dies führt direkt zu der Überlegung, ob im Zuge der Neuorganisation die Umstellung auf eine Onlinepublikation erfolgen sollte und ob dies im Rahmen der bestehenden Webseite umzusetzen sei. In der folgenden lebhaften Diskussion äußerten die Mitglieder reges Interesse an einem Erhalt der „Mitteilungen“ und auch an der Beibehaltung der gedruckten Erscheinungsform. Es wurde eine Kommission berufen, die sich der Sachen annehmen wird. Mitglieder dieser Kommission sind: Hartmut Stöcker, Ute Kolb, Michael Fischer, Florian Meurer, Susan Schorrr, Manfred Weiss, Elisabeth Fetter und Tilmann Leisegang; weitere Interessierte können hinzugezogen werden. Es wurde angemerkt, bei der Entscheidung über die zukünftige Erscheinungsform sollten die Vorstellungen der angedachten neuen Redakteure besonders berücksichtig werden, aber letztendlich sollte dies durch die Mitgliederversammlung entschieden werden.

11 IUCr-Konferenz 2029 in Berlin

Der 28. IUCr-Kongress 2029 wird von der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie ausgerichtet. Die Tagung wird in Berlin stattfinden, in der Zeit vom 18. bis 25. August 2029. Tagungsort wird das *Estrel Hotel and Estrel Congress Center Berlin* sein; der Vertrag mit dem Hotel steht. Für die Durchführung wird die Firma Conventus beauftragt, mit der sowohl die DGK als auch das Estrel schon früher zusammengearbeitet haben. Der Vertrag mit Conventus schützt die DGK vor einem finanziellen Risiko, begrenzt aber auch den möglichen Profit. Manfred Weiss stellt den aktuellen Stand der Planungen, das Planungskomitee und die weiteren Schritte vor.

12 Aufruf zu Kandidaturen für Wahlen und Neubesetzungen in 2026

Auf der Mitgliederversammlung 2026 werden Wahlen zu den Komitees für die Vergabe der Will-Kleber-Gedenkmünze, der Carl-Hermann-Medaille und des Lieselotte-Templeton-Preises stattfinden. Die Mitglieder werden gebeten, sich zu überlegen, ob sie kandidieren wollen. Weiterhin muss das Nationalkomitee der IUCr Kandidaten für Nominierungen zu den Fachkommissionen & Co-Editoren der IUCr-Journale vorschlagen. Bei Interesse wenden Sie sich an den Vorsitzenden des Nationalkomitees, Prof. Dr. Norbert Sträter.

13 Sonstiges

Die DGK schreibt Reisestipendien für Studierende oder Promovierende aus, für die noch bis zum 23. Mai eine Bewerbung möglich ist. Konkret sind dies zwei Stipendien à 400 € zur ECS10 in Nordmazedonien, 22.–29. Juni 2025, sowie 5 Stipendien à 400 € zur ECM35 in Posen, Polen, 25.–29. August 2025. Diese Stipendien wurden auch online und per Rundmail ausgeschrieben und sind nicht auf Mitglieder der DGK beschränkt.

14 Jahrestagung 2027 in Dresden

Die 35. DGK-Jahrestagung wird in Dresden stattfinden. Tagungsleiter ist Prof. Dr. Thomas Doert, Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie der Technischen Universität Dresden. Als Tagungsort wurde das Dresdner Hochschulzentrum auf dem Campus der Technischen Universität ins Auge gefasst. Diese Tagung soll als gemeinsame Tagung mit der Polnischen Kristallographischen Gesellschaft durchgeführt werden.

15 Jahrestagung 2026 in Lübeck

Die 34. Jahrestagung wird in der Zeit 25.–28. Februar 2026 in Lübeck stattfinden. Abweichend von der bisherigen Praxis ist dies von Mittwoch bis Samstag. Tagungsleiter ist Prof. Dr. Lars Redeke vom Institut für Biochemie der Universität Lübeck. Die Organisation wird in Zusammenarbeit mit Conventus durchgeführt. Die Tagung wird auf dem Universitätscampus stattfinden. Dieser liegt außerhalb der Stadt, es existiert aber eine direkte Busverbindung zur Innenstadt.

Die Sitzungsleiterin schließt die Sitzung um 19:33 Uhr.

Daniel M. Többens

Daniel Többens
(Schriftführer)

ANLAGE ZU PUNKT 6.4:

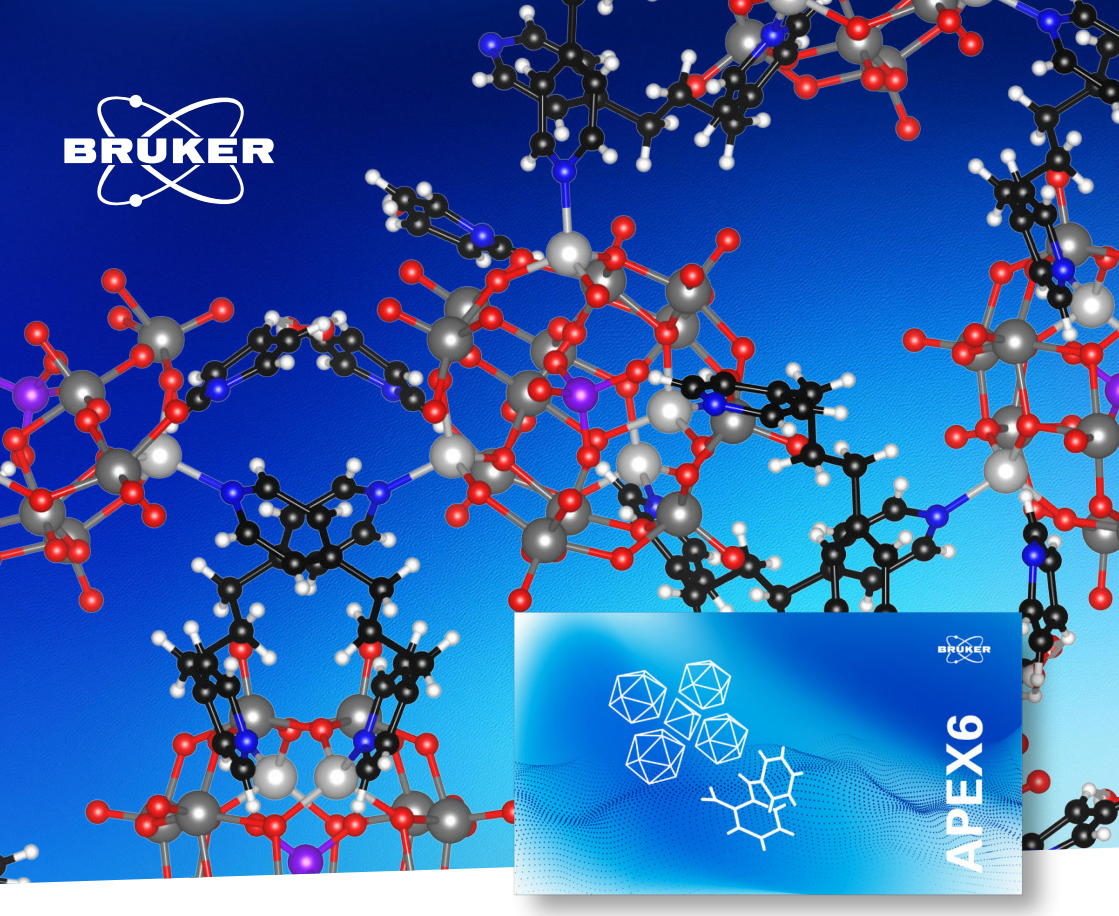
BERICHT DES SCHATZMEISTERS

Einnahmen-Überschussrechnung 2024 der DGK			
Einnahmen 2024			
Mitgliedsbeiträge inkl. Laue-/Liebau-Preisgeld-Spenden	Bankeinzug 2024	21.350,00 €	23.554,90 €
	Barzahler 2024	1.200,00 €	
	Entnahme Dauermitglieder	219,90 €	
	Spenden	420,00 €	
	Beiträge rückwirkend	365,00 €	
Zinsen	Laue-Kapital	180,25 €	271,24 €
	weitere Sparkonten	90,99 €	
DFG-Zuschuss IUCr-Beitrag			10.694,00 €
Arbeitskreise	Einnahmen	540,00 €	540,00 €
	Rückzahlungen	0,00 €	
Anzeigen für Mitteilungen			4.300,00 €
Summe Einnahmen			**39.360,14 €**
Ausgaben 2024			
Mitteilungen			−7.875,50 €
Mitgliedsbeiträge	Erstattungen	0,00 €	−400,00 €
	Rücklastschriften	−400,00 €	
Administration	Bankgebühren	−292,40 €	−3.917,23 €
	Stornokosten	−11,02 €	
	Kapitalertragssteuer + Soli	−71,53 €	
	Büromaterial, Verwaltung	−1.035,34 €	
	Webseite	−506,94 €	
	IUCr2029	−2.000,00 €	
Verbände, Organisationen	IUCr-Beitrag 2023	−10.694,07 €	−22.388,14 €
	IUCr-Beitrag 2024	−10.694,07 €	
	ECA, BVMatW	−1.000,00 €	
Arbeitskreise	Förderung	−1.581,57 €	−8.269,94 €
	Ausgaben	−379,20 €	
Reisestipendien	IUCr26, ECM34 & ECS9	−3.700,00 €	
Laue-Preisgeld Ella Schmidt	Umbuchungen	0,00 €	
	Auszahlung	−1.500,00 €	
Lieselotte-Templeton-Preis	B. Ebel & L. Nusser	−1.109,17 €	
Summe Ausgaben			**−42.850,81 €**
Rücklagenkonto Dauermitglieder 2024			
Einnahmen	4 neue Dauermitglieder	480,00 €	480,00 €
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00 €	
Ausgaben	Einzahlung DGK 2024		−219,90 €
Überschuss 2024			**260,10 €**
Bilanz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2024			**−3.230,57 €**

Kontoführung 2024 der DGK			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Giro	1.177,02 €	1.392,85 €	215,83 €
Rücklage Dauermitglieder 910	2.268,73 €	2.528,83 €	260,10 €
Sonderkonto AK 1	2.676,93 €	2.837,73 €	160,80 €
Rücklage IUCr 2029	25.018,71 €	13.071,26 €	−11.947,45 €
DKG-Cash 085	15.525,79 €	23.040,24 €	7.514,45 €
Sparkasse	924,84 €	1.357,83 €	432,99 €
Laue-Kapital	60.083,20 €	60.215,91 €	132,71 €
Guthaben der DGK	**107.675,22 €**	**104.444,65 €**	**−3.230,57 €**

Jahresabrechnung 2024 Max-von-Laue-Preis			
Einnahmen 2024			
Zinsen	Laue-Kapital 930		180,25 €
Spenden			0,00 €
Summe Einnahmen			**180,25 €**
Ausgaben 2024			
Laue-Preis 2024	Preisgeld aus Mitgliedsbeiträgen		0,00 €
Kapitalertragssteuer + Soli			−47,54 €
Summe Ausgaben			**−47,54 €**
Bilanz Einnahmen und Ausgaben 2024			**132,71 €**
Kontoführung 2024			
Konto	**01.01.**	**31.12.**	**Änderung**
Laue-Kapital 930	60.083,20 €	60.215,91 €	132,71 €
Kapital der Stiftung	**60.083,20 €**	**60.215,91 €**	**132,71 €**

Christian Lehmann (Mülheim an der Ruhr)



SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

APEX - The Future of Crystallography

The Convenient, Efficient & Flexible Software Suite

- **Deep Learning-Based Crystal Centering**
  Achieve unparalleled convenience, accuracy and precision in crystal centering.
- **New Report Plugin**
  Create improved CIF files effortlessly, streamlining your reporting process.
- **New XRD Plugin**
  Simplify powder data collection and processing on your SC-XRD solution.

Boost your crystallography workflow. Packed with innovative features, APEX ensures you stay ahead in your research and analysis.

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

RÜCKBLICK AUF DIE 33. JAHRESTAGUNG DER DGK

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

im Nachgang der Tagung möchten wir, die Organisatoren der Tagung, uns bei den über 300 Teilnehmenden für ihre herausragenden Präsentationen und die offenen Diskussionsbeiträge bedanken. Wir waren bemüht, Ihnen dafür entsprechende Rahmenbedingungen zu geben und haben von allen Seiten viel positive Resonanz und Zuspruch erfahren, und bedanken uns auch dafür.

Allerdings verlief die Eröffnungsveranstaltung anders als angedacht. Hier sollte Prof. Dr. Ekhard Salje (University of Cambridge, UK) für sein Lebenswerk und aufgrund seiner Verbundenheit zur Leibniz Universität Hannover, u. a. hier als erster Professor für Kristallographie (1976–1985) mit dem Ehrendoktor der Naturwissenschaftlichen Fakultät ausgezeichnet werden, gefolgt von seinem Vortrag zum Thema „Ferroelastic Minerals“. Aufgrund des überraschenden Todes von Herrn Salje am 24. Februar 2025 – unsere tiefe Anteilnahme gilt der Familie, Freunden und Kollegen von Herrn Salje – konnte diese Ehrung nicht durchgeführt werden. So wurde von Herrn Prof. Dr. Ulrich Bismayer (Universität Hamburg) statt der Ehren-Laudatio ein Nachruf zur Ehrung des Kollegen Salje gesprochen. Unser Dank gilt Herrn Bismayer für seine wundervollen und treffenden Worte in dieser Situation.

Insgesamt können wir aus dem Verlauf der Tagung resümieren, dass wir sicher gefühlt ein Fest der Wissenschaft verzeichnen dürfen. Die 6 ausgewählten Plenarvorträge waren einfach hervorragend und haben die Kristallographie in ihrer exzellenten Stellung zum Ausdruck gebracht. Dieses hervorragende Niveau, der innovative Charakter und diese Stellung wurde auch weiterhin offenbart in den 24 Mikrosymposien, verteilt über je 4 zeitlich parallel durchgeführte Fachsitzungen mit insgesamt 120 Vorträgen. Dazu gab es 110 Posterbeiträge, die zu zwei Schwerpunktzeiten diskutiert wurden. Umrahmt war die öffentlich im Lichthof des Welfenschlosses vorgestellte Posterpräsentation von einer Ausstellung 15 führender Unternehmen für analytische Methoden. Dabei war eine Versorgung der Teilnehmenden mit Snacks und Getränken nicht nur während der Pausen, sondern auch zu den Posterzeiten im Lichthof der LUH gegeben, mit einem „Come Together“ im Anschluss an den speziellen Ehrenabend der DGK. Zu erwähnen ist noch, dass von einer Jury die drei besten Poster ausgewählt wurden, die dann mit der von der Leibniz Universitätsgesellschaft Hannover e. V. gestifteten Preisen ausgezeichnet wurden. Die Auszeichnung fand während des mit ca. 200 Gästen gefüllten Hannover-typischen Brauerei-Gasthofes „Meyers Lebenslust“ statt.

Ausgezeichnet war auch, dass viele junge Teilnehmende dabei waren, die sich und ihre Forschung auch während der Tagung im Rahmen ihrer „Lightning Talks“ mit fünf-minütigen Vorträgen und anschließender Posterpräsentation vorstellen konnten.

Abschließend möchten wir unsere 6 Plenarsprecher namentlich erwähnen und ihnen unseren Dank aussprechen:

- Prof. Dr. Sandro Jahn (LMU München): „From crust to core – material properties of the deep Earth“
- Prof. Dr. Waltraud M. Kriven (University of Illinois Urbana-Champaign): „In situ, in air, high temperature synchrotron studies of ceramics“
- Prof. Dr. Andrew Goodwin (University of Oxford, UK): „Truchet-tile architectures in material chemistry“
- Prof. Dr. Joke Hadermann (University of Antwerp, Belgien): „Crystal structure evolution tracking using in situ 3D-ED and 4D-STEM“
- Prof. Dr. Ingrid Span (FAU Universität Erlangen-Nürnberg): „[FeFe] Hydrogenases: from structural insights into the mechanism to new applications in biotechnology“
- Prof. Dr. Dr. Clemens Richert (Universität Stuttgart): „Organic crystallization chaperones and studies on the origin of translation“

Für die Themenauswahl, die Abstract-Begutachtung und Durchführung der Fachsitzungen danken wir dem Programmkomitee. Schließlich danken wir einer Gruppe von Studierenden eines Master-Lehrmoduls (Kristallphysik und spektroskopische Mineralanalyse WS2024/25) und zwei HiWis für ihre tatkräftige Unterstützung während der Vorträge sowie beim Auf- und Abbau zusammen mit dem Team von Conventus.

Organisations-Team der 33. Jahrestagung der DGK an der LUH:

- Claus Rüscher, Institut für Erdsystemwissenschaften
- Yasar Krysiak, Institut für Anorganische Chemie
- Armin Feldhoff, Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie
- Jesko Köhnke, Institut für Lebensmittelchemie
- Hilke Petersen, Institut für Fertigungstechnik und Werkzeugmaschinen

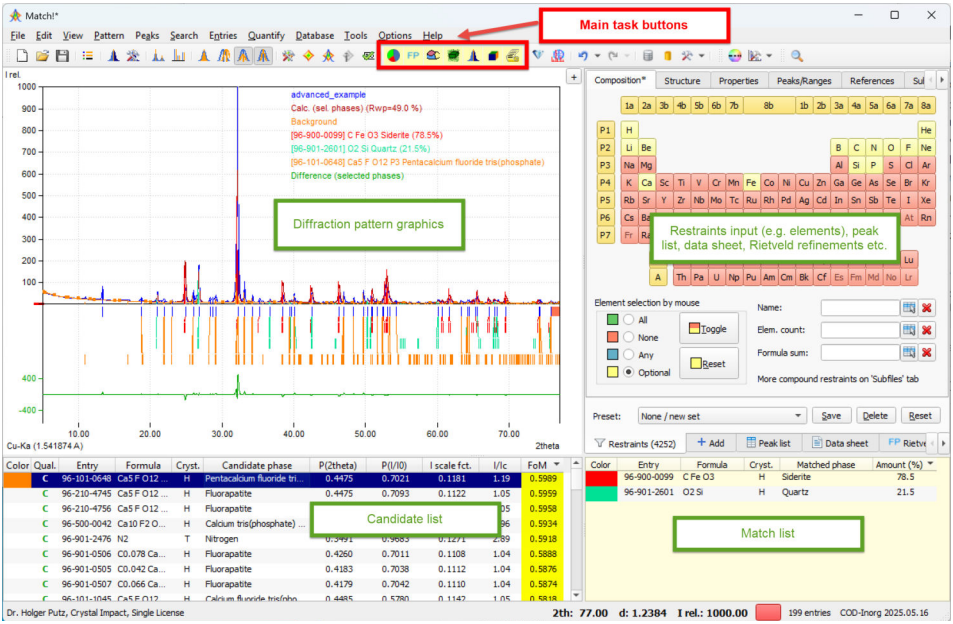
Posterausstellung im Lichthof, Welfenschloss, Hauptgebäude der LUH (oben) mit Firmenständen (mittig) und Kampfsport-Sebstverteidungs-Darbietung von F. Renz und Kollegen (LUH-Sport) während der 2. Postersession (unten)

Präsentübergabe an die Plenarvortragenden:
Prof. Dr. Sandro Jahn (oben links), Prof. Dr. Waltraud M. Kriven (oben rechts),
Prof. Dr. Andrew Goodwin (mittig links), Prof. Dr. Joke Hadermann (mittig rechts),
Prof. Dr. Ingrid Span (unten links), Prof. Dr. Dr. Clemens Richert (unten rechts)

MATCH!

Phase Analysis using Powder Diffraction

Neue Version 4.2 mit vereinfachter Bedienung



Mit der neuen Version wird die Benutzung von Match! noch einfacher: Über die gelb hinterlegten "Main task" Buttons am oberen Rand können die wichtigsten Analysen sehr einfach durchgeführt werden. Hierbei unterstützt Match! den Benutzer, indem es weitgehend automatisch arbeitet. Falls ein Schritt nicht automatisch ausgeführt werden kann (z.B. bei der Auswahl evtl. bereits bekannter Phasen und Elemente), wird der Benutzer detailliert angeleitet.

Das **Update auf Version 4.2** 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

Berichte vom 34. European Crystallographic Meeting in Padua

Manuel Schulze (TU Dresden)

Ende August 2024 fand das *34. European Crystallographic Meeting* (ECM34) in Padua, Italien statt. Die internationale Konferenz brachte mehr als 800 Forscherinnen und Forscher aus der ganzen Welt zusammen und bot ein spannendes und abwechslungsreiches Programm. Dank des Reisestipendiums der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie konnte ich an der Tagung teilnehmen und reiste dafür mit dem Zug von Dresden nach Padua.

Der Tagungsort, ein modernes Kongresszentrum am Rande der historischen Altstadt von Padua, erwies sich als sehr gute Location. Die Konferenz erstreckte sich über vier Etagen und die modernen Räumlichkeiten waren glücklicherweise klimatisiert – sehr angenehm bei den heißen Temperaturen, die zu dieser Zeit in Padua herrschten. Für die Verpflegung während der Pausen war bestens gesorgt: An mehreren Buffets wurden leckere lokale Speisen serviert und der jeweils frisch gebrühte Kaffee wurde sehr geschätzt.

Das wissenschaftliche Programm war vielfältig und deckte ein breites Themenspektrum ab. Es reichte von der Kristallchemie von Mineralen im Universum, über Quantenkristallographie und funktionelle Materialien bis hin zur Proteinkristallographie und den neuesten Entwicklungen kristallographischer Charakterisierungsmethoden. Darüber hinaus wurden auch zwischenmenschliche und wissenschaftssoziale Fragen thematisiert. Das dichte Programm mit drei parallelen Plenarvorträgen und sechs parallelen Mikrosymposien an fast jedem der fünf Tage bot zahlreiche Gelegenheiten, Einblicke in aktuelle Forschungsfragen zu gewinnen. Das Publikum zeigte sich durchweg interessiert und stellte aufmerksame Fragen.

Vorbereitungen für das Konferenzdinner auf der Piazza della Frutta

Eine zentrale Rolle spielten auch die Postersessions, in denen insgesamt über 600 Poster präsentiert wurden. Diese waren jeweils nur einen Tag lang zu sehen, was die Zeit für die Besichtigung etwas einschränkte. Einige Poster in abgelegeneren Bereichen wurden weniger besucht. Doch insgesamt trug die Vielfalt der Themen zu einem abwechslungsreichen Programm bei. Auch ich hatte die Gelegenheit, meine Forschungsergebnisse im Bereich intermetallischer Verbindungen mit speziellen magnetischen Eigenschaften zu präsentieren und mich mit Kolleginnen und Kollegen auszutauschen.

Für mich war die ECM34 die erste internationale Konferenz, aber dank der angebotenen sozialen Aktivitäten fiel es mir leicht, schnell Kontakte zu knüpfen. Besonders der Student-Mixer war eine gute Gelegenheit, sich mit anderen Nachwuchswissenschaftlern auszutauschen. Außerdem gab es ein Konferenz-Konzert und eine öffentliche Vorlesung. Ein Highlight war der *Science Slam*, bei dem Bill Clegg das Publikum mit seinem musikalischen Beitrag begeisterte und den ersten Platz belegte.

Das soziale Rahmenprogramm wurde durch ein Konferenzdinner in der Altstadt von Padua abgerundet. Auf der von historischen Gebäuden umgebenen *Piazza della Frutta*, die eigens für die Konferenz reserviert war, genossen wir lokale Spezialitäten und verbrachten einen entspannten Abend in malerischer Umgebung.

Auch abseits der Konferenz bot die Altstadt von Padua viele Möglichkeiten zum *Sightseeing*. Abendliche Spaziergänge durch die verwinkelten Gassen führten an Sehenswürdigkeiten wie der *Università degli Studi di Padova*, einer der ältesten Universitäten Europas, vorbei.

Zusammenfassend war die ECM34 eine gelungene Konferenz in einer wunderschönen Stadt. Der wissenschaftliche Austausch war spannend und vielseitig, und das soziale Rahmenprogramm bot viele Möglichkeiten, um Kontakte zu knüpfen und sich auch außerhalb der Vorträge auszutauschen. Ich werde die ECM34 in Padua in sehr guter Erinnerung behalten.

Eröffnungsvortrag der ECM34 (links) und Austausch während der Mittagspause (rechts)

FLORIAN MEURER (UNIVERSITÄT REGENSBURG)

Für mich begann die Zeit in Padova schon ein paar Tage vor dem Europäischen Kristallographischen Kongress, da ich vorab die 24. Schule für Elektronendiffraktion besuchen durfte. Dort hatte ich die einzigartige Möglichkeit, die aufstrebende und nun hoffentlich endgültig benannte Technik der 3D-ED kennenzulernen. Ebenso konnte ich dort mit einem Poster zu meiner Software zum seriellen Verfeinern in Olex2 Feedback erhalten und einschätzen, ob eine solche Software für die Elektronenbeugung interessant wäre.

Nach drei Tagen endete die Schule jedoch bereits, und der 34. Kongress der Europäischen Gesellschaft für Kristallographie begann. Neben einer großartigen und erstaunlich kurz gehaltenen Einführung im komplett neuen Konferenzgebäude wurde der Kongress offiziell eröffnet. Es folgte die erste spannende *Plenary Lecture* von Kristina Djinovic sowie der Vortrag zum Max-Perutz-Preis von Mariusz Jaskólski. Im Anschluss gab es mit dem *Welcome Cocktail* ein großartiges *Social Event*, bei dem man einen guten Überblick darüber erhielt, welche bekannten Gesichter am *Meeting* teilnahmen.

In den folgenden Tagen war der Kongress in vollem Gange und ich möchte mich hier aufgrund der Vielzahl an Vorträgen, *Plenarys*, *Keynotes* etc. auf einige persönliche Highlights und Beobachtungen beschränken. Aufgrund meines eigenen Forschungsfeldes habe ich mich vor allem für die Anwendung von Synchrotronstrahlung, Quantenkristallographie und Einkristallsoftware interessiert. Dabei ist mir aufgefallen, dass die ECM34 ein (für mich) vorteilhaft strukturiertes Programm bekommen hatte, da ich nur zwei kleinere Überschneidungen von Vorträgen hatte, die mich beide interessierten.

Angeregte Diskussionen nach meinem Vortrag über experimentelle Elektronendichte und experimentelle Wellenfunktion eines Organometallkomplexes im Mikrosymposium 12 „Correlation between Quantum Crystallography and Crystal Dynamics“

Gleich am ersten vollen Konferenztag fanden im großen Hauptsaal inspirierende Vorträge statt: Von Prof. Dietmar Stalke über die erfolgreiche Verwendung von In-*Kα*-Strahlung für Elektronendichtebestimmungen, sowie von Birger Dittrich mit einer Übersicht der aktuellen Entwicklungen im Bereich der Quantenkristallographie und dem sogenannten „Archetype"-Ansatz. Besonders eindrucksvoll war ein Vortrag von Regine Herbst-Irmer, die zum einen eine neu entdeckte Modifikation von weißem Phosphor vorstellte und zum anderen an zwei Beispielen aus der aktuellen Literatur zeigte, welche Fehler bei der Auswertung von Röntgenbeugungsdaten auftreten können und worauf man achten muss.

Meinen aufgeregtesten Moment in der Tagung hatte ich vor meinem eigenen Vortrag am Mittwoch im Mikrosymposium „Correlation between Quantum Crystallography and Crystal Dynamics". Hier durfte ich meine erste publizierte Arbeit meiner Doktorarbeit zur isolobalen Beziehung zwischen weißem Phosphor und der Organometallverbindung Cp'''NiP_3 präsentieren. Ebenso spannend fand ich die anschließende *Keynote* des *Chairs* dieses Mikrosymposiums, Anders Madsen, über die quantenkristallographische Beschreibung von Kristalldynamiken und *Disorder*. Im *Meeting* der Europäischen Jungen Kristallographen konnte ich als *Chair* der DGK-YC auch viele Vertreter:innen der nationalen sowie europäischen Jungen Kristallographen kennenlernen und erste Gespräche zu zukünftigen Kollaborationen führen.

Als letztes Highlight möchte ich den Kálmán-Preis-Vortrag von Piero Macchi hervorheben, der einen Überblick über den Beitrag der (Quanten-)Kristallographie zum Fortschritt auf dem Weg zu effizienten Quantencomputern gab und erläuterte, wie Quantencomputing auch die Quantenkristallographie verändern wird.

Abschließend war die ECM34 in Padova ein erstklassiges Event, bei dem ich viel lernen konnte, sowohl kristallographisch als auch über das Vortragen auf Konferenzen. Ich konnte viele neue Expert:innen kennenlernen und alte Bekannte wiedertreffen. Der Austausch mit den Kolleg:innen war für mich inspirierend und motivierend, weiter an meinen Forschungsthemen zu arbeiten. Die Stadt Padova war für diese Konferenz eine großartige Wahl, da man hier in einer historisch bedeutenden Atmosphäre Wissenschaft auf höchstem Niveau erleben durfte und sich bereits vor Ort auf die nächste Tagung der ECA freuen konnte.

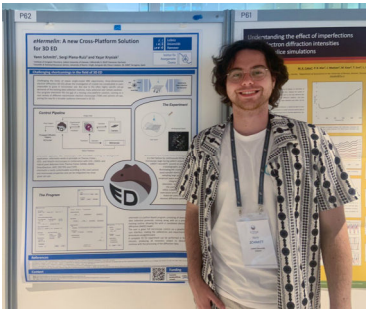
Ich möchte der DGK herzlich danken, da mir durch ihren *Travel Grant* die Teilnahme an der Konferenz erst ermöglicht wurde. Ich bin mir sicher, dass mich die Erfahrungen, Kontakte und Impressionen, die ich auf dieser Tagung gewinnen konnte, noch lange begleiten werden.

YANN SCHMITT (LEIBNIZ UNIVERSITÄT HANNOVER)

Die norditalienische Stadt Padova, etwa eine halbstündige Zugfahrt von Venedig entfernt, besticht nicht nur mit einer malerischen Altstadt und einer reichen Kirchen- und Basilikenlandschaft im byzantinischen Stil, sondern war 2024 auch Austräger der ECM34 (*European Crystallographic Meeting*) und Sammelpunkt vieler Kristallographen weltweit. Ausgestattet mit für die Sommertemperaturen viel zu schwerem Gepäck und einem Reisestipendium der DGK, erfolgte die Anreise allerdings schon die Woche vorher mit dem Besuch der ElCryS24 (*Electron Crystallography School*). In der Fakultät für Geowissenschaften wurden etwa 40 Forschende diverser Fachrichtungen in die theoretischen und praktischen Hintergründe moderner Elektronenbeugungsmethoden eingeführt.

Experten und Expertinnen präsentierten ein äußerst lehrreiches Programm, vom Umgang mit den omnipräsenten Mehrfachstreueffekten in Elektronenbeugungsbildern bis hin zu Fallstricken in der Datenprozessierung. Beim Abendprogramm konnte sich in angenehm-lockerer Atmosphäre mit Blick auf den Fluss *Bacchiglione* über das Gelernte ausgetauscht werden. Eine original-italienische Pizza durfte selbstverständlich nicht fehlen, und beim gemeinsamen Abendessen wurden viele neue Bekanntschaften innerhalb der eigenen Forschungscommunity geknüpft.

Lange konnten die Eindrücke allerdings nicht verarbeitet werden, denn nahtlos ging es die Folgewoche mit der ECM34 weiter, beheimatet in der erst 2022 fertiggestellten Kongresshalle von Padova. Der innere Konflikt eines Erstbesuchers, welchen der vielen Stände, Poster und Angebote als Erstes nachzugehen sich lohnt, wurde durch die breite Auswahl an Mikrosymposien und Vorträgen nicht gerade erleichtert. Mit Hilfe erfahrenerer Konferenzbesucher gelang aber eine Auswahl sehr interessanter Vorträge. Das Hin- und Herlaufen zwischen den Sälen versprach neben geistiger auch körperliche Betätigung. Neueste Formfaktormodelle für die Elektronenbeugung, 3D-PDF und Vorträge aus der Archeochemie bildeten ein weites Themenspektrum von persönlich interessanten bis zu nicht weniger spannenden Einblicken in fachlich entferntere Disziplinen. Aufregend wurde es dann nochmal am Mittwoch, nachdem ein Redner ausgefallen war und mit eigenem Flashvortag spontan eingesprungen werden musste. Nach erfolgreicher Präsentation mit verzeihbarer Anzahl anfänglicher Versprecher und einer fachlich sehr ergiebigen Posterpräsentation konnte sich guten Gewissens den Abendveranstaltungen gewidmet werden. Dazu gehörten neben dem *Student Mixer* im Nachtpark von Padova ein Konzert mit venezianischer Musik des 18. Jahrhunderts und nicht zuletzt der äußerst unterhaltsame *Science Slam*. Um viele Erfahrungen reicher und mit schon aufkommender Vorfreude auf die nächste ECM ging es Ende der Woche viel zu schnell zurück in ein (leider sehr viel graueres) Hannover.



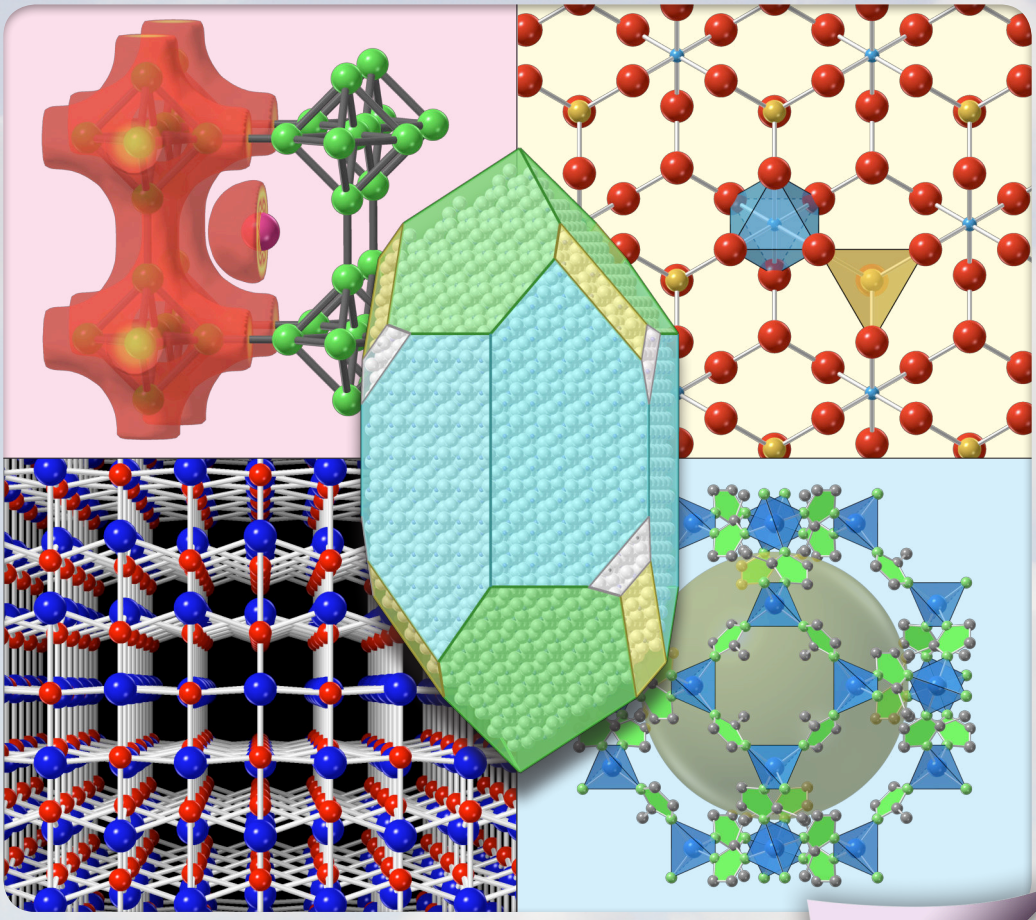
Einige Eindrücke der ECM34 in Padova: Der imposante Torbogen der Kongresshalle lud ein der Mittagssonne zu entfliehen und noch wichtiger, vielen interessanten Fachvorträgen zu lauschen. Die Posterpräsentation führte zu jeder Menge neuer Eindrücke und Anregungen. Mental bereichert, aber erschöpft, wurden in den Abendstunden die Straßen Padovas erkundet und die regionale Küche (nebst Aperitif) ausprobiert.

NEW version 11.6

CRYSTALLOGRAPHY FOR THE 21ST CENTURY

CrystalMaker®

CrystalMaker® 11 is the easiest way to understand crystal structures and their properties. Featuring class-leading graphics, animations and video—with breakthrough crystal- and molecular energy modelling. New features added this year include **Morphology**, **Twinning**, **Shape Prediction**, **Grow Tool**, **Angles Explorer** and full native support for **macOS 26 Tahoe**.



Mac

Windows11 Compatible

Established 1994

30+ Years of Innovation

Free Demo Software
Video Tutorials

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • UK

WWW.CRYSTALMAKER.COM

Bericht über die 60. International School of Crystallography in Erice

Vom 30. Mai bis zum 7. Juni 2025 fand im malerischen Erice, Sizilien, die *60. International School of Crystallography* statt, die sich in diesem Jahr dem Thema „Electron Crystallography“ widmete. Diese traditionsreiche Veranstaltung zog erneut eine internationale Gemeinschaft von Forschenden, jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern sowie Expertinnen und Experten aus verschiedenen Bereichen der Kristallographie zusammen.

Bemerkenswert ist die Lage von Erice, abgeschieden auf einem Berg gelegen, sodass die Teilnehmerinnen und Teilnehmer bis auf wenige Touristen unter sich waren. Diese ruhige und geschlossene Atmosphäre intensivierte den Austausch untereinander erheblich. Unterstützt wurde dies zusätzlich durch die Unterbringung in kleinen Unterkünften, die bereits beim Frühstück Gelegenheiten für neue Bekanntschaften schafften. Auch abends boten die Restaurants und Cafés von Erice zahlreiche Gelegenheiten für informelle Gespräche und Netzwerken.

Die Veranstaltung begann mit einem herzlichen Willkommen durch die Organisatoren der *School* und die Kursdirektoren. Das wissenschaftliche Programm der Tagung umfasste eine ausgewogene Mischung aus theoretischen Vorträgen, praktischen Übungen und Demonstrationen modernster Technologien und Software.

Der erste Tag begann mit grundlegenden Vorträgen zu atomaren Streufaktoren sowie elastischen, inelastischen, kinematischen und dynamischen Aspekten der Elektronenstreuung. Ergänzend dazu wurden instrumentelle Ansätze zur 3D-Elektronenbeugung vorgestellt, insbesondere die Techniken von 3D-ED mit und ohne Strahlpräzession. Diese Grundlagen bildeten die notwendige Basis für die vertiefenden Inhalte der folgenden Tage.

An den Folgetagen konzentrierte sich das Programm auf detaillierte Vorträge zur Datenreduktion, Strukturermittlung und Analyse makromolekularer Strukturen. Themen wie iterative Dualraum-Methoden, dynamische Verfeinerung und die Rolle von künstlicher Intelligenz, insbesondere im Kontext von AlphaFold, wurden behandelt. Diese Vorträge ermöglichten den Teilnehmenden tiefergehende Einblicke in moderne Ansätze der Strukturbiologie und Materialwissenschaften. Zusätzlich wurden neue Entwicklungen zur Verbesserung der Datenqualität und Genauigkeit diskutiert.

Methodische Entwicklungen standen ebenfalls im Vordergrund. Dazu gehörten innovative Anwendungen der seriellen Elektronenbeugung, die Erforschung von Nanopartikeln und Nanodomänen mittels „Nano-3D-ED“ sowie moderne Ansätze der Elektronen-Ptychographie, die insbesondere im Bereich der Materialwissenschaften zunehmend an Bedeutung gewinnen. Diese methodischen Neuerungen zeigten, wie Elektronenbeugungstechniken immer präzisere Analysen auf atomarer Ebene ermöglichen und somit neue Forschungsbereiche erschließen.

Ein zentrales Element der Schule waren zudem die praktischen Übungen und Software-Demonstrationen. Dazu zählten Workshops zur Nutzung von Softwarepaketen wie XDS, JANA, PETS sowie interaktive Sessions mit Softwaretools wie Phaser, Coot und Crystalmaker. Diese Aktivitäten ermöglichten den Teilnehmenden, ihr Wissen direkt anzuwenden und zu vertiefen. Dabei wurden unterschiedliche Softwarelösungen vorgestellt und im Detail praktisch erprobt, was insbesondere für jüngere Forschende wertvolle Erfahrungen bedeutete. Ergänzend fanden Diskussionen zur Optimierung von Experimentdesign und Datenerfassung statt.

Am Rande des wissenschaftlichen Programms boten Postersessions und Firmen-demonstrationen zusätzliche Möglichkeiten zum intensiven Austausch. Besonders hervorzuheben waren die gemeinsamen Abendessen während der Postersessions, die eine gute Gelegenheit boten, informell mit Kolleginnen und Kollegen in Dialog zu treten und neue Kontakte zu knüpfen. Die lockere Atmosphäre trug wesentlich zur Förderung interdisziplinärer Diskussionen und Kooperationen bei.

Ein Highlight außerhalb des wissenschaftlichen Rahmens war die traditionelle Exkursion zur Insel Mozia, einer bedeutenden archäologischen Fundstätte vor der Westküste Siziliens. Dort hatten die Teilnehmenden die Möglichkeit, die Überreste der phönizischen Zivilisation zu erkunden und mehr über die Geschichte und Kultur der Region zu erfahren. Diese Exkursion ergänzte das wissenschaftliche Programm um eine kulturelle und historische Perspektive. Der Tag wurde schließlich bei einem Abendessen in einem Restaurant mit Blick auf das Mittelmeer abgerundet.

Abgeschlossen wurde die Konferenz mit den „Closing Remarks“ und der Verleihung von Posterpreisen, wobei auf die nächste *International School of Crystallography* zum Thema „Electron Crystallography“ in acht Jahren hingewiesen wurde.

Die *60. International School of Crystallography* erwies sich als zentrale Plattform für den Wissensaustausch und für die Entwicklung neuer Ideen in der Elektronen-Kristallographie. Die Veranstaltung unterstrich deutlich, wie wichtig die enge Verknüpfung von theoretischen Erkenntnissen, methodischen Entwicklungen und praktischen Anwendungen für den Fortschritt der Kristallographie ist. In einer Zeit, in der immer komplexere Fragestellungen auftreten, bot diese Veranstaltung eine unverzichtbare Möglichkeit, neue Methoden und Ansätze zu diskutieren, zu erproben und zukunftsweisende Kooperationen zu initiieren.

Alexander Feige (Universität Leipzig)

hilgenberg

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.

Berichte zum 61st Course of Quantum Crystallography in Erice

Daniel Brüx (RWTH Aachen)

Vom 30. Mai bis zum 7. Juni 2025 fand der 61. Kurs der *International School of Crystallography* zum Thema *Quantum Crystallography* in der historischen Stadt Erice auf Sizilien statt. Die Veranstaltung bot damit einen außergewöhnlichen Rahmen für den wissenschaftlichen Austausch.

Erice selbst – malerisch auf einem Hügel gelegen mit weitem Blick über die sizilianische Küste – begeisterte durch seine weit zurückreichende Geschichte, der beeindruckenden Architektur und romantischen Gassen. Die Unterkunft und Organisation vor Ort waren sehr gut und durch die zahlreichen kulinarischen Angebote der hiesigen Restaurants war für das leibliche Wohl bestens gesorgt. Ein kulturelles Highlight war ein Abendessen mit musikalischer und tänzerischer Begleitung durch eine klassische sizilianische Musikgruppe.

Die *International School of Quantum Crystallography* fand gerichtet nach einem strukturierten und intensiven Tagesplan statt. Am Vormittag wurden vier jeweils 45-minütige Workshops abgehalten, in denen die Anwendung aktueller Software zur quantenchemischen Modellierung und Strukturverfeinerung demonstriert wurde. Hierbei standen unter anderem Methoden wie das Multipolmodell, *Hirshfeld Atom Refinement*, Bindungsanalyse sowie grundlegende quantenchemische Werkzeuge im Mittelpunkt. Der direkte Austausch mit den Vortragenden ermöglichte es, praktische Fragen unmittelbar zu klären.

Pausenraum mit Ausblick über Sizilien

Die Aachener Teilnehmer (von links nach rechts): Ben Ebel, Daniel Brüx, Lukas Seifert

Am Nachmittag folgten vertiefende Vorträge zu unterschiedlichen Aspekten der Quantenkristallographie. Die Vielfalt der Themen und Blickwinkel – von theoretischen Grundlagen bis hin zu konkreten Anwendungsbeispielen – machte die Vortragsreihe besonders abwechslungsreich.

Während der Pausen, bei einem Espresso oder abends bei einem Glas Marsala, bot sich reichlich Gelegenheit zum fachlichen und persönlichen Austausch mit internationalen Expertinnen und Experten und den Nachwuchswissenschaftler:innen.

An zwei Abenden wurden auch von Seiten der Teilnehmenden mitgebrachte Poster präsentiert. Die Postersession wurde zusammen mit den Teilnehmenden der *Electron Crystallography School* abgehalten was das Angebot an Postern sehr abwechlungsreich machte. Die Postersession bot dabei einige Chancen das mitgebrachte Poster aus verschiedenen Seiten zu beleuchten und auch einen teifernen Einblick in die Forschung der anderen Teilnehmenden zu bekommen.

Ein weiterer Höhepunkt war die gemeinsame Exkursion auf die Insel Mozia, wo antike Ausgrabungen besichtigt werden konnten, die teilweise über 3000 Jahre alt waren.

Nach einer intensiven und inspirierenden Woche voller neuer Eindrücke und Begegnungen endete der Kurs mit vielen neuen Impulsen für die eigene Forschung. Für die finanzielle Unterstützung dabei bedanke ich mich herzlich bei der DGK.

BEN EBEL (RWTH AACHEN)

Die Teilnahme an der Quantenkristallographie-Schule 2025, der 61. Kurs der in Erice stattgefunden hat, welche mir durch das DGK-Reisestipendium ermöglicht wurde, war eine einzigartige und inspirierende Erfahrung – wissenschaftlich wie kulturell.

Nach der Ankunft in Palermo ging es per Shuttlebus die Serpentinen hinauf in das mittelalterliche Städtchen Erice. Schon beim ersten Spaziergang angeführt von Martin Schmidt durch die engen Gassen, vorbei an alten Steinhäusern und spektakulären Ausblicken auf die Küste Siziliens, wurde klar: Dieser Ort ist wie geschaffen für konzentriertes Arbeiten und wissenschaftlichen Austausch.

Das Zentrum, in dem die Schule stattfand – die *Ettore Majorana Foundation* – ist geschichtsträchtig. Hier versammeln sich seit Jahrzehnten einige der fähigsten Köpfe aus der Kristallographie, Physik, Chemie und angrenzenden Disziplinen. Die Atmosphäre ist geprägt von akademischer Tiefe und zugleich einer fast klösterlichen Ruhe.

Die Vorträge und Workshops boten eine hochkarätige und ausführliche Einführung in die Welt der Quantenkristallographie (QC) – einem interdisziplinären Feld zwischen Kristallographie und Quantenchemie, welches mich seit Beginn meiner Masterarbeit fasziniert. Besonders eindrucksvoll war die Art und Weise, wie theoretische Konzepte mit praktischen Anwendungen verknüpft wurden. Für mich, der bisher QC hauptsächlich über *Hirshfeld Atom Refinement* (HAR) mit NoSpherA2 kannte, waren dabei besonders die Einblicke in das *Multipole Refinement* interessant, welche unter anderem von P. Macchi, C. Jelsch und P. Dominiak vorgestellt wurden. Weitere Highlights waren zudem die Anwendung von periodischen Randbedingungen im HAR gezeigt von S. Casassa und P. N. Ruth sowie der Einblick in all die Möglichkeiten, die die Bindungsanalyse zu bieten hat, welche von S. Grabowsky, J. Contreras und A. M. Pendas vorgestellt wurden.

Ein Höhepunkt für mich war die Poster-Session, in der die Teilnehmer:innen ihre eigenen Projekte vorstellen konnten. Die Gespräche waren lebhaft und konstruktiv – es war inspirierend zu sehen, wie vielfältig das Feld ist und wie stark Nachwuchsforscher:innen zur Weiterentwicklung beitragen. Auch wurde mir ein weiteres Mal aufgezeigt, wie positiv der Umgang miteinander auf kristallographischen Tagungen stattfindet, unabhängig vom akademischen Grad. Die Diskussion über mein Poster mit H. B. Bürgi, D. Jayatilaka, A. Genoni und vielen weiteren ist eine Erfahrung für meinen wissenschaftlichen Werdegang, die ich niemals vergessen werde.

Neben dem wissenschaftlichen Programm bot die Schule auch viele Möglichkeiten für den informellen Austausch. Gemeinsame Mittag- und Abendessen mit verschiedensten Teilnehmern haben mir viele neue Themen nähergebracht und ich konnte viele neue Leute kennenlernen. Auch dafür eignet sich Erice aufgrund seiner überschaubaren Größe perfekt. Es ist quasi unmöglich sich nicht mit den anderen auszutauschen, da sich jeder ständig über den Weg läuft. Die besten Plätze dafür bleiben jedoch der Kaffee-Raum mit traumhaftem Ausblick oder natürlich der Masala-Raum, der nach Ende des wissenschaftlichen Programmes abends geöffnet wurde bzw. auch die Burg, der Sammelort nachdem der Masala-Raum für die Nacht geschlossen wurde.

Auch das Wetter meinte es gut: tagsüber Sonne, abends eine frische Brise von der Küste – perfekt für Gespräche an dem Aussichtsturm der Burg mit Blick über das Mittelmeer.

Die Quantenkristallographie-Schule in Erice war mehr als nur eine Fortbildung – sie war eine intensive Reise in ein zukunftsweisendes Forschungsfeld, verbunden mit dem seltenen Luxus, für einige Tage ganz in Wissenschaft und Diskussion einzutauchen. Der Aufenthalt in Erice hat nicht nur mein Verständnis vertieft, sondern auch neue Ideen und Kontakte hervorgebracht, die mich sicher noch lange begleiten werden.

Ich kann jedem, der sich für Strukturchemie, Elektronendichteanalysen und interdisziplinäre Forschung interessiert, nur empfehlen, sich für zukünftige Schulen dieser Art zu bewerben – und Erice mit eigenen Augen zu erleben.

Die Arbeitskreise der DGK berichten

BERICHT DES AK1 „JUNGE KRISTALLOGRAPHEN“ / „YOUNG CRYSTALLOGRAPHERS“

Das Berichtsjahr 2024/25 war ein erfolgreiches Jahr aus Sicht des AK1. Wir hatten das Glück unser jährliches Treffen, welches sich an Nachwuchskristallograph:innen aus dem mitteleuropäischen Raum richtet, dieses Jahr bei Rigaku Europe SE abhalten zu dürfen. In Neu-Isenburg bei Frankfurt am Main hatten wir das große Vergnügen, einem abwechslungsreichen Rahmenprogramm zu lauschen: Wir möchten uns hier noch einmal ausdrücklich bei Prof. Dr. Ella Schmidt (Unversität Bremen), Prof. Dr. Florian Kleemiß (RWTH Aachen) und Dr. Bonnie Murphy (MPI Frankfurt) für ihre Zeit und Vorträge bedanken. Die Beiträge von drei Nachwuchsgruppenleiter:innen schenkten uns einen Einblick in die Themengebiete der diffusen Röntgenbeugung, Quantenkristallographie und nicht zuletzt Strukturbiologie. Alle drei berichteten uns auch ihren persönlichen Weg zu ihrer jetzigen Position.

Mit 26 Teilnehmenden und insgesamt 20 Beiträgen, welche alle jeweils einen fünfminütigen Redebeitrag sowie eine Posterpräsentation enthielten, waren diese wie immer stark am Programm und Erfolg des Events beteiligt.

Als willkommene Abwechslung von den Vorträgen zeigte uns Rigaku Europe SE ihre Demonstrationslabore. Hier gab es auch ein schönes Wiedersehen mit einem unserer ehemaligen Chairs, Dr. Kha-Nghii Truong, welcher mittlerweile bei Rigaku arbeitet.

Wie immer wurde die Veranstaltung umrahmend mit genügend Möglichkeiten zum Austausch unter den Jungkristallograph:innen ausgestattet: Ob im „Grüner Baum“ beim „Äbbelwoi“ oder während der Postersession, hier gab es jede Menge Möglichkeiten, Kontakte zu knüpfen und (Forschungs-)Themen zu diskutieren. Schlussendlich wurden noch die drei Vortragenden geehrt, welche das Preiskommittee am meisten überzeugen konnten: Hannah Waldmann, Jan Elsaß und Esthy Hung – nochmals, herzlichen Glückwunsch!

Und somit freuen wir uns bereits auf unserer nächstes Treffen, zu welchem wir diesmal wieder „auf neutralen Boden“ ins Helmholtz-Zentrum Berlin / BESSY II Ende Oktober dieses Jahres einladen möchten. Mehr Infos zum vergangenen Treffen findet ihr im Artikel von Hannah Waldmann auf der Blog-Seite der DGK (https://dgk-home.de/11-treffen-der-young-crystallographers-bei-rigaku/), wo ihr auch in Bälde alle Infos zur Registrierung unseres kommenden Treffens in Berlin finden könnt.

Am Anfang dieses Jahres wurde zudem auf der Jahrestagung der DGK zum vierten Jahr in Folge der Lieselotte-Templeton-Preis für exzellente Abschlussarbeiten im Bereich der Kristallographie verliehen. Dieses Jahr wurde der Preis verliehen an: Lukas Brüning (Uni Frankfurt) für seine Arbeit an der Synthese neuartiger Hauptgruppennitride unter Hochdruck, an Daniel Brüx (RWTH Aachen) für das Erstellen einer Aminosäure-Benchmark-Datenbank für nicht-sphärische Verfeinerungsmethoden und an Niklas Langer (Uni Leipzig) für seine Arbeit zur Validierung der erweiterten Koordinationszahlregel in ionischen Verbindungen durch Erstellung und Analyse einer Datenbank. Wir gratulieren allen Gewinnern und freuen uns auch in Zukunft auf neue Bewerber:innen. Die Laudationen zum Preis finden sich weiter hinten in dieser Ausgabe der DGK-Mitteilungen.

Lebhafte Diskussion bei der Poster Session unseres jährlichen Treffens, diesmal bei Rigaku Europe SE in Neu-Isenburg

Belebte Postersession im Hauptsaal der Leibniz Universität Hannover im Welfenschloss.

Die Jahrestagung der DGK fand in diesem Jahr vom 10. bis 13. März 2025 in der Leibniz Universität Hannover statt. Wie üblich spielten die jungen Kristallographen (wir bezeichnen uns traditionell als „Junge Kristallographen“ – miteinbezogen sind Jungkristallograph:innen aller Geschlechter) eine große Rolle bei der Organisation von Sitzungen und Aktivitäten, die jungen Nachwuchswissenschaftlern die Möglichkeit boten, ihre Arbeit besser sichtbar zu machen. Bei den am zweiten Tag organisierten *Lightning Talks* fassten Forscher:innen ihre Posterthemen zu kurzen 5-Minuten-Vorträgen zusammen, welche die Aufmerksamkeit der Zuhörer leicht auf sich zogen, wie man an der Teilnehmerzahl sehen konnte.

Am selben Tag fand am Abend das *Get Together* statt, bei dem neue Vorsitzende gewählt wurden: Anushka Ghosh, die zuvor als Social-Media-Mitarbeiterin für die JK tätig war, wurde zur *Chair* gewählt, Ben Ebel, ein früherer LTP-Gewinner, wurde zum *Co-Chair* gewählt und Florian Meurer, der frühere *Chair*, blieb dem Ausschuss als beratender *Chair* erhalten. Am nächsten Tag fanden Vorträge der LTP-Gewinner statt, die recht gut besucht waren.

Wie jedes Jahr wurden auch diesmal wieder STOE-Präsentationspreise für die besten Kombinationen aus *Lightning Talk* und Poster gekürt. Beim *Get Together* wurden dieses Jahr Julian Zuber, Lukas Sippach und Julia L. Kowal ausgezeichnet – herzlichen Glückwunsch!

Einen Artikel zur DGK-Tagung in Hannover geschrieben von Elisabeth Fetter findet ihr ebenso auf der Blog-Seite der DGK-Homepage (*https://dgk-home.de/33rd-annual-meeting-of-the-german-society-for-crystallography-a-warm-welcome-in-hanover*).

Dass wir unsere Aktivitäten durchführen können, verdanken wir einigen Organisationen und Firmen. An dieser Stelle möchten wir unseren besonderen Dank aussprechen: der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK), Rigaku Europ SE und STOE & Cie. GmbH.

Zu guter Letzt wollen wir auch hier allen Leser:innen die Chance geben, sich aktiv am Geschehen der Jungen Kristallographen zu beteiligen. Wer sich für unseren Newsletter anmelden, einen Blogartikel beitragen oder sich aktiv in die Organisation der YC einbringen möchte, kann uns unter *info.dgkyc@gmail.com* erreichen.

Anushka Ghosh (Berlin), Ben Ebel (Aachen) und Florian Meurer (Regensburg)

STOE

SINCE 1887

TURN WEAK INTO WINNING DATA, WITH INTEGRATE3D

INTEGRATE3D is the 3D profile fitting tool for single crystal data, employing ab-initio (non-learned) profiles to dynamically adjust integration volumes based on reflection intensity, enhancing I/σI – particularly for weak data – via a dynamic “breathing” mechanism.

INTEGRATE3D is already making a real impact – scan the QR code to watch our STOE USER TALK webinar and see how it can elevate your data quality!

HANDS OFF. SPOT ON. BEAM OPTIMIZATION 2.0.

STOE’s new Beam Optimization 2.0 for the STADI P powder diffractometer automates monochromator and goniometer alignment to $K\alpha_1$-radiation, eliminating manual beam contact – even when changing tubes or switching anode materials. Compatible with Co, Cu, Mo, and Ag in horizontal setups, it can also be retrofitted to existing STADI P systems.

YOUR PARTNER IN X-RAY DIFFRACTION

WWW.STOE.COM | INFO@STOE.COM

BERICHT ZUM

RIETVELD AND PAIR DISTRIBUTION FUNCTION (PDF) ANALYSIS WORKSHOP

Vom 31. März bis 4. April 2025 war das Max-Planck-Institut für Festkörperforschung (MPI-FKF) in Stuttgart Gastgeber des DGK-Doktoranden-/Nachwuchskurses „Rietveld and Pair Distribution Function (PDF) Analysis Workshop“, organisiert von Robert Dinnebier. Mit etwa 130 Teilnehmern aus der ganzen Welt war der Workshop ein voller Erfolg. Die Veranstaltung, die in Zusammenarbeit mit den Universitäten Tübingen und Stuttgart sowie dem Arbeitskreis „Lehre der Kristallographie“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) organisiert wurde, bot eine einzigartige Mischung aus Theorie und praktischer Ausbildung. Im Mittelpunkt des Kurses standen fortgeschrittene Methoden der Strukturanalyse, die für ein breites Spektrum moderner Forschungsgebiete – von Batteriematerialien und pharmazeutischen Verbindungen bis hin zu Katalysatoren, Keramiken, Farben und Reinigungsmitteln – von entscheidender Bedeutung sind. Die Teilnehmer erwarben in Vorträgen und praktischen Übungen eingehende Kenntnisse der Rietveld-Verfeinerung und der PDF-Techniken.

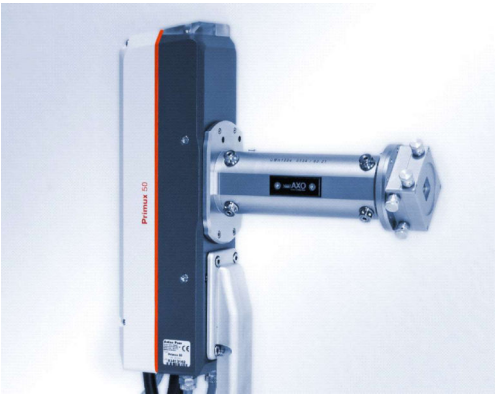
Die Vortragenden waren Robert Dinnebier, Sebastian Bette (MPI-FKF), Max Terban (Momentum Transfer), Martin Etter (DESY), Paolo Scardi (Universität Trient), John Evans (Universität Durham) und Andreas Leineweber (TU Bergakademie Freiberg).

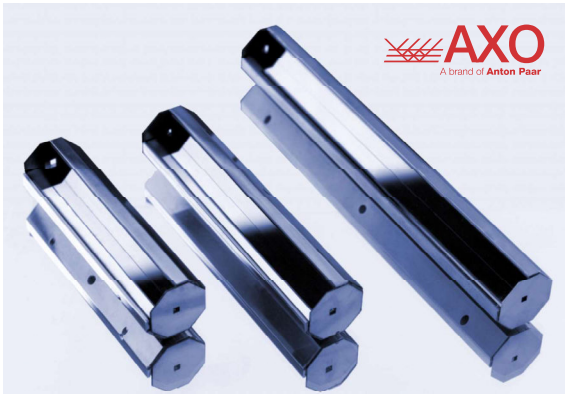
Teilnehmer des Rietveld and Pair Distribution Function (PDF) Analysis Workshop

Ziel war es, die Teilnehmer in die Lage zu versetzen, selbstständig Kristallstrukturbestimmungen und Rietveld-Verfeinerungen durchzuführen. Dazu gehören die quantitative Phasenanalyse, die Mikrostrukturbestimmung und die Anwendung der PDF-Analyse auf nanokristalline Materialien. Ein besonderer Höhepunkt war die Internationalität des Kurses mit Teilnehmern aus Brasilien, Südafrika, den Vereinigten Staaten, Australien und vielen anderen Ländern. Es gibt weltweit nur sehr wenige Kurse, die diese Art von Ausbildung anbieten, so dass die Nachfrage enorm ist. Seit ihren Anfängen im Jahr 1969 hat sich die Rietveld-Methode exponentiell weiterentwickelt. Der Workshop trägt dieser Entwicklung Rechnung und spielt eine Schlüsselrolle bei der Förderung der nächsten Generation von Kristallographen und Materialwissenschaftlern.

Der Kurs wurde durch das MPI-FKF, die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK), die Kursgebühren der Teilnehmer und externe Sponsoren finanziert:

Robert Dinnebier (Stuttgart)





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

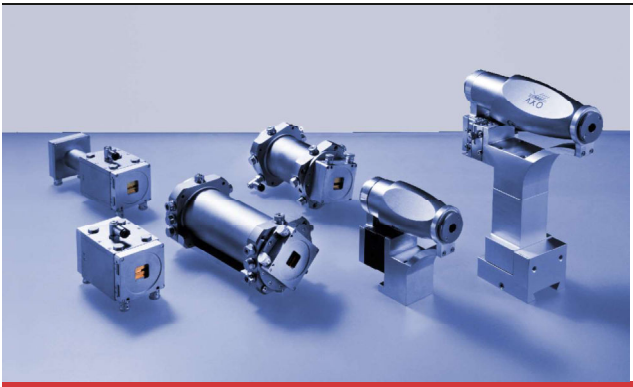
Primux 50 microfocus X-ray sources
high brilliance, water-cooled, easy alignment, low running and maintenance costs.

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

Multilayer Laue Lenses (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



www.axo-dresden.de

BERICHT DES AK3 „EXPERIMENTELLE METHODEN“

Ein Jahr nach der konstituierenden Sitzung des Arbeitskreises 3 „Experimentelle Methoden“ in Bayreuth wurde nun bei der Jahrestagung in Hannover die zukünftige Ausrichtung des Arbeitskreises spezifiziert. So möchte der Arbeitskreis in Zukunft eine Plattform für Ausbildung und Vernetzung der Mitglieder in den experimentellen Methoden bieten. Dies soll insbesondere durch das Organisieren und Bewerben von Workshops geschehen, die die experimentellen Methoden, insbesondere dem kristallographisch orientierten Nachwuchs näherbringen sollen. Dabei sollen sowohl die Vernetzung von Personen als auch der verschiedenen Methoden im Vordergrund stehen. Im Fokus stehen dabei Synergieeffekte zwischen Labormessmethoden und Großforschungseinrichtungen, wobei auf die Gemeinsamkeiten als auch die Komplementarität der verschiedenen Methoden eingegangen werden soll, beispielsweise bei Röntgen-, Elektronen- und Neutronenexperimenten, sowie bei spektroskopischen Methoden wie Ramanmessungen, NMR-Messungen etc.

Ein Vorreiter bei diesen Workshops ist der Kollege Michael Fechtelkord von der Ruhr-Universität Bochum, der regelmäßig und mit großem Engagement seinen Workshop/Kurs zum Thema „Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ anbietet. Dafür gebührt ihm großer Dank und Anerkennung. Wer Interesse hat: Der Workshop findet in diesem Jahr vom 10. bis 13. Juni 2025 in Bochum statt.

Um die Ziele des AK3 zu verwirklichen, sind alle Mitglieder, die Interesse an zukünftigen AK3-Themen haben, herzlich willkommen und eingeladen, sich bei den AK-Sprechern Martin Etter (*martin.etter@desy.de*) und Martin Meven (*martin.meven@frm2.tum.de*) zu melden und sich in die Mailingliste eintragen zu lassen. Wir rufen explizit hier nicht nur die Erfahrenen, sondern vor allem die jüngeren Mitglieder auf sich zu beteiligen, da nur das Verständnis über die experimentellen Methoden letztendlich zur erfolgreichen Durchführung eines Forschungsprojekts führt! Darüber hinaus freuen die AK-Sprecher sich natürlich über alle, die sich mit neuen Ideen am AK beteiligen wollen.

Martin Etter (Hamburg) und Martin Meven (München)

PhotonJetMAX-S

Maximum Flexibility
Maximum Flux

Now available in Cu and Mo

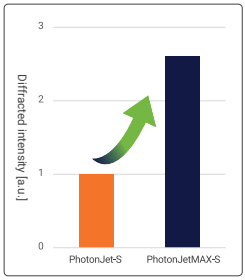
A new high-performance sealed tube source from Rigaku Oxford Diffraction

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

Rigaku Corporation and its Global Subsidiaries
RESE@rigaku.com | rigaku.com

FL_25_PhotonJetMAX_9381152335

BERICHT DES AK4 „THEORETISCHE METHODEN“

Der Arbeitskreis „Theoretische Methoden“ wurde 2023 im Zuge der Reorganisation der DGK-Arbeitskreise ins Leben gerufen. Ziel ist die Vernetzung von Wissenschaftler*innen, die sich mit rechnergestützten Methoden, theoretischer Modellierung und Vorhersagen und Softwareentwicklung in der Kristallographie beschäftigen. Die inhaltliche Bandbreite reicht von Strukturaufklärung mittels quantenchemischer Methoden, der Vorhersage von Eigenschaften und Strukturen bis hin zu KI-gestützten Verfahren, Datenbanken, Softwareentwicklung und mathematischen Aspekten kristallographischer Forschung. Vor allem die zielführende Anwendung von KI und Softwareentwicklung sind durch regen Austausch mit den anderen Arbeitskreisen geprägt.

Das erste Treffen des Arbeitskreises fand im Rahmen der DGK-Jahrestagung 2024 in Bayreuth statt. Im Nachgang wurde ein *Steering Committee* mit sechs Mitgliedern gebildet. Auf der DGK-Jahrestagung 2025 in Hannover war der Arbeitskreis durch drei Mikrosymposien mit jeweils sechs Vorträgen sowie durch acht Posterbeiträge vertreten. Die thematische Bandbreite der Beiträge war groß und spiegelte die Breite des Arbeitskreises wider. Im Programmkomitee der Jahrestagung in Lübeck im Jahr 2026 wird der AK durch Florian Kleemiß und Michael Fischer vertreten. Für diese und kommende Tagungen wird erwogen, zusätzlich neue Schlüsselbegriffe wie „Big Data“ bei der Einreichung vorzuschlagen.

Im März 2025 während des Arbeitskreistreffens wurde Jun.-Prof. Dr. Florian Kleemiß (RWTH Aachen) als neuer Sprecher des Arbeitskreises gewählt. Das *Steering Committee* besteht derzeit aus Michael Fischer, Anna Krawczuk, Andrea Thorn, Gerhard Raabe und Florian Kleemiß, die Mailingliste des AK zählt derzeit 31 Abonnent*innen.

Die Arbeitskreis-Webseite wurde durch den Sprecher erweitert und wird regelmäßig gepflegt. Ergänzend wurde eine Unterseite mit weiterführenden Links zu internationalen Netzwerken und Veranstaltungen eingerichtet. Hier soll sich in Rücksprache mit den Mitgliedern zukünftig eine Aufstellung von Software und Tools bilden, die sich für die Fragestellungen des Arbeitskreises als hilfreich erwiesen haben. Hinweise auf weitere relevante Inhalte sind herzlich willkommen.

Im Jahr 2025 stattfindende Workshops und Meetings, die für AK-Mitglieder von Interesse sein dürften, sind unter anderem der *Munich Crystallography Workshop* (Garching, 4.–7. August), das *International Charge Density Meeting* (Durham, 14.–17. Juli), sowie die *Psi-k Konferenz* (Lausanne, 25.–28. August). Ab dem 11. Februar 2026 findet das dreitägige dritte CECAM Diskussionsmeeting zum Thema Quantenkristallographie in Lausanne statt. Hier ist die DGK *Community* von vier Mitgliedern vertreten, davon zwei aus dem *Steering Committee* des Arbeitskreises 4.

Florian Kleemiß (Aachen)

DECTRIS

EIGER2 R CdTe

High efficiency and fast measurements for short- and dual-wavelength setups

dectris.com

Impressionen von der Jahrestagung aus Sicht des AK5 „Biomolekulare Kristallographie“

I used to rule the world,
seas would rise when I gave the word.
Now in the morning, I sleep alone,
sweep the streets I used to own.

Als die Band Coldplay 2008 ihren Song „Viva La Vida“ veröffentliche, aus dem obige Zeilen stammen, hätten sich wohl wenige Mitglieder unseres Arbeitskreises träumen lassen, dass man den Text durchaus als Menetekel für die Entwicklung der biomolekularen Kristallographie in den nachfolgenden Jahren hätte umdeuten können. Die Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie war damals noch fast ein Muss für jede/jeden, die/der sich in Deutschland in der Strukturbiologe etablieren wollte, und die Röntgenkristallographie war die unangefochtene Königin der Strukturaufklärung biomolekularer Strukturen. In jeder Neuauflage der Jahrestagung gab es zwei Sessions zu „Hot New Structures“ neben Vorträgen zu Enzymen, Signaltransduktion etc. und fünf strukturbiologische Mikrosymposien waren an der Tagesordnung.

Mit der Etablierung der Cryo-Elektronenmikroskopie und dem Siegeszug von durch künstliche Intelligenz getriebener Strukturvorhersage (die ihren Erfolg zum großen Teil den frei zugänglichen Kristallstrukturen der *Protein Data Bank* verdankt) haben sich die Zeiten für die biomolekulare Kristallographie unter dem Dach der DGK gewandelt. Das Einsammeln von Beiträgen ist schwieriger geworden und erfordert nicht wenig persönliche Motivierung durch die Sprecher des Arbeitskreises. Dennoch werden auf der Jahrestagung immer noch großartige strukturbiologische Geschichten erzählt, auch wenn sich der kristallographische Fokus mehr in Richtung Methoden- und Wirkstoffentwicklung verschoben hat.

So blickt der Arbeitskreis 5 „Biomolekulare Strukturen“ auch 2025 auf eine sehr erfolgreiche Jahrestagung in Hannover mit vier eigenen Mikrosymposien zurück, in denen junge und jung gebliebene Forschende das Beste aus ihrer Arbeit vorgestellt haben. Drei der in diesem Jahr von der DGK vergebenen Preise haben unmittelbaren Bezug zum AK5. Für die Carl-Hermann-Medaille wurde in Udo Heinemann aus Berlin ein Preisträger gefunden, der die Strukturbiologie nicht nur in Deutschland, sondern auch in Europa mitgestaltet und wesentlich zu unserem heutigen Verständnis von Protein-Nukleinsäure-Wechselwirkungen beigetragen hat. Der Max-von-Laue-Preis für Nachwuchswissenschaftler ging an Nicholas Pearce (mittlerweile in Linköping, Schweden) für die Entwicklung seines Programms PanDDa, dass das bessere Aufspüren von gebundenen Kleinmolekülen in multiplen Datensätzen, z. B. in Fragmentscreening-Kampagnen, ermöglicht. Mit dem Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie wurde Maja Klevanski aus Heidelberg ausgezeichnet, die für ihre Kunst Proteinstrukturen als Inspirationsquelle verwendet. Die Laudationen zu diesen Preisen finden sich an anderer Stelle in dieser Ausgabe der Mitteilungen abgedruckt. Der Plenarvortrag von Ingrid Span aus Erlangen zu [FeFe]-Hydrogenasen mit ihren komplexen Cofaktoren rundete das wissenschaftliche Programm des AK5 in Hannover ab.

Besonders erfreulich waren die zahlreichen Beiträge von NachwuchskristallographInnen in den Mikrosymposien und ihre aktive Teilnahme am Arbeitstreffen des AK5. So konnten wir die Wünsche der jungen Generation an die DGK besser einschätzen lernen und Ideen für Aktivitäten des Arbeitskreises außerhalb der Jahrestagung sammeln. Es zeigt sich, dass unter den biomolekularen KristallographInnen großes Interesse an neuen Methoden (künstliche Intelligenz, Elektronendiffraktion, Elektronenlaser etc.) besteht, aber durchaus auch Workshops zu grundlegenden Techniken im Bereich der Kristallgenese, der Verwendung von Computerprogrammen oder zur Interpretation von Strukturen gewünscht werden. Wenn es dann noch gelingt, moderne Kommunikationsmethoden (LinkedIn, Mastodon, Bluesky, E-Mail-Newsletter etc.) nachhaltig zu etablieren, bleibt die DGK auch in der Zukunft ein Fixpunkt für die Strukturbiologie in Deutschland.

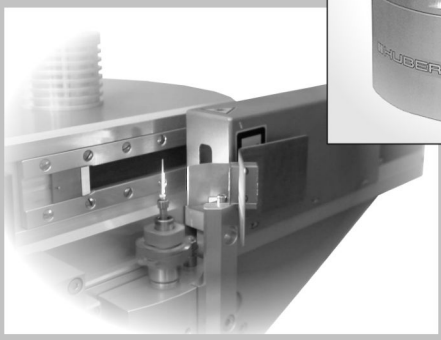
Packen wir es an!

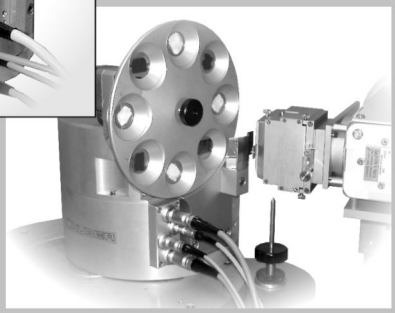
Wir danken den Organisatoren der 33. Jahrestagung in Hannover und freuen und auf das Wiedersehen in Lübeck 2026.

Wulf Blankenfeldt (Braunschweig) und Andrea Thorn (Hamburg, Berlin)

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry





HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

- ☑ A factor of more than100 faster compared to conventional step scan
- ☑ X-ray powder diffraction in 45° (asymmetric) transmission, 0° to 100° 2-theta
- ☑ Bulk samples in 17°(fixed grazing incidence) reflection, 50° to 150° 2-theta
- ☑ Plane foil or capillary samples. 8-fold sample changer for plane foil samples
- ☑ Vertical mount for liquids, 0° to 20°(adjustable grazing incidence) reflection
- ☑ Focussing monochromatic radiation, $K\alpha_1$ stripping not required
- ☑ Range of Bragg angles 100° 2-theta, 20001 steps @ 0.005°
- ☑ Laser scans signals @ 16 Bit A/D res. Linear dynamic range up to 200,000 counts
- ☑ Creates all common ASCII file types ready for data evaluation like Rietveld-Refinement
- ☑ Low-temperature attachment: Closed cycle He-refrigerator, 10 to 320 K
- ☑ Hi-temperature attachment: Diode laser heater, 300 to 1800 K
- ☑ Hi-pressure attachment: Diamond anvil cell, upto 70 GPa

HUBER

X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

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

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

BERICHT DES AK6 „CHEMISCHE KRISTALLOGRAPHIE“

Nach der Umstrukturierung der Arbeitskreise und der Neuwahl der AK-Sprecher im vergangenen Jahr, hat auf der 33. DGK-Jahrestagung 2025 in Hannover die erste reguläre Mitgliederversammlung des neu formierten AK „Chemische Kristallographie“ stattgefunden. Dort wurden Themen wie die zukünftige Organisation des Arbeitskreises, geplante Aktivitäten, die Erhöhung der Sichtbarkeit des AK, die Einbindung der AKs bei Organisation und Vorbereitung der DGK-Jahrestagungen und eine bessere Vernetzung mit der Gesellschaft Deutscher Chemiker bzw. einzelnen Fachgruppen und Arbeitskreisen der GDCh angeregt diskutiert. Neben den existierenden Zusammenarbeiten mit der Fachgruppe Festkörperchemie und Materialforschung und dem AK „Chemische Kristallographie“ in der Fachgruppe „Analytische Chemie“ wird insbesondere eine stärkere Vernetzung und Kooperation des wissenschaftlichen Nachwuchses, z. B. der Jungen Kristallographen mit den Jungchemikern, den Jungen Wöhlern (Anorganische Molekülchemie) und den Jungen Festen (Festkörperchemie und Materialforschung) durch gemeinsam organisierte Workshops und Sommerschulen angestrebt.

Im vergangenen Jahr wurden zwei Veranstaltungen durchgeführt, die die gemeinsamen Interessen und die enge thematische Verzahnung zwischen unserem AK und den GDCh-Fachgruppen widerspiegeln:

Von Christan Kleeberg (TU Braunschweig) maßgeblich organisiert, fand die 12. Sommerschule „Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse“ im September 2024 in der LVHS Freckenhorst statt. 35 Teilnehmende, überwiegend im Master- und Promotionsstadium, konnten die Grundlagen der Methode und den Gang einer Strukturanalyse kennenlernen und vertiefen. Die nächste Sommerschule dieser Reihe ist für 2026 geplant.

Ebenfalls im September und mit ca. 40 Teilnehmenden wurde das „1st PhD Seminar Chemical Crystallography“ von Michael Bodensteiner (Uni Regensburg) lokal koordiniert. Zielgruppe waren hier erfahrenere Doktorandinnen und Doktoranden, die nicht nur ihre Ergebnisse in Vorträgen präsentierten, sondern auch selbst die Moderation übernahmen. Es ist geplant, diese Veranstaltung künftig im jährlichen Wechsel mit dem „Munich Crystallography Workshop“ (siehe unten) abzuhalten.

In beiden Veranstaltungen waren Vortragende und Tutoren aus dem AK „Chemische Kristallographie“ und dem GDCh-Arbeitskreis ChemKrist prominent vertreten. Unser Dank gilt allen Dozentinnen und Dozenten und natürlich den Organisationsteams für ihr großes Engagement bei der Ausbildung und Förderung des Nachwuchses. Um die gemeinsamen chemischen und kristallographischen Interessen und Aktivitäten noch sichtbarer zu machen, möchten wir die Organisatoren und Organisatorinnen zukünftiger Veranstaltungen ermutigen, sich bei beiden Fachgesellschaften aktiv um finanzielle Unterstützung zu bewerben.

Auch in diesem Jahr werden zwei Sommerschulen von Aktiven unseres AK mitorganisiert:

Zusammen mit Kolleginnen und Kollegen aus Aachen, Mülheim, Göttingen und Regensburg veranstaltet Alexander Pöthig (TU München) den „2nd Munich Crystallography Workshop“ im Zeitraum vom 4. bis 7. August 2025 an der TUM. Die Veranstaltung richtet sich an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit Vorkenntnissen in Kristallographie und Strukturanalyse.
https://www.crc.tum.de/crc/events/workshops/munich-crystallography-workshop

Organisiert von Eteri Svanidze (MPI CPfS Dresden) und Thomas Doert (TU Dresden) findet vom 1. bis 5. September die „6th International School on Aperiodic Crystals“ in Dresden statt. Der Kurs ist für ca. 60 Teilnehmende ausgelegt, die in Vorträgen und Tutorien den Umgang mit aperiodischen Kristallen erlernen wollen, von inkommensurabel modulierten Strukturen bis hin zu Quasikristallen.
https://www.cpfs.mpg.de/isac-6

Beide 2025er Veranstaltungen werden großzügig von der DGK unterstützt und für beide sind noch Anmeldungen möglich!

Alexander Pöthig (Garching) und Thomas Doert (Dresden)

Freiberg
Instruments

Unlock the Future of Spectral Analysis

Wide Range Double Prism Monochromator

Materials

Diamond, AlN, Ga_2O_3, SiC, GaN, ZnO, BN, AlGaN, InGaN, MgO and more

Learn more

DPM100

Extremely wide spectral range
(0.4 – 7.3 eV/170 – 3100 nm)

Spectral resolution
2 – 100 meV (depending on wavelength and slit width)

Excellent stray light suppression
$> 10^8$

Broadband illumination sources
LDLS, halogen and xenon lamps

Bericht des AK7 „Physikalische Kristallographie“

Der Arbeitskreis AK7 „Physikalische Kristallographie“ vereint Forschungsaktivitäten zur Analyse und Interpretation physikalischer Eigenschaften kristalliner Festkörper. Im Mittelpunkt steht die Aufklärung von Struktur-Eigenschafts-Beziehungen. Die Arbeiten reichen von Grundlagenforschung zur Aufklärung z. B. der elastischen, thermischen, optischen und piezoelektrischen Eigenschaften bis hin zu aktuellen Anwendungen in der Industrie. Die zuvor genannten Eigenschaften werden häufig vollständig tensoranalytisch beschrieben, wobei Symmetrieüberlegungen eine zentrale Rolle einnehmen. Das übergeordnete Ziel ist es daher, die physikalischen Eigenschaften in Abhängigkeit von Symmetrie, Kristallstruktur und atomaren Bindungsverhältnissen zu verstehen. Die Anwendung tensoranalytischer Methoden ermöglicht dabei eine konsistente Einbindung kristallographischer Symmetrie in die Formulierung physikalischer Gesetzmäßigkeiten – und erlaubt etwa die Vorhersage aktiver oder inaktiver Tensor-Komponenten in bestimmten Kristallsystemen.

Die Kristallphysik als interdisziplinäres Feld verbindet Konzepte aus Physik, Chemie, Materialwissenschaften und Mathematik. Sie ist damit nicht nur grundlagenorientiert, sondern auch entscheidend für die Entwicklung moderner Anwendungen in Akusto- und Optoelektronik, Sensorik, Quantenoptik und verwandten Technologien.

Ein aktueller Schwerpunkt des Arbeitskreises 7 liegt unter anderem auf der Untersuchung von piezoelektrischen Einkristallen und dem Verständnis ihrer temperturabhängigen piezoelektrischen Effekte im Hinblick auf ihre Kristallstruktur. Die experimentelle Bestimmung elektromechanischer Eigenschaften erfolgt z. B. mittels resonanter Ultraschallspektroskopie. Weitere Forschungsthemen umfassen z. B. temperatur- und druckinduzierte Phasenumwandlungen von Kristallen und die Auswirkungen auf ihre physikalischen Eigenschaften.

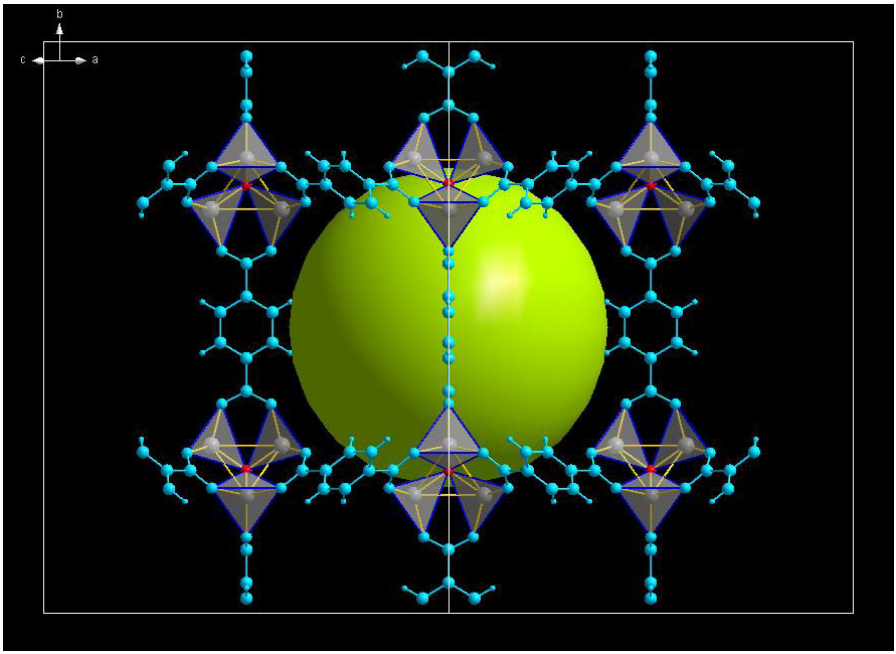
Auf der Jahrestagung 2025 in Hannover war der Arbeitskreis 7 mit einem eigenen Mikrosymposium vertreten, das mit rund 70 Hörern sehr gut besucht war. Dies unterstreicht weiterhin das Interesse an kristallphysikalischen Themen innerhalb der DGK.

Der Arbeitskreis versteht sich als offene Plattform für den interdisziplinären Austausch. Mitglieder aller Erfahrungsstufen – insbesondere auch Nachwuchswissenschaftler – sind eingeladen, sich aktiv zu beteiligen. Interessierte wenden sich bitte an den AK-Sprecher Eiken Haussühl (*haussuehl@kristall.uni-frankfurt.de*). Neue Ideen und Impulse zur Weiterentwicklung der Arbeitskreisthemen sind jederzeit willkommen.

Eiken Haussühl (Frankfurt)

DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Version 5.1

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

- Untermenü *Edit/Extended Selection* zur gezielten Auswahl von (Molekül-)Fragmenten oder von symmetrie-äquivalenten Atomen und Bindungen.
- *Build/Destroy* mit Kommandos zum Entfernen *nicht* ausgewählter Atome und Bindungen.
- *Copy Style* und *Paste Style* zur gleichzeitigen Übertragung von Eigenschaften mehrerer verschiedener Objekte (Atome, Bindungen etc.).
- Erstellung von *Design schemes* aus ausgewählten Fragmenten und Anwendung auf Fragmente anderer Strukturbilder, z.B. um verschiedenen organischen Linkern spezifische Farbschemata zuzuweisen.

Eine **neue Version 5.2** mit zusätzlichen Funktionen zum Arbeiten mit H-Brücken und nicht-bindenden Kontakten wird im 4. Quartal 2025 erscheinen. Sie ist für lizenzierte Nutzer der Versionen 5.0 und 5.1 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

Bericht des AK8 „Mineralogische Kristallographie“

Im Zuge der Neustrukturierung der Arbeitskreise der DGK wurde der AK8 „Mineralogische Kristallographie“ 2023 gegründet, um den vielfältigen kristallographischen Fragestellungen im Bereich geologisch-mineralogisch relevanter Materialien eine gemeinsame Plattform zu bieten. Bei der DGK-Jahrestagung 2024 in Bayreuth wurde Jun.-Prof. Dr. Clemens Prescher (Freiburg) zum Sprecher des AK gewählt.

Ziel des Arbeitskreises ist es, den Austausch an der Schnittstelle von Kristallographie, Mineralogie, Geowissenschaften und Materialforschung zu fördern. Thematisch deckt der AK ein breites Spektrum ab, von der Strukturaufklärung und Kristallchemie über Bildungs- und Umwandlungsprozesse bis hin zu funktionellen Eigenschaften von Mineralen und strukturell verwandten synthetischen Materialien. Dabei kommen sowohl experimentelle Methoden (z. B. bei Hochdruck- und Hochtemperaturbedingungen) als auch theoretische Ansätze wie die computergestützte Modellierung von Kristallstrukturen zum Einsatz.

Im Rahmen der DGK-Jahrestagung 2025 in Hannover diskutierte der AK mögliche Aktivitäten für die kommenden Jahre. Geplant sind unter anderem:

- das Sponsoring bzw. die Mitorganisation von Workshops,
- das Co-Sponsoring thematisch angrenzender Sessions (z. B. zu Elektronenbeugung, Kristallchemie oder Hochdruckforschung) zur Förderung der fachübergreifenden Zusammenarbeit mit anderen DGK-Arbeitskreisen,
- die aktive Ansprache potenzieller Beitragender für mineralogisch ausgerichtete Sessions,
- die stärkere Sichtbarkeit mineralogisch-kristallographischer Themen in geowissenschaftlichen Konferenzen wie Geo4Göttingen.

Alle Interessierten sind herzlich eingeladen, sich mit Ideen, Beiträgen und Initiativen an der Arbeit des Arbeitskreises zu beteiligen. Besonders willkommen sind Vorschläge für zukünftige Veranstaltungen, thematische Schwerpunkte oder Kooperationsmöglichkeiten mit anderen Fachrichtungen innerhalb und außerhalb der DGK.

Clemens Prescher (Freiburg)

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**

Bericht des AK9 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“

Nach der Neuorganisation der Arbeitskreise hat sich der AK9 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“ während der Jahrestagung in Bayreuth getroffen und uns, Claudia Weidenthaler (MPI für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr) und Andrea Kirsch (Ruhr Universität Bochum) als Sprecherin und deren Stellvertreterin, gewählt. Wir haben inzwischen auch die Mitgliederliste des Arbeitskreises aktualisiert und freuen uns 25 Mitglieder im AK begrüßen zu dürfen.

Der Arbeitskreis hatte die Möglichkeit, bei der Jahrestagung 2025 in Hannover vier Mikrosymposien zu den Themen „Functional materials I und II, Crystalline/non-crystalline/ disordered materials, und in situ/operando studies of functional materials“ zu organisieren.

Auch bei der Jahrestagung in Hannover kam der Arbeitskreis zusammen. Dabei wurde deutlich, dass sich der wissenschaftliche Nachwuchs nicht angesprochen fühlt, sich neben den „Young Crystallographers“ auch in den anderen Arbeitskreisen zu engagieren. Wir möchten junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler daher ausdrücklich dazu aufrufen, sich aktiv in allen Arbeitskreisen einzubringen und ihre wissenschaftliche Zukunft aktiv mitzugestalten.

Im Jahr 2024 hat kein Workshop des Arbeitskreises stattgefunden. Für das Jahr 2025 planen wir zusammen mit der Universität Bremen (MAPEX) vom 15. bis 18. September in Bremen einen Workshop zum Thema „Powder Pair Distribution Function (PDF) Analysis for Materials Science“. Die Details zur Anmeldung und das Programm werden in Kürze auf der Website der DGK veröffentlicht.

Claudia Weidenthaler (Mülheim an der Ruhr) und Andrea Kirsch (Bochum)

PERSONALIA

JUBILARE 2025

95 Jahre

Prof. Dr. Dietrich Babel	Marburg
Dr. Ulrich Klement	Regensburg

90 Jahre

Prof. Dr. Joachim Bohm	Berlin
Prof. Dr. Wilfrid Edgar Klee	Uppsala
Dr. Ali Kutoglu	Marburg
Prof. Dr. Ursula Steinike	Michendorf
Dr. Wolfgang Wilde	Berlin

85 Jahre

Dr. Hans Berger	Berlin
Dr. Udo Bogner	Regensburg
Prof. Dr. Martin Dräger	Mainz
Prof. Dr. Otto Ermer	Köln
Dr. Heinrich Fink	Kassel
Dr. Herbert E. Goebel	München
Prof. Dr. Hans Hartl	Berlin
Dr. Siegfried Heinrich	Stuttgart
Prof. Dr. Hartmut Jex	Ulm
Prof. Dr. Walter Jung	Köln
Prof. Dr. Volker Krämer	Freiburg
Prof. Dr. Herbert Kroll	Münster
Dr. Emil Makovicky	Kopenhagen
Prof. Dr. Peter Paufler	Dresden
Prof. Dr. Dieter Pohl	Hamburg
Kriemhild Reinecke	Berlin

80 Jahre

Dr. Roland Boese	Essen
Dr. Jürgen Kräußlich	Jena
Prof. Dr. Gerhard Materlik	Halstenbek
Prof. Dr. Helmuth Zimmermann	Erlangen

75 Jahre

Dr. Johannes G. Bednorz	Rüschlikon
Prof. Dr. Walter Großhans	Offenburg
Prof. Dr. Bernd Harbrecht	Marburg
Prof. Dr. Winfried Hinrichs	Greifswald
Dr. Helmut Klein	Göttingen
Nora Pätzke	Dresden
Prof. Dr. Gerhard Paul Raabe	Aachen
Prof. Dr. Werner Skrotzki	Dresden
Prof. Dr. Walter Steurer	Zürich

70 Jahre

Dr. Bernhard Anselment	Ludwigshafen am Rhein
Dr. Martin Ermrich	Reinheim
Dr. Helmar Görls	Jena
Prof. Dr. Juri Grin	Dresden
Dr. Uwe Hoppe	Rostock
Dr. Ulrich Lambert	Burghausen
Prof. Dr. Werner Lottermoser	Salzburg
Prof. Dr. Christian Robl	Münchberg
Dr. Michael Wendschuh	Bremen
Dr. Thomas Wroblewski	Hamburg

65 Jahre

Detlef Baukenkrodt	Dortmund
Dr. Martin Geiger	Saarbrücken
Thomas Gentner	Heidelberg
Prof. Dr. Robert Glaum	Bonn
Bernd Hippler	Mainz
Dr. Detlef Hofmann	Pula
Dr. Carsten Jürges	Kiel
Sigrid Kauter	Nürnberg
Dr. Gertraud Koellner	Berlin
Dr. Norbert Krauß	Groß Gievitz
Dr. Victor Lamzin	Hamburg
Harald Lehnert	München
Dr. Rolf Melzer	Berlin
Dr. Petra Luzia Schiebel	Ludwigsburg
Dr. Norbert Sieber	Frankfurt
Zahra Tavallai-Wolf	Karlsruhe
Dr. Edgar Weckert	Hamburg

VERSTORBENE MITGLIEDER

Steffen Sachsenröder
† 19. Mai 2024
Thaletec GmbH, Thale

Prof. Dr. Matthias Göbbels
† 28. Juni 2024
Lehrstuhl für Mineralogie der Universität Erlangen

Prof. Dr. Hans-Joachim Kleebe
† 4. Oktober 2024
Institut für Angewandte Geowissenschaften der Technischen Universität Darmstadt

Prof. Dr. Klaus Funke
† 21. Oktober 2024
Institut für Physikalische Chemie der Universität Münster

Prof. Dr. Harald Hillebrecht
† 26. Oktober 2024
Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Universität Freiburg

Prof. Dr. Rüdiger Kniep
† 26. Oktober 2024
Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe

Prof. Dr. Moritz Wolfgang
† 29. Oktober 2024
Department für Geo- und Umweltwissenschaften der Universität München

Dr. Ulrich Benedict
† 16. November 2024
JRC Karlsruhe

Prof. Dr. Heinz Hermann Schulz
† 1. Dezember 2024
Department für Geo- und Umweltwissenschaften der Universität München

Peter Stünkel
† 15. Februar 2025
Gymnasium Goetheschule Hannover

Prof. George M. Sheldrick
† 20. Februar 2025
Institut für Anorganische Chemie der Universität Göttingen

Prof. Dr. Horst Küppers
† 9. Mai 2025
Institut für Geowissenschaften der Universität Kiel

Prof. Dr. Rolf Hilgenfeld
† 19. Juni 2025
Institut für Biochemie der Universität zu Lübeck

LIESELOTTE-TEMPLETON-PREISE 2025

Der folgende Text entspricht der Laudatio, die anlässlich der Vergabe des Lieselotte-Templeton-Preises auf der 33. DGK-Jahrestagung am 10.03.2025 verlesen wurde:

Sehr geehrte Frau Vorsitzende, liebe Kolleginnen und Kollegen,
sehr geehrte Damen und Herren, liebe Preistragende,

ich habe heute wieder die Freude, im Namen des Lieselotte-Templeton-Preis-Komitees, den Lieselotte-Templeton-Preis an junge Nachwuchswissenschaftler zu vergeben. Das Preiskomitee besteht aus insgesamt fünf Mitgliedern. In diesem Jahr sind dies: Tobias Beck, Holger Kohlmann und ich, der Vorsitzende der Jungen Kristallographen, Florian Meurer, und *ex officio,* die Vorsitzende unserer Gesellschaft, Ute Kolb.

Wir freuen uns sehr, diesen Studierenden-Preis im Namen unserer Gesellschaft auch in diesem Jahr wieder vergeben zu können. Der Lieselotte-Templeton-Preis soll die besten Abschlussarbeiten eines Jahres im Bereich der Kristallographie auszeichnen. Unsere Gesellschaft ehrt mit diesem Preis jährlich bis zu drei NachwuchswissenschaftlerInnen in einem frühen Stadium ihrer Karriere.

Ich möchte daran erinnern, dass der Preis den Namen der deutschen Kristallographin Lieselotte Templeton trägt. Ihre Arbeiten an der *University of California* in Berkeley zu Absorptionskorrektur, Röntgendichroismus und anomaler Dispersion beeinflussten insbesondere Proteinkristallographen, Chemiker und Physiker. Zudem war sie den jungen Studierenden durch ihre herzliche Persönlichkeit bekannt. Sie vereinte also wissenschaftliche Schaffenskraft und das Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs. In diesem Sinne wollen wir heute den Preis in ihrem Namen für drei herausragende Masterarbeiten verleihen.

Insgesamt sind sechs sehr spannenden Vorschläge eingegangen. Im Rahmen der Evaluierung hatten wir damit die Freude, in andere Arbeitsgebiete und Themen einzutauchen und auch dazuzulernen. Am Ende des Evaluierungsprozesses lag auch diesmal wieder ein einstimmiges Votum vor.

Bevor ich nun zur Verkündung und Kurzvorstellung der diesjährigen Preisträger 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 wir möchten Sie gleichzeitig motivieren auch für das nächste Jahr herausragende Vorschläge einzureichen.

Kommen wir nun zu den diesjährigen Preisträgern. Dies sind:
- Herr M. Sc. Lukas Brüning von der Universität zu Köln,
- Herr M. Sc. Daniel Brüx von der RWTH Aachen und
- Herr M. Sc. Niklas Langer von der Universität Leipzig.

Lassen Sie mich jeweils kurz die drei Honorees würdigen.

LUKAS BRÜNING

Herr Brüning wird für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem Titel „Hochdrucksynthese von binären und ternären Nitriden der Hauptgruppenelemente“ ausgezeichnet. Die Arbeit fertigte er in der Arbeitsgruppe von Maxim Bykov am Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Universität zu Köln an. Herr Brüning studierte Chemie.

Stickstoff macht etwa 78 % der Erdatmosphäre aus und findet sich in Düngemitteln und vielen chemischen Industrieprozessen. Trotz seiner weiten Verbreitung ist Stickstoff weitgehend inert und trägt nur geringfügig zum Masseanteil der Erdhülle bei, während dagegen Sauerstoff etwa 50 % ausmacht. Aufgrund der Inertheit des N_2-Moleküls stellt Stickstoff eine Herausforderung für die Chemie dar, was dazu führt, dass Nitride im Vergleich zu Oxiden weniger gut charakterisiert sind. Das Interesse an stickstoffbasierten Verbindungen ist in den letzten Jahren und Jahrzehnten gestiegen – einerseits aufgrund der hohen Härte des cBN oder der Carbonitride, andererseits wegen des GaN, welches in LEDs oder in der Leistungselektronik im Energiespeicher-Bereich Anwendung findet.

Um die Reaktivität des Stickstoffs zu erhöhen, hat Herr Brüning nun die Hochdrucksynthese eingesetzt und sich besonders die Nitride angeschaut. Hierzu nutzte er Diamantstempelzellen, Drücke im Bereich von 50 GPa, das Laserheizen mit Temperaturen von mehreren tausend Kelvin und die *In-situ*-Röntgendiffraktion mit Synchrotronstrahlung. So gelang Herrn Brüning, bereits schon vor seiner Masterarbeit, vollständig deprotoniertes Nitridocarbonat, das dem Stickstoffanalogon des Carbonat-Anions entspricht, zu synthetisieren und dieses in der Zeitschrift „Angewandte Chemie“ zu publizieren. Darauf aufbauend forschte Herr Brüning in seiner Masterarbeit dann weiter an ternären Verbindungen, die zu weiteren, reproduzierbaren Kristallstrukturen mit dem Nitridocarbonat-Anion führten und durch zweidimensional polymerisierte Netzwerke erweitert wurden.

Herr Brüning untersuchte die Systeme Bi–N, Bi–C–N und As–C–N und entdeckte mindestens fünf neuen Verbindungen. Zudem fand er Synthesewege, die einerseits zu Verbindungen führten, die vollständig deprotonierte $[CN_3]_5$-Guanidinat-Anionen enthalten, und andererseits zu copolymerisierten Triazin-Guanidin-Netzwerken führten. Insgesamt stellt die Arbeit die Etablierung einer anorganischen Nitridocarbonat-Familie mit sp^2-hybridisiertem Kohlenstoff dar, die mit klassischen Polykondensationsreaktionen konkurrieren kann.

Herr Brüning nahm im Rahmen seiner Arbeit an sechs Synchrotronstrahlzeiten teil, sowohl an P02.2 bei DESY (Hamburg) als auch an der ID15b und ID27 bei der ESRF (Grenoble in Frankreich). Herr Brüning untersuchte über 80 verschiedene Kristalle, bis er die Kristallstrukturen lösen und verfeinern konnte. Dem von ihm eröffneten neuen Gebiet der Polynitride widmet er sich nun im Rahmen seiner begonnenen Dissertation.

Sein Betreuer, Maxim Bykov, schreibt über ihn: „Er kam kurz vor Beginn seines Masterstudiums für ein kurzes 6-wöchiges Praktikum zu meiner Gruppe und beeindruckte mich sofort mit seiner Neugier, seinem Engagement und seiner Fähigkeit, kreativ zu denken.“

Diese Neugier, das Engagement und die Kreativität haben uns ebenso an seiner Arbeit beeindruckt, sodass wir uns freuen, Herrn Brüning nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2025 zu übergeben.

DANIEL BRÜX

Herr Brüx wird für seine Arbeiten im Rahmen seiner Masterarbeit mit dem Titel „Erstellung und Analyse einer Benchmark-Datenbank für Einkristall-Röntgenbeugungsexperimente“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Florian Kleemiß am Institut für Anorganische Chemie der RWTH Aachen an. Herr Brüx hat Chemie studiert.

Wie sie alle sicherlich bereits wissen, hat die UN-Generalversammlung dieses Jahr, 2025, zum „Internationalen Jahr der Quantenwissenschaft und Quantentechnologien“ ausgerufen. Passend dazu hat Herr Brüx sich in seiner Arbeit mit der Quantenkristallographie beschäftigt. Hierbei werden kristalline Materialien im Rahmen der Quantenmechanik untersucht, wobei Größen wie Wellenfunktion, Elektronenladungsdichte und damit zusammenhängende Eigenschaften, wie elektrisches Potenzial, elektrische oder magnetische Momente, Elektronenlokalisierungsfunktion, analysiert und im Positions- oder Impulsraum dargestellt werden. Die Quantenkristallographie kombiniert dazu theoretische Methoden mit experimentellen Daten.

Im Rahmen seiner Arbeit hat sich Herr Brüx nun der Frage gewidmet, welche Modelle, also die Auswahl an Parametern, während der quantenchemischen Rechnungen im Rahmen der Hirshfeld-Atom-Verfeinerung auf Basis von Einkristall-Röntgenbeugungsdaten die besten Ergebnisse liefern und als allgemeine „Best Practice“-Empfehlung gelten sollten. Die Hirshfeld-Partitionierung ist eine Methode zur Behandlung asphärischer Elektronendichteverteilungen, wobei die Atomformfaktoren aus einer quantenmechanischen Berechnung stammen.

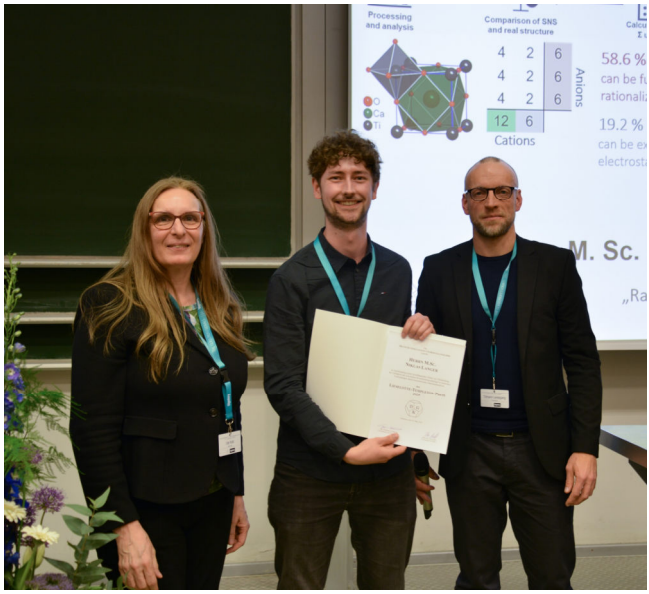
Um die Datenbasis für eine solche Empfehlung zu schaffen, generierte Herr Brüx insgesamt 13 hochwertige Datensätze in Ladungsdichtequalität, aufgenommen an kleinen synthetisierten organischen Molekülen der Stoffklasse der Aminosäuren mittels eines Mikrofokus-*Sealed-Tube*-Diffraktometers. Diese Daten hat er anschließend jeweils mit allen Permutationen der Optionen in der Verfeinerungssoftware NoSpherA2 verfeinert, was zu über 14.000 Strukturmodellen pro Datensatz führte. Diese umfangreichen Daten hat er dann mithilfe statistischer Ansätze analysiert, neue Güteparameter entwickelt und Vergleiche zu Neutronenbeugungsdaten für die Lokalisierung der Wasserstoffatome angestellt. So konnte er ein Qualitätsranking erstellen, allgemeine Trends aufzeigen und darlegen, dass Hartree-Fock-Rechnungen eine systematisch bessere Verfeinerung liefern als jene mittels Dichtefunktionaltheorie. Mit seiner Arbeit gibt Herr Brüx nun eine systematische, datenbasierte Empfehlung für die „Best Practice“ in der Quantenkristallographie für die asphärische Verfeinerung nach dem Hirshfeld-Schema.

Sein Betreuer, Florian Kleemiß, schreibt: „Herr Brüx hat im Rahmen dieser Arbeit ein hervorragendes Geschick bei der Durchführung von Beugungsexperimenten bewiesen, ein tiefes Verständnis für die […] Mechanismen und Gleichungen gezeigt und eine fundamentale Frage durch eine unanfechtbare Datengrundlage mit einer eleganten Umgangsweise mit großen Datenmengen beantworten können.“

Ob dies tatsächlich eine *unanfechtbare* Datengrundlage ist, können wir als Preiskomitee nicht sagen. Wohl aber, dass uns die umfassende, detailreiche und akribische Vorgehensweise sowie die kreative und verständliche Art der Darstellung der großen Datenmengen überzeugt hat.

Daher freuen wir uns, Herrn Brüx nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2025 zu übergeben.

NIKLAS LANGER



Herr Langer wird für seine Masterarbeit mit dem Titel „Rationalisierung und Vorhersage der Struktur von Festkörpern durch computergestützte Anwendung kristallchemischer Regeln“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Holger Kohlmann, am Institut für Anorganische Chemie und Kristallographie, der Universität Leipzig an. Herr Langer hat sowohl Chemie als auch Mineralogie und Materialwissenschaft studiert und jeweils erfolgreich einen Masterabschluss erhalten.

Seinem Wunsch, verschiedene Fachbereiche zu kombinieren, kam Herr Langer auch im Thema seiner Chemie-Masterarbeit nach. Hier kombinierte er Strukturchemie, Informatik und theoretische Chemie, um ein grundlegendes Verständnis ionischer Festkörper mithilfe *einfacher* kristallchemischer Regeln zu erreichen.

Das Verständnis und die Vorhersage von Kristallstrukturen und deren Eigenschaften sind für die systematische Suche nach neuen Funktionsmaterialien von enormer Bedeutung. Neben quantenmechanischen Berechnungen sind vor allem empirisch aufgestellte Regeln bedeutsam, da sie auch für amorphe Verbindungen angewendet werden können. Beispiele dafür sind die Pauling’schen Verknüpfungsregeln und die erweiterte Koordinationszahlregel nach Beck. Bisher wurde die allgemeine Anwendbarkeit jedoch nur für die Pauling-Regeln untersucht, nicht aber für die Beck’sche Erweiterung. Diese besagt in ihrer einfachsten Form, dass in einer ionischen Verbindung die Summen der Koordinationszahlen von Kationen und Anionen identisch sein müssen. Ist ein Teil der Koordinationszahlen in einer Kristallstruktur bekannt, kann über diese Gleichung der Rest der Koordinationen vorhergesagt werden. Die nach der erweiterten Koordinationszahlregel wahrscheinlichste Koordination ist dabei durch die numerisch einfachste Lösung gegeben.

Hierzu führte Herr Langer nun eine computergestützte Auswertung von Kristallstrukturen ternärer Verbindungen durch, um insbesondere die Regelerweiterung zu validieren und ihre Anwendbarkeit zu überprüfen. Dazu automatisierte er den Validierungsvorgang, vom Auslesen der Strukturen aus Datenbanken, über das Ableiten kristallchemischer Größen, bis hin zur quantitativen Beurteilung der Ergebnisse. Als Testdatensätze verwendete er die Kristallstrukturen aller in der ICSD enthaltenen ternären Fluoride und Oxide, wovon 5000 hochqualitative Datensätze in seine Betrachtungen eingingen.

Im Ergebnis seiner Arbeit konnte Herr Langer zeigen, dass die numerisch einfachste Lösung in 63 % der Fälle der untersuchten Strukturen in der Lage ist, die Atomkoordinationen korrekt vorherzusagen. In weiteren 18 % der Kristallstrukturen konnte er zeigen, dass die Abweichung davon über die sogenannte *elektrostatische Unausgeglichenheit*, eine Kenngröße zur Quantifizierung der Ladungsverteilung, erklärbar ist.

Seine Erkenntnisse hat Herr Langer nach Fertigstellung seiner Masterarbeit in einem Forschungsprojekt an der TU Dresden im Bereich *Machine Learning* für Thermoelektrika eingesetzt. Durch ein eingeworbenes Kekulé-Stipendium des Fonds der Chemischen Industrie wird Herr Langer im Rahmen seiner Promotion das Thema seiner Masterarbeit nun vertiefen.

Sein Betreuer, Holger Kohlmann, schreibt: „Neben der Originalität und Kreativität des Forschungsansatzes, der Qualität der Auswertungen und wissenschaftlichen Ergebnisse beeindruckt auch deren weit überdurchschnittliche Quantität. Herr Langer […] zählt zur Spitzengruppe der von mir betreuten MasterandInnen…“

Auch uns im Komitee hat die Quantität und Qualität sowie die Verknüpfung der einzelnen Fachbereiche in der Arbeit überzeugt. Daher freuen wir uns, Herrn Langer nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2025 zu übergeben.

Wer mehr zu den drei Preisträgern erfahren möchte, ist herzlich zum Lieselotte-Templeton *Award Symposium* der *Young Crystallographers*, am Mittwoch, um 15:00 Uhr, in den Raum F128 eingeladen.

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

Tobias Beck (Universität Hamburg),
Holger Kohlmann (Universität Leipzig),
Tilmann Leisegang (TU Bergakademie Freiberg),
Florian Meurer (Universität Regensburg),
Ute Kolb (Johannes Gutenberg Universität Mainz)

Max-von-Laue-Preis 2025 an Nicholas Pearce

in Anerkennung seiner bedeutsamen Arbeiten zur innovativen Datenanalyse von multiplen Datensätzen zur Extrahierung von schwachen Unterschieden und Dynamiken in Proteinkristallen

Normally a *laudatio,* as part of the program of the *"Ehrenabend der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie"*, should be held in German. However, since this year's recipient of the Max von Laue prize does not speak German, we have decided to deliver it in English:

Dear Nick, dear members of the prize committee, dear friends and colleagues,

I am deeply honored to congratulate Nicholas Pearce as the recipient of this year's Max von Laue prize of the DGK. This prize honors outstanding achievements by early career researchers in the field of crystallography.

Nick is British and studied physics at the University of Oxford. He completed his Master in 2012, and then changed into Biomedical Sciences. In his dissertation entitled "Multi-dataset electron density analysis methods for X-ray crystallography", he embarked on what he is most well-known for today: The analysis and extraction of minor states in crystalline samples from data that often contain more noise than signal. He defended his dissertation in 2016 and went on to the Netherlands as a postdoc. From there, he moved in 2022 to Sweden and took up a position as professor at the University of Linköping, supported by a Data Driven Life Science Fellowship from SciLifeLab and the Knut and Alice Wallenberg Foundation.

At the time when Nick embarked on his doctoral work, structural genomics was in full swing, and the use of crystallography for high-throughput ligand screening purposes was becoming an established method. Due to technological developments at synchrotrons, in computational methods and in detector technology etc. complete diffraction data sets could now be automatically collected in minutes, meaning that within a single 24-hour beam time at a synchrotron it was now possible to collect data sets from several hundred samples. This opened the door to efficient *ligand screening*.

In protein crystallography, ligand screening means that protein crystals are soaked with solutions of small organic molecules. One protein crystal is soaked with one or several organic compounds. This is done several hundred times with different compounds. Diffraction data sets are collected from each and every crystal to determine whether the small molecule has bound to the target protein, and if so, where it has bound. This is typically done by calculating a difference electron density map, where the map coefficients constitute the amplitude differences between bound and unbound states.

For the non-protein crystallographers in the audience, this screening step constitutes a very important step in the early stages of a drug discovery project: Here, we can learn what may bind a protein and hence, influence its function. Almost all drugs work by binding proteins in the body or in pathogens – for example, aspirin inhibits an enzyme called cyclooxygenase-II, which in turn dampens a pain cascade in the body by hindering the synthesis of pain-inducing eicosanids.

Now, this electron density difference density analysis works best if bound and unbound states have a high degree of isomorphism, meaning that they differ only where the small molecule has bound, but not in overall conformation of the protein or crystal lattice. If other changes are happening upon ligand binding to the protein, this becomes a limiting factor to the method. An additional problem arises as the organic compound may not bind in all unit cells: it may be present with only partial occupancy, or be flexible in its own conformation, leading to an unclear “ligand pose”.

The basic assumption for Nick’s work was that a screening experiment yields several hundred data sets, which are mostly similar in their information content. The information of interest differs between crystals but is only a small contribution to the overall signal for each crystal – imagine 20 atom positions of a ligand against several thousand of the protein – and against the comparatively large noise background which protein diffraction data sets normally contain. What if we could leverage the entirety of all data sets from a screening experiment to improve the detection limit for partially occupied states in each individual crystal?

This is exactly what Nick did. In his program PanDDA, which stands for pan-data set density analysis, he computes an average unbound state by superimposing electron density syntheses from many unbound data sets and then uses this to remove the contribution of this average unbound state from electron density maps derived from crystals which are a mix of bound and unbound states. By doing this, he expands the detection limit from easy-to-find higher- to lower-occupancy states that would otherwise go unnoticed and hence the information would be lost for subsequent experiments. For the screening-by-crystallography method this approach was a real game changer.

This is reflected by the fact that the PanDDA publication in Nature Communications has so far been cited 288 times with an Altmetric Score of 84. Nick's algorithms have helped countless drug development efforts, many of which have not been published as they were conducted for commercial purposes.

I have known Nick since my own PhD, and what can I say…? Well, he can be very cynical and very funny. He is loyal to a fault, and a very good researcher, who really made a difference to what we can do with protein crystallography today with a rare understanding of biology, computational methods and physics. He likes thermodynamics and well-designed graphics. He gives excellent talks. Nick continues his studies on identifying minor states in protein crystals in his current position in Sweden: PanDDA is only the beginning of what might be possible.

He loves memes, plants and his two (really adorable!) children, whom he brings unapologetically to conferences, which I admire. He likes to see things and people grow and is an excellent mentor for his group members. He has chaired a CCP4 Study Weekend, a major conference in our field, he was the chair of a microsymposium of the IUCr-2021 congress and a co-chair of a Gordon Research Seminar on Diffraction Methods. He is also co-authoring the 4th edition of the crystallography textbook "Crystallography Made Crystal Clear", which is one of the most popular beginners' texts in macromolecular crystallography.

Taking all this together, it is my strong belief that Nick is a worthy recipient of the 2025 Max von Laue prize of the German Crystallographic Association DGK, and an excellent representative of the next generation of protein crystallographic methods developers. I am really looking forward to his talk next year!

Congratulations for receiving the Max von Laue prize of the DGK, Nick!

Andrea Thorn (Hamburg) and Manfred Weiss (Berlin)

Will-Kleber-Gedenkmünze 2025 an Regine Herbst-Irmer

in Anerkennung ihrer herausragenden und methodenübergreifenden Forschung zur Analyse von Zwillingen und deren Einfluss auf die Strukturbestimmung in komplexen kristallinen Materialien

Ladies and Gentlemen, dear colleagues,

It is a distinct honor and a true privilege to stand before you today as we celebrate the remarkable achievements of Dr. Regine Herbst-Irmer, an outstanding scientist whose contributions have shaped modern crystallography. This moment is historic, not only because we recognize a scientist of extraordinary merit but also because, for the first time since its establishment in 2008, the Will-Kleber-Gedenkmünze is awarded to a woman. And there could be no more deserving recipient of this distinction than Dr. Regine Herbst-Irmer.

For decades, Regine has been a driving force in chemical crystallography, setting new standards in the treatment of twinning, data refinement, and structure validation. Her work has provided the global crystallographic community with powerful tools and methodologies, enabling precise and reliable structure determinations even in the most challenging cases.

One of her most transformative contributions lies in the treatment of twinned structures. She has turned what was once considered an unsolvable problem into a standard practice in crystallography. By demonstrating the powerful capabilities of the TWINABS software, originally developed by George Sheldrick, for the accurate treatment of twinned crystal structures, she significantly advanced its application in crystallography, enabling the accurate interpretation of even the most complicated datasets.

Yet, her impact extends beyond twinning. She has fundamentally advanced high-resolution data quality and charge density analysis. She has pioneered methods for the anisotropic modeling of hydrogen atoms and introduced cross-validation techniques for multipole refinements, allowing scientists to detect overfitting and ensuring the highest precision in charge density studies. Through her innovative methodologies, she has expanded the limits of what is possible in crystallographic research, providing the community with powerful tools to explore electronic structures with unprecedented accuracy.

Her commitment to scientific excellence is rivaled only by her dedication to education and mentorship. For those of us fortunate enough to work with Regine, she is not just a scientist, she is a teacher, a mentor, and an inspiration. Her influence extends far beyond her research group, as she has played a key role in shaping the next generation of crystallographers through lectures, doctoral training, and specialized courses on small-molecule structure determination, disorder, and twinning.

To work with Regine means to learn from her, to be challenged, guided, and ultimately to grow into a better scientist. Within our institute, particularly among those who work with her daily and were members of the former Stalke group, we express our deep admiration and gratitude for her dedication in a very special way: Every crystal structure must be “Regined”. This term has become a hallmark of our scientific culture. If a structure has been “Regined”, we know it has been refined and analyzed at the most rigorous scientific level. No crystal structure is too complex, no dataset too complicated, Regine finds a way. For the last few years, I have had the privilege of working with her and learning from her, and I know that I am not alone in saying that she has not only made us better crystallographers but also better people.

But her passion for teaching is not confined to academia. She supports her husband in inspiring the next generation of scientists, reaching out to schoolchildren to ignite their curiosity for crystallography. They actively write educational papers, organize events, and develop engaging ways to make science accessible to young minds. Her efforts in scientific outreach and education ensure that crystallography does not remain within the walls of universities and research institutes but continues to inspire and attract the brightest minds of the future.

When I asked Regine if there was anything in particular, she would like me to mention today, she immediately spoke of the role that Prof. George Sheldrick played in her academic career. She feels that without his support, she would not be where she is today. George gave her the opportunity to work in this field, encouraged her to attend conferences, and became both a mentor and a friend. This reflection came at a meaningful moment, as it coincided with George’s passing, a reminder of how deeply mentorship can shape a scientific career. It is a legacy that Regine now carries forward through her own commitment to guiding and inspiring young crystallographers.

Dear Regine, today, as we honor you with this award, we celebrate not only your outstanding scientific contributions but also your spirit of collaboration, mentorship, and excellence. Your work has transformed crystallography, and your generosity and dedication continue to shape its future.

It is with the greatest respect and admiration that we recognize you today as the recipient of the Will-Kleber-Gedenkmünze. Herzlichen Glückwunsch!

Anna Krawczuk (Göttingen)

Carl-Hermann-Medaille 2025 an Udo Heinemann

für seine wissenschaftlichen Beiträge zum Verständnis von Nukleinsäure-Protein-Wechselwirkungen, seine Verdienste beim Aufbau hochmoderner Diffraktionsmessplätze am BESSY II Synchrotron in Berlin sowie für seinen unermüdlichen Einsatz für die Kristallographie in Deutschland und in Europa

Sehr geehrte Damen und Herren, liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist mir eine ausgesprochene Freude die Laudatio für den diesjährigen Preisträger der Carl-Hermann-Medaille der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie, Prof. Udo Heinemann, zu halten. Die Carl-Hermann-Medaille ist die höchste Auszeichnung, die die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie auf dem Gebiet der Kristallographie vergibt. Die Medaille soll das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten ehren.

Durch die Vergabe des Preises an Prof. Heinemann für seine wissenschaftlichen Erfolge bei der Aufklärung von DNA/RNA-Protein-Wechselwirkungen, seine Verdienste beim Aufbau hochmoderner Diffraktionsmessplätze am BESSY II Synchrotron in Berlin, sowie für seinen unermüdlichen Einsatz für die Kristallographie in Deutschland und in Europa wird die Intention der Medaille in besonderem Maße realisiert.

Udo Heinemann studierte Chemie an der Georg-August-Universität in Göttingen und promovierte 1982 an derselben Universität. Seine Promotionsschrift fertigte er in der Arbeitsgruppe von Prof. Wolfram Saenger am Max-Planck-Institut für Molekulare Medizin in Göttingen an, einem Wegbereiter der Proteinkristallographie und Strukturbiologie in Deutschland, welcher 2004 selbst mit der Carl-Hermann-Medaille der DGK ausgezeichnet wurde.

Nach einem 3-jährigen Postdoktorandenaufenthalt in der Arbeitsgruppe von Prof. Richard E. Dickerson am Institut für Molekularbiologie der *University of California* in Los Angeles wechselte Udo Heinemann als Hochschulassistent an den Lehrstuhl von Prof. Wolfram Saenger ans Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin.

Er habilitierte 1989 im Fach Biochemie und wurde, nach einer Vertretungsprofessur an der Universität Stuttgart, 1993 zum Leiter der Strukturbiologie des Max-Delbrück-Centrums für Molekulare Medizin in Berlin-Buch ernannt. Im Jahr 1995 erhielt er gleichzeitig einen Ruf auf eine C4-Professur für Proteinkristallographie am Fachbereich Chemie der Freien Universität Berlin. 2021 wechselte Udo Heinemann in den wohlverdienten Ruhestand.

Die wissenschaftlichen Leistungen von Udo Heinemann sind immens und spiegeln sich in über 240 wissenschaftlichen Publikationen wider. Laut *Web-of-Science*-Datenbank wurden diese insgesamt über 12000-mal zitiert.

In seiner Forschung fokussierte sich Udo Heinemann auf die Erforschung der Strukturbiologie von Protein-DNA/RNA-Wechselwirkungen. Ein Schwerpunkt in seinen frühen Jahren als Leiter einer unabhängigen Forschungsgruppe war die Strukturaufklärung reiner DNA- und RNA-Fragmente mit Fokus auf deren geometrische Feinstruktur. Auf diesem Gebiet hat er sich in kürzester Zeit beachtliche internationale Anerkennung erworben. Unter anderem beschäftigte er sich in einer engen Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Mathias Sprinzl von der Universität Bayreuth mit der Frage, welche Rolle die Feinstruktur des t-RNA-Akzeptor-Stamms bei der spezifischen Erkennung von tRNAs durch tRNA-Synthetasen spielt.

Vielleicht noch signifikantere wissenschaftliche Erfolg erzielte Udo Heinemann mit der Untersuchung von Protein-DNA- und Protein-RNA-Wechselwirkungen. Dokumentiert ist dies durch eine Vielzahl an Veröffentlichungen in hochrangigen Journalen wie z. B.: *Nature, Nature Communications, Nature Structural & Molecular Biology, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* usw. Ein Protein hat es ihm dabei besonders angetan, nämlich das bakterielle Major-Cold-Shock-Protein. Bei diesem Protein interessierte ihn nicht nur die Struktur und seine DNA-Wechselwirkungen, sondern auch die atomaren Grundlagen für dessen extreme Hitzestabilität in thermophilen Organismen im Vergleich zur moderaten Stabilität des Proteins in mesophilen Organismen.

Für Udo Heinemann war die Strukturaufklärung nie ein Selbstzweck. Sein Bestreben war es immer, mithilfe der Strukturbiologie ein atomares Verständnis für die gesamten biologischen Prozesse, an denen die Proteine beteiligt sind, zu gewinnen. Eine Arbeit von vielen von Udo Heinemann, aus der dies besonders gut hervorgeht, ist ein vorletztes Jahr erschienener Artikel im Journal *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. In dieser Arbeit legte er den Mechanismus dar, mithilfe dessen die Funktion der humanen AAA+ ATPase p97 durch die Bindung von Adapterproteinen moduliert wird. Er zeigte, wie die Bindung eines Adapter-Proteins die Rekrutierung der Metastasen-fördernden Methyltransferase METTL21D ermöglicht. Im Wechselspiel methyliert diese (METTL21D) anschließend die AAA+ ATPase p97 und verändert hierdurch auf Dauer deren Funktion.

Seine wissenschaftliche Neugier führte ihn auch auf das Gebiet der *Structural Genomics*. Im Zuge der von ihm 1998 mit-initiierten *Structural-Genomics*-Initiative in Berlin publizierte Udo Heinemann eine Vielzahl an Artikeln, in denen neue methodische Ansätze vorgestellt wurden, um strukturbiologische Forschung zu systematisieren und somit einem größeren Kreis an Forschungsgruppen zugänglich zu machen. Ein gutes Beispiel hierfür ist eine Publikation in *Nature Methods,* welche bis zum heutigen Tag über 640-mal zitiert wurde. Weitere Arbeiten, welche sein Bestreben der „Demokratisierung der strukturbiologischen Forschung" weiter unterstreichen, sind die Entwicklung von Computerprogrammen zur Automatisierung der Auswertung von Diffraktionsdatensätzen, wie z. B. das Programm XDSAPP.

Udo Heinemann war treibende Kraft bei der Einwerbung und, als wissenschaftlicher Koordinator mitfederführend, bei der erfolgreichen Durchführung eines einzigartigen und vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten *Structural-Genomics*-Projekts (Leitprojektverbund *Strukturanalyse mit hohem Durchsatz „Proteinstrukturfabrik" für medizinisch relevante Proteine* des BMBF, 1998–2004). Im Zuge dieses Projekts konnten drei für die makromolekulare Kristallographie maßgeschneiderte Diffraktionsmessplätze bzw. Beamlines am BESSY II Synchrotron in Berlin aufgebaut werden. Diese Beamlines, betrieben durch das Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) für Materialien und Energie in Berlin, bieten bis zum heutigen Tag einer Vielzahl an nationalen und internationalen Kristallographiegruppen *State-of-the-art*-Messmöglichkeiten an. Sie stellen bis zum heutigen Tag eine vielgenutzte Ressource für die makromolekulare Kristallographie dar und, gemessen an der Zahl der in der Protein-Datenbank (PDB) jährlich hinterlegten Datensätze, gehören diese Beamlines zu den produktivsten weltweit.

Obwohl die Förderung des ursprünglichen Projekts 2004 auslief, prägte die aus dem Projekt entstandene Infrastruktur nachhaltig die Entwicklung der makromolekularen Kristallographie am Standort Berlin. Es ist keineswegs vermessen zu behaupten, dass die von Udo Heinemann initiierten Infrastrukturprojekte das Fundament dafür gelegt haben, dass Berlin heute ein weltweit herausragender Standort für Strukturbiologie ist.

Udo Heinemanns außerordentliches Engagement für die Strukturbiologie spiegelt sich auch in den verschiedenen Positionen wider, die er in den Gremien der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) innehatte. Neben Gutachterfunktionen bei SFBs und GRKs, war Udo Heinemann insgesamt 10 Jahre lang Mitglied des DFG-Fachkollegiums „Basic Research in Biology and Medicine". Diese Mitgliedschaften zeugen eindrücklich von der nationalen und wissenschaftlichen Anerkennung, die Udo Heinemann auf seinem Forschungsgebiet, nämlich dem Gebiet der Proteinkristallographie und Strukturbiologie, in Deutschland zuteilwurde.

Viele hier im Saal kennen Udo Heinemann seit vielen Jahren sehr gut, und zwar als Folge seines außerordentlichen Engagements für die Kristallographie in Deutschland und darüber hinaus. Seit seiner Zeit als Nachwuchswissenschaftler hat er sich kontinuierlich für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie (DGK) engagiert. So war Udo Heinemann über sechs Jahre Mitglied und viele Jahre auch Vorsitzender des Nationalkomitees der DGK. Von 2009 bis 2012 stand er der DGK als Vorsitzender vor. Darüber hinaus hat er sich über viele Jahre hinweg bei der *European Crystallographic Association* (ECA) eingebracht. Und dieses Engagement kulminierte in den Jahren 2018 bis 2021 – in dieser Zeit war Udo Heinemann Präsident der ECA.

Aber damit nicht genug, Manfred Weiss hat mir vor einigen Tagen erzählt, dass Udo Heinemann mitverantwortlich dafür ist, dass die IUCr-Tagung 2029 in Deutschland stattfinden wird. Die ersten Überlegungen hierzu sind 2017 von Wulf Depmeier, Udo Heinemann und Manfred Weiss bei der DGK-Tagung in Göttingen angestellt worden. Dass an jenem Abend alle ein bisschen angeheitert waren, sollte ich aber bitte nicht erwähnen.

Bitte erlauben Sie mir zum Schluss auch ein paar persönliche Worte zu Udo Heinemann als außergewöhnlichen Menschen zu sagen. In den Jahren 1996 bis 2001 habe ich bei Udo habilitiert. Ich habe damals von Amerika aus eine Habilitationsstelle gesucht, und obwohl Udo mich vorher nicht gekannt hat, hat er mir eine solche Stelle angeboten und mich mit einem großen Vorschub an Vertrauen in seine Arbeitsgruppe aufgenommen. Dies war ein großer Glücksfall für mich. Für die großzügige Gastfreundlichkeit und die menschliche Herzlichkeit, mit der Udo und seine Frau Vera, meine Familie und mich damals in Berlin empfangen haben, bin ich ihm bis zum heutigen Tag sehr dankbar. Aber wir waren kein Sonderfall, sondern es war Udo zeit seiner wissenschaftlichen Karriere immer ein großes Anliegen, junge Menschen zu unterstützen und zu fördern.

Alle die Udo kennen, wissen, dass er vielseitige Interessen hat, welche sich weit über die Strukturbiologie hinaus erstrecken. Zum Beispiel ist Udo ein sehr belesener Mensch. Mich hat er eines Tages überrascht, indem er beiläufig erwähnte, dass er gerade (nebenbei) die „Kritik der reinen Vernunft“ von Immanuel Kant lesen würde. Ich habe damals natürlich versucht das „cool abzutun“, aber zutiefst beeindruckt darüber bin ich bis zum heutigen Tag.

Sehr geehrter Prof. Heinemann, lieber Udo, ganz herzlichen Glückwunsch zur Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2025.

Yves Muller (FAU Erlangen-Nürnberg)

Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2025 an Maja Klevanski

für ihre Arbeiten im Bereich der Proteinart, welche Kunst sowohl mit wissenschaftlichen Erkenntnissen aus der Proteinkristallographie als auch mit den Eigenschaften und Funktionsweisen der dargestellten Proteine verbinden, für Laien und Nachwuchswissenschaftler von hohem didaktischen Wert sind, indem sie Erkenntnisse aus Kristallographie und Molekularbiologie verknüpfen und dadurch zugänglich machen, und welche in traditionellen und modernen Medien national sowie international breite Aufmerksamkeit erzielt und hierdurch die Sichtbarkeit der Kristallographie in der Öffentlichkeit erhöht haben

Liebe Maja, sehr geehrtes Preiskomitee, verehrtes Publikum,

Es ist mir eine große Freude, heute hier zu stehen und Frau Dr. Maja Klevanski zum diesjährigen Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie zu gratulieren. Wie ihnen sicher bekannt sein dürfte, soll dieser Preis 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. Zuallererst möchte ich zwei Dinge erwähnen, die ich persönlich bemerkenswert finde: Erstens, Maja Klevanski ist die erste Frau, die diesen Preis erhält, und zweitens, sie ist keine Kristallographin.

Beginnen wir einfach mal mit Frau Klevanski's Biographie. In Moskau geboren, kam sie im Alter von 8 Jahren aus Russland nach Köln. Dort besuchte sie das Gymnasium, machte ihr Abitur und entschied sich dann für ein Biologiestudium. Während des Studiums kam sie im Rahmen eines Bioinformatik-Moduls zum ersten Mal mit Proteinstrukturen und deren Darstellungen in Berührung. Mit Hilfe eines 3D-Viewers konnte sie dabei lernen und erfahren, die Strukturen zu drehen und zu wenden und aus verschiedenen Blickwinkeln zu betrachten.

Für ihre Diplomarbeit zog es sie in die USA nach Harvard, wo sie unter anderem an Fragestellungen zur Faltung von Peptidsträngen arbeitete. Danach kam sie zurück nach Deutschland, um zu promovieren, wechselte dafür aber nach Heidelberg. In ihrer Doktorarbeit beschäftigte sie sich mit dem Protein APP, welches bei der Pathologie von Alzheimer eine große Rolle spielt. Ihre Doktorarbeit schloss sie übrigens mit einem „summa cum laude" ab.

Nach ihrer Promotion im Jahr 2015 ging es für sie dann in eine ganz andere Richtung. In ihrer PostDoc-Phase am Institut für Anatomie und Zellbiologie wandte sie sich der höchstauflösenden Mikroskopie zu, um Fragen zur Nano-Anatomie von Neuronen zu klären. Dort arbeitet sie noch heute als wissenschaftliche Koordinatorin und Gruppenleiterin.

So weit so gut. Aber wie kam sie nun dazu, Darstellungen von Proteinstrukturen als Vorlage für ihre Zeichnungen zu verwenden? Dazu gehen wir zurück in ihre Zeit in den USA. Im Jahr 2008, während ihrer Diplomarbeit in Harvard, besuchte sie ihre Großtante Ruth in Boston. Ihre Tante war eine promovierte Bauingenieurin, die ein großes Interesse an graphischen Dartstellungen aller Art besaß und die auch in ihrer Freizeit hobbymäßig zeichnete. Allerdings hatte sie erst nach ihrem Ruhestand die Zeit und die Muße, ihrem Hobby intensiver nachzugehen. Gemeinsam mit ihrer Großtante besuchte Maja Klevanski diverse Museen und Ausstellungen, zum Beispiel im *Metropolitan Museum* in New York. Auf einer dieser Ausstellungen sah sie Bilder unter anderem von Wilhelm Steig, dem amerikanischen Cartoonisten, der das Kinderbuch *Shrek* schrieb und illustrierte, welches als Vorlage für den späteren Trickfilm diente. Zusammen mit ihrer Großtante blätterte sie auch in Büchern von Karl Blossfeldt, der für seine beeindruckenden streng formalen Pflanzenfotografien bekannt ist.

Eines Abends nun stöberten sie gemeinsam in den Zeichnungen der Großtante. Unter den vielen Bildern gab es eines, welches irgendwie ganz anders aussah als alle anderen. Das war eine Zeichnung, die auf einem Diagramm einer mathematischen Rausch-Funktion beruhte. Dieses Diagramm wiederum wurde von Maja Klevanski's Onkel, Michael Bershadsky, damals Physik-Professor in Harvard, erstellt.

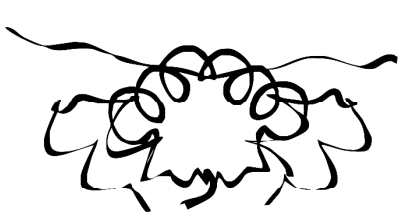
Dieser Moment war Maja Klevanski's Aha-Moment. Plötzlich wurde ihr klar, welch unglaubliche Vielfalt in den Darstellungen von Proteinstrukturen steckt. Losgelöst von dem wissenschaftlichen Gehalt einer Proteinstruktur mag einem Laien der strukturelle Aufbau oder die Darstellung desselben sehr abstrakt oder auch willkürlich erscheinen. Allerdings, lässt man der Fantasie freien Lauf, befindet man sich sehr bald in einer Welt voller Gestalten, die entweder komplett der Fantasie entspringen oder die in gewissem Bezug zu der Proteinstruktur stehen. Mich erinnert das ein wenig an Augenblicke aus meiner Kindheit, als ich versuchte, in den Formen der Wolken Tiergestalten zu erkennen.

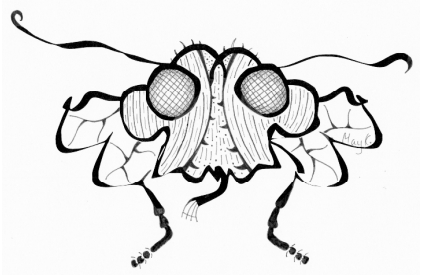
Wie auch immer, Maja Klevanski begann nun voller Tatendrang, eine Vielzahl von Strukturen zu betrachten, sie zu drehen und zu wenden; und zu versuchen, etwas darin zu erkennen und zu Papier zu bringen. Ihre frühen Zeichnungen hatten meistens noch keinen thematischen Bezug zur Funktion des Proteins. Mit der Zeit erkannte sie aber, dass ihre Fantasie recht ausgeprägt war und wenn sie nach etwas Funktionsbezogenem suchte, sie meistens nach mehrmaligem Drehen und Wenden des Proteins etwas passendes erkennen konnte. Seitdem versucht sie, wenn immer möglich, auch einen Bezug zur Funktion aufzubauen. Durch diese spezielle Vorgehensweise gelingt es ihr, einen unterhaltsamen Zugang zu Untersuchungsgegenständen der Kristallographie zu schaffen.

Bis heute umfasst Maja Klevanskis Werk insgesamt 83 Zeichnungen, die auf 65 verschiedenen Proteinstrukturen beruhen. Die Originalität ihrer Arbeiten liegt in der Kombination aus Wissenschaft und den der menschlichen Vorstellungskraft entspringenden konkreten Gestalten. Das Ergebnis dieser Idee sind Zeichnungen, die Nicht-Wissenschaftlern einen einfachen und unterhaltsamen Einblick in die Welt der Eiweißmoleküle gewähren und das Interesse junger Menschen an Kristallographie wecken.

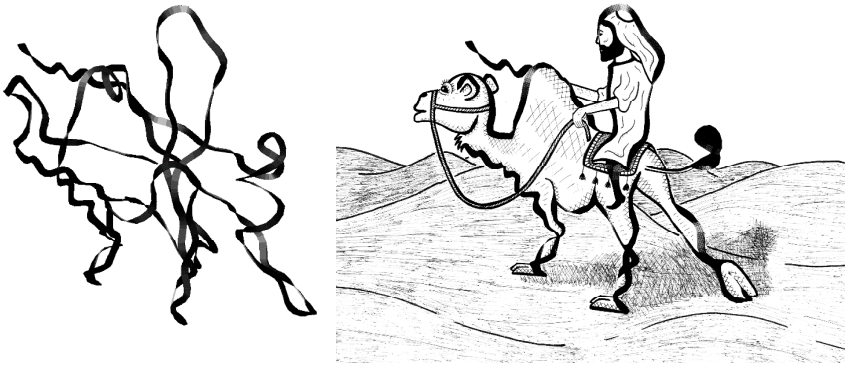
Wissenschaftler aus anderen Fachgebieten können ebenfalls profitieren. Beispielsweise wird ein Biologe, der zuvor nur die funktionellen Aspekte eines Proteins betrachtet hat, durch eine Zeichnung der Proteinstruktur, auf die er bei einer Internetrecherche stößt, ermutigt, sich auch mit der strukturellen Beschaffenheit des Proteins zu befassen.

Im Folgenden möchte ich ein paar ihrer Zeichnungen exemplarisch darstellen:



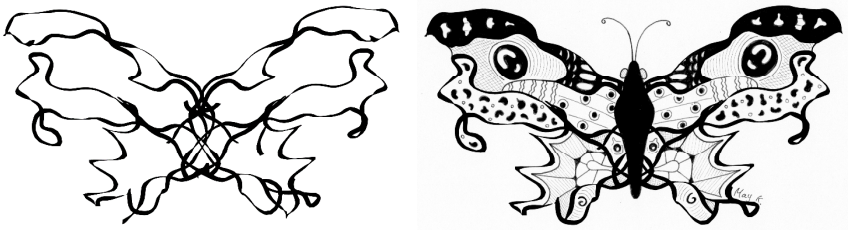


Aus **Insulin** wird eine Fliege. Insulin ist das wohl bekannteste Hormon der Stoffwechsel-regulation. Sobald Glucose im Blut auftaucht, reagiert Insulin wie eine Fliege, die Honig wittert. Doch statt selbst zu naschen, sorgt Insulin dafür, dass die Zellen ihre Schleusen öffnen, um die Glucose aufzunehmen.



Aus einem **Nanobody** wird ein Beduine, der auf einem Kamel reitet. Ein Nanobody ist ein winziges Antikörper-Fragment aus dem Dromedar – so klein und stabil, dass es buchstäblich durch das Nadelöhr passt, ein großer Vorteil in Medizin und Forschung.

Aus der **β-Sekretase BACE1** wird ein alter Mann. BACE1 ist ein Enzym, das zur Entstehung von Alzheimer beiträgt. In dieser Zeichnung wird es als alter Mann mit einem löchrigen Sack dargestellt – ein Sinnbild für das langsame Schwinden der Erinnerungen.



Aus **Aktivin A** wird ein Schmetterling. Aktivin A fördert die Freisetzung des follikelstimulierenden Hormons und reguliert so die Fortpflanzung. In dieser Zeichnung nimmt es die Form eines Schmetterlings an – ein Symbol für Wiedergeburt und Neubeginn in vielen Kulturen.

Aus dem **Nukleosom** wird eine Ratte. Das Nukleosom ist ein DNA-Verpackungskomplex aus Histonproteinen, um die sich die DNA wie ein Faden auf einer Spule wickelt und so das Erbgut zusammenhält. Das Atom auf dem Medaillon der Ratte steht sinnbildlich für diesen Zusammenhalt auf kleinster Ebene.

Maja Klevanski ist auch in der universitären Lehre tätig. Seit 2021 unterrichtet sie Histologie und Zellbiologie an der Universität Heidelberg. Vor allem in ihren Zellbiologieseminaren kommt ihr ihre „Proteinkunst“ zu Gute. Sie benutzt ihre Zeichnungen, um Eselsbrücken für die Studenten zu schaffen. Diese verlieren somit die Angst vor den komplexen Strukturen und können so leichter tiefer in dieses Gebiet eintauchen.

Zum Abschluss möchte ich die Würdigung der Arbeiten von Frau Klevanski wiederholen. Frau Dr. Maja Klevanski erhält den Waltrude-und-Friedrich-Liebau-Preis zur Förderung der Interdisziplinarität der Kristallographie 2025 aufgrund Ihrer Arbeiten im Bereich der „Protein Art“. Sie verbindet Kunst sowohl mit wissenschaftlichen Erkenntnissen aus der Proteinkristallographie als auch mit den Eigenschaften und Funktionsweisen der dargestellten Proteine. Ihre Arbeiten vermitteln Laien einen Zugang zur Welt der Proteine und der Proteinkristallographie und haben für Nachwuchswissenschaftler einen hohen didaktischen Wert, indem sie Erkenntnisse aus Kristallographie und Molekularbiologie verknüpfen und zugänglich machen. Durch eine Webseite, *Social-Media*-Auftritte, Podcasts sowie durch Zeitungsartikel haben die Arbeiten von Maja Klevanski national sowie international breite Aufmerksamkeit erzielt und somit die Sichtbarkeit der Kristallographie in der Öffentlichkeit erhöht.

Gratulation zu dem Preis, Maja!

Manfred Weiss (Berlin)

ACHIM KLEEBE

25.08.1956 – 04.10.2024

Mit großer Trauer nehmen wir Abschied von Hans-Joachim – Achim – Kleebe, einem herausragenden Wissenschaftler und geschätzten Kollegen der Technischen Universität Darmstadt, der am 4. Oktober 2024 viel zu früh verstorben ist.

Achim wuchs in Düsseldorf auf und legte den Grundstein für seine Karriere mit einem Mineralogiestudium an der Universität zu Köln. 1983 schloss er sein Studium in Köln-Porz am Institut für Werkstoff-Forschung des DFVLR (Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft und Raumfahrt, heute: DLR, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) mit einer von seinem Mentor Prof. Paul Ney betreuten Diplomarbeit ab. Er promovierte bis 1988 bei Prof. G. Ziegler in der Abteilung Keramische Werkstoffe unter der Leitung von Prof. Siegfried Haussühl mit einer Arbeit über „Die Einflussfaktoren auf das Nachsinterverhalten von reaktionsgebundenem Siliciumnitrid“. Das Materialsystem begleitete ihn auch während seiner Postdoc-Zeit in Santa Barbara bis 1990 und als wissenschaftlicher Mitarbeiter des MPI für Metallforschung in Stuttgart, was zu einem grundlegenden Verständnis der Korngrenzstrukturen in Si_3N_4 führte. 1998 habilitierte er sich bei Prof. Ladislav Bohatý zu diesem Thema.

Nach seiner Tätigkeit als Akademischer Oberrat an der Universität Bayreuth folgte er 2001 einem Ruf als *Associate Professor* an das *Metallurgical and Materials Engineering Department* der *Colorado School of Mines* in Golden, USA. Dort wirkte er von 2004 bis 2006 als *Full Professor*.

Von 2006 bis zu seiner Pensionierung im Jahr 2022 leitete Achim den Lehrstuhl für Geomaterialwissenschaft am Institut für Angewandte Geowissenschaften der Technischen Universität Darmstadt und war bis 2021 dessen geschäftsführender Direktor.

Seine Arbeiten zu Grenzflächenstrukturen und deren Funktionalisierung setzten Maßstäbe. Mithilfe der Elektronenmikroskopie trug er darüber hinaus maßgeblich zum Verständnis transparenter gesinterter Spinellkeramiken, polymerabgeleiteter Systeme sowie Piezo- und Hochtemperaturkeramiken bei. In Darmstadt etablierte und erweiterte er die angewandte Elektronenmikroskopie unter anderem durch das von ihm geleitete Mikroskopiezentrum EMC-DA.

Achim war mehr als nur ein exzellenter Wissenschaftler. Er machte seine Leidenschaft für die Mineralogie zum Beruf und prägte seine Doktoranden und Studierenden nachhaltig. Seine Begeisterung für die Vielfalt der Mineralien war ansteckend. Es war ihm stets ein Anliegen, Wissen nicht nur zu sammeln, sondern es auch weiterzugeben. Er organisierte unvergessliche Exkursionen in ferne Länder und weckte so in vielen die Faszination für die Geowissenschaften. Seine Vorlesungen waren nicht nur informativ, sondern auch unterhaltsam, und er hatte immer ein offenes Ohr für die Fragen seiner Studierenden.

Mit der Organisation der MC2023 in Darmstadt wollte Achim sich aus der Welt der Wissenschaft verabschieden, konnte jedoch leider nicht mehr persönlich teilnehmen. Für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie war er über viele Jahre hinweg als Sprecher des Arbeitskreises Elektronenmikroskopie aktiv.

Neben seinen wissenschaftlichen Erfolgen bleibt Achim als Mensch mit großem Herzen in Erinnerung. Seine Freundlichkeit, warmherzige Art und Hilfsbereitschaft hinterlassen eine Lücke in unseren Reihen. Er wird nicht nur als hervorragender Wissenschaftler, sondern auch als wertvoller Freund, Mentor und Kollege in Erinnerung bleiben.

Unser Mitgefühl gilt seiner Familie, seinen Freunden und allen, die ihn gekannt haben.

Für alle, die ihn vermissen,
Mathis Stricker-Müller, Christian Kübel, Thomas Höche, Peter van Aken, Joachim Mayer, Christoph Schüth und Ute Kolb

GEORGE SHELDRICK

17.11.1942 – 20.02.2025

It is with a heavy heart, that we must announce the passing of George Michael Sheldrick.

Everyone in crystallography knows George as a giant in the development of computing methods despite his unassuming manner. His SHELX programs for structure solution and refinement have shaped the field and their use has been key to innumerable projects. The same is valid for his contribution to data processing and analysis in the programs he wrote for Bruker detectors. Only those young to crystallography will have missed that while typically our papers are scored by the impact factor of a journal, one paper of George rocketed the impact factor of the journal *Acta Crystallographica A* from 2.05 to 54, surpassing that of *Science*, *Nature* or *Cell* in the year 2010. This establishes how many scientific projects must have been aided by George's insightful work and bright solutions.

Those of us who have had the privilege to meet George in person also know him for his passion for problem solving, originality, sense of humour and deep humanity. George has touched the lives and careers of so many group members, providing a work environment that was simultaneously sheltered and free. He was always receptive to our ideas, encouraging our independence, providing the means to support them and giving us credit for what we accomplished. At the same time, we were spared the financial worries or conflicts attached to any institute. If Goethe was right in writing that character is built in the tempest of life while talent requires the calm, George shaped the optimal environment to develop our talents. An unusual trait of George is that he always pondered what people said, not who said it. Experience shows that humans are more ready to value what their friends, allies and referents state as being correct and search for reasons why their competition must be wrong! This lack of prejudice may explain why George's research group was always most diverse: he gave everyone fair opportunities.

In lectures, talks or conversations, George would explain complicated concepts making them come across as compellingly simple. His teaching would always prompt critical thinking, as when he faked a nuclear explosion producing a mushroom in his chemistry lecture with experiments. This was the 80's and half of the audience started an *in promptu* demonstration against nuclear power before being absorbed in the debate of why this was impossible and the analysis of what experiment had really taken place.

Working with George was inspiring and fun, it covered a broad range of interests in chemistry, geology and biology evolving along the years. In Cambridge and Göttingen, George closely supervised more than a hundred theses. Former students and co-workers would frequently stop in Göttingen and pop up to join the coffee time, where daily group discussions would take place. Many of us have kept in touch ever since, resorted to him for advice or just for the pleasure of discussing science and puzzling problems.

George Sheldrick will be missed.

Isabel Usón (Barcelona) and Regine Herbst-Irmer (Göttingen)

Nachruf in Acta Cryst A: *https://doi.org/10.1107/S2053273325002931*

EKHARD SALJE

26.10.1946 – 24.02.2025

Dear ladies and gentlemen,

When I prepared this talk before the DGK meeting at the Leibniz University Hannover, it was intended to be an entertaining laudatio for my PhD supervisor and dear friend Prof. Ekhard Salje. Now it is with immense sadness to share with you that Ekhard passed away on February, 24th and my words become his obituary.

You certainly know that there are important historical connections between Great Britain and Hannover (George I. was King of Great Britain) and there are also important scientific ones. The well-known mathematical one was founded by Leibniz and Newton, and with focus on Hannover and Cambridge the most recent connection we are talking about today was established in personal union by Prof. Ekhard Salje who emerged from this university as a truly brilliant scientist.

Ekhard Salje was born in Hannover where he grew up near the royal gardens, in German they are called “Herrenhäuser Gärten”. He didn’t particularly like his school days, but he blossomed when he began his studies at this university. His academic career started in 1966 and Ekhard was initially interested in philosophy and maths. However, he finally did a doctorate in physics. His teachers were Horst Tietz in maths and Ertl, Steudel and Welling in physics. He completed his thesis and earned his PhD in October 1972 under supervision of Prof. Welling in quantum optics.

At that time Heinrich Heesch was an outstanding group theoretician in mathematics in Hannover. Ekhard attended Heesch’s lectures and began working on finite groups, which brought him continuously closer to crystallography. During his PhD work, Ekhard went for some time to Zurich in order to work in Alex Mueller’s IBM laboratory. There he met Ortwin Schirmer, with whom he published on polaronic systems.

After his habilitation in crystallography on “The symmetry constraints of structural phase transitions in crystals with perovskite structure”, in 1975 Ekhard became Privatdozent and a full professor in 1978 and hence, he was the youngest professor at the University of Hannover.

I was Ekhard’s first student and in 1976 (I was still a graduate student at the time) we published our first joint paper on the electro-optical effect of NH_4IO_3 and later on its structural phase transition.

When I first met Ekhard, towards the end of my mineralogy studies, he had just moved from the Institute of Quantum Physics to the Institute of Mineralogy and Crystallography, today a little more fancy it is called the “Institut für Erdsystemwissenschaften, Abteilung Mineralogie”. Salje began to grow crystals from aqueous solution and worked on different physical effects of perovskites, iodates and tungstates. Each time Ekhard tackled completely new scientific questions and needed practically no time to familiarise himself with new topics in geosciences; he had all the tensorial material properties for each symmetry immediately to hand and quickly recognised the relevance of the structure-property relationships even for less popular crystallographic space groups. Nobody in his working group could grasp the symmetry aspects and related properties anywhere near as quickly as Ekhard in order to strategically plan investigations of samples in such a way that something fascinating and new emerged. In this way he discovered high electro-optical coefficients of iodates or the electrochromatic blue colouring of pale green tungsten oxide crystals when electric fields were applied or later the surprising superconductivity in proton-doped domain-walls.

I enthusiastically took up Ekhard’s suggestion to grow phosphate-arsenate crystals and to investigate their ferroelastic properties in a doctoral thesis, which was thematically not so far from relaxor materials that later became extremely successful and which we encounter today in USB sticks, SSD memories and elsewhere. As Ekhard was also a member of the university senate at the time and, like today, there were almost constantly reforms on the agenda, we usually met after midnight in the lab after his senate meetings, Ekhard exhausted from the never-ending discussions in the senate from over-committed reformers and me exhausted from growing crystals using the Czochralski technique. However, the crystals resulting from the syntheses were so fantastic that we published many years together on their ferroelasticity. Ekhard’s ability to formulate texts was impressive. When writing a manuscript, he had all the results in his memory and usually formulated the text without a break in just a few hours. It was practically never necessary to change anything afterwards. While I was tweaking my texts, Ekhard’s were extremely accurate and ready for print right from the start.

In 1980, Ekhard Salje went to Paris to work in Jaques Friedel’s group. Another outstanding professor there was de Gennes in the field of polymers and soft matter physics and both met up again later in England. This was the time when Ekhard again focused on elastic interactions. Theoretically these are so-called non-local effects and experimentally it was Raman spectroscopy and X-ray diffraction that interested him in this context. Ekhard learned as much as possible about Raman spectroscopy in a crash course from Prof. Gerhard Schaak in Darmstadt, who later worked at the Faculty of Physics and Astronomy in Würzburg.

In Hannover there was no mineral physics outside of crystallography and diffraction existed in a rudimentary form. Hence, Ekhard had to do all his X-ray diffraction experiments in Göttingen (the crystallographer there was Vladimir Kupcik). This meant that Ekhard drove his car to Göttingen overnight, did the measurements in the morning and drove back the following night. It was an intensive period of night-time activities.

Ekhard had met Neville Mott when he was in Paris. Neville Mott and Jaques Friedel had a family connection. Hence, Neville often came to Paris and asked Ekhard if he would like to come to Cambridge. Ekhard actually had other plans, but the story went on and in winter 1984 he met Michael Carpenter and Voker Heine from Cambridge visiting him in Hannover. I was present when Heine entered the room. He was impressive with his Hawaii shirt, his clogs and his thick winter coat torn open at one side. Heine and Carpenter had a similar, tempting plan: if Salje came to Cambridge, he could choose the institutes in which he wanted to work. He would also have very few lectures and nearly no administration. The last aspect was highly convincing and he chose the Earth Sciences and Physics departments in Cambridge. In physics at the Cavendish Lab Ekhard continued with Raman spectroscopy and the theory of "pattern formation". In Earth Sciences he used electron microscopy and developed new diffraction techniques on his main topic "structural phase transitions". He worked on theory with Volker Heine and experimentally with Michael Carpenter. Together they published around 300 papers and they clarified the kinetics of feldspars, which previously generations of geoscientists had cut their teeth on. Ekhard also published several books. One of his most widely used textbooks from 1990 is entitled "Phase transitions in ferroelastic and co-elastic crystals".

He received offers from Princeton, ETH Zurich and various German universities. Ekhard became FRS and received several prizes including the AvH Research Prize, he became Fellow of the Royal Society of Arts, he was appointed to the Leopoldina, received the Schlumberger Medal and the DMG Agricola Medal. In France, Ekhard Salje became "Chevallier dans ordre des Palmes Academiques" (the order was created by Napoleon Bonaparte in 1808). In Germany, Ekhard was awarded the Federal Cross of Merit First Class, was awarded the Werner Heisenberg medal in 2017 and an honorary PhD at the University of Wuerzburg in 2019. He also became Honorary Professor of the Jiao-Tong University, China in 2012. His memberships of international committees and review panels were enormous.

Well, even at universities such as Cambridge, top academics are often favoured with self-administration and Ekhard's innocent academic life came to an abrupt end when he became Head of Department at the University of Cambridge in 1987. He was then responsible for the administration and especially, the research and teaching strategy of the department. In 2001, Ekhard Salje was appointed Master of the College "Clare Hall" and in fact he was the first German to hold the position of a Master (i.e. President) of a college in Cambridge. He initiated numerous new international co-operations of the College. For example, ca. 50 visiting professorships for various disciplines can be traced back to his initiative. He and his wife Lisa started music and art events, which are still very popular in Clare Hall. Ekhard was also passionate about painting, and at their home in Cambridge there are plenty of his own oil paintings on the walls. Ekhard also initiated intensive collaborations with Asian research centres in Japan, China and Korea. The appointment period at the College was 7 years. In 2008, Ekhard had fulfilled all his administrative duties and returned to research.

Over the last 20 years, Ekhard Salje has not only worked on phase transformations and the thermodynamic stability of minerals, but also on the mechanical stability of minerals, metals and biominerals. He was invited to set up laboratories for this purpose in China with colleagues in Xi'an and Chengdu. In addition, Ekhard developed an acoustic examination method with colleagues in Cambridge. Samples were slightly compressed to create microstructures, which then emitted acoustic signals. Moreover this "crackling noise" spectroscopy was further developed with Trudy Kriven on porous minerals. Today, the technique makes it possible to recognise mechanical instabilities *in situ*, for instance, in mechanical structures such as bridges or bicycle frames at an early stage and before potential damage occurs.

Ekhard published over 700 papers and he was a true bridge-builder of international cooperation. He was extraordinarily successful in the search for laws in mineral physics and their geoscientific contexts.

We will miss Ekhard and his curiosity that guided his outstanding research and sound judgement.

Ulrich Bismayer (Hamburg)

HORST KÜPPERS

24.04.1933 – 09.05.2025

Die Gemeinschaft der Kristallographen betrauert den Tod von Prof. Dr. rer. nat. Horst Küppers. Er starb am 9. Mai 2025, wenige Tage nach seinem 92. Geburtstag.

Horst Küppers wurde am 24.04.1933 in Köln am Rhein geboren. Er studierte Physik an der dortigen Universität. 1966 wurde er an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg zum Dr. rer. nat. promoviert. Nach seiner Rückkehr nach Köln habilitierte er sich dort im Jahr 1973. 1975 wurde er als Wissenschaftlicher Rat und Professor an die Universität Hamburg berufen. Noch im selben Jahr folgte Prof. Küppers dem Ruf auf eine aus einer Assistentenstelle umgewandelten Professor für Kristallphysik an die Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, wo er bis zu seiner Pensionierung 1998 lehrte.

Er verfasste zahlreiche Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften zu kristallographischen und kristallphysikalischen Themen – oft zusammen mit renommierten deutschen oder internationalen Koautoren. Unter anderem sind wichtige Arbeiten über Dicarbonsäuren und deren Salze zu nennen; diese zeichnen sich durch sehr kurze intramolekulare Wasserstoffbrücken aus, wobei die Frage, ob diese symmetrisch oder asymmetrisch sind, die zentrale Rolle spielten. Bei den Untersuchungsmethoden sind außer Röntgenbeugung auch temperaturabhängige Neutronenbeugung zu nennen.

Seitens der DGK gebührt Prof. Küppers ein besonderer Dank für seine lange erfolgreiche Amtszeit als ihr Schatzmeister von 1991 bis 2003. Horst Küppers war ein echter Gelehrter, der nicht müde wurde, jede auftauchende Frage zu klären, typischerweise durch ausführliche Konsultation von Lehrbüchern oder Lexika – lange vor den Zeiten von Wikipedia und anderen digitalen Hilfsmitteln. Im Übrigen war er ein großer Musik- und Kunstliebhaber und, wie es scheint, auch ein Verehrer der lateinischen Sprache.

Im fortgeschrittenen Alter hat sich Horst Küppers intensiv mit der Geschichte der Mineralogie in Kiel befasst und seine Erkenntnisse der Allgemeinheit zugänglich gemacht. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse wurde unter anderem in zwei Teilen in den DGK-Mitteilungen Nr. 27 (Januar 2004) und 28 (Juni 2004) veröffentlicht. Beim sorgfältigen Lesen kann man hier interessante Quer- und Verwandtschaftsbeziehungen entdecken, die sich, falls gewünscht, auch für die Erstellung von Akademischen Stammbäumen eignen.

Die DGK wird Prof. Dr. Horst Küppers in ehrenvoller und dankbarer Erinnerung behalten. Unser Mitgefühl gilt seiner Familie.

Wulf Depmeier (Kiel)

ANKÜNDIGUNGEN

UNIVERSITÄT ZU LÜBECK

34th ANNUAL MEETING of the GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY (DGK)

© Markus Mainka–stock.adobe.com

25–28 FEBRUARY 2026
LÜBECK

www.dgk-conference.de

AUFRUF ZUR MITWIRKUNG IN DEN PREISKOMITEES

Im Rahmen der Mitgliederversammlung 2026 stehen wichtige Wahlen an: Die Auswahlkomitees für die Vergabe der Carl-Hermann-Medaille, der Will-Kleber-Gedenkmünze und des Lieselotte-Templeton-Preises werden neu besetzt. Diese Auszeichnungen sind zentrale Instrumente der wissenschaftlichen Anerkennung innerhalb unseres Fachgebiets – und sie leben vom aktiven Engagement unserer Mitglieder.

Mit der Carl-Hermann-Medaille wird das wissenschaftliche Lebenswerk herausragender Forscherpersönlichkeiten gewürdigt. Die Will-Kleber-Gedenkmünze zeichnet konkrete wissenschaftliche Arbeiten aus, die dem Fach besondere Impulse gegeben haben. Der Lieselotte-Templeton-Preis schließlich richtet sich an den wissenschaftlichen Nachwuchs und wird für besonders gelungene studentische Abschlussarbeiten verliehen.

Für alle drei Preise suchen wir Mitglieder, die bereit sind, sich in den jeweiligen Auswahlkomitees zu engagieren und mit Fachkenntnis und Verantwortung die Preisträgerinnen und Preisträger der kommenden Jahre mitzubestimmen. Besonders erfreulich wäre es, wenn sich Kandidatinnen und Kandidaten aus der gesamten Breite der Kristallographie und aus unterschiedlichen Phasen ihrer wissenschaftlichen und beruflichen Karriere zur Mitwirkung bereitfänden. Die Vielfalt an Perspektiven stärkt die Arbeit der Komitees und trägt dazu bei, die Breite unseres Fachs in der Auswahl der Preisträger angemessen zu repräsentieren.

Um insbesondere auch neue Interessierte und bisher weniger eingebundene Mitglieder einzubeziehen, beginnen wir mit der Suche nach Kandidatinnen und Kandidaten diesmal bewusst früher als in der Vergangenheit. Wir möchten alle Mitglieder ausdrücklich ermutigen, selbst über eine Kandidatur nachzudenken oder geeignete Personen vorzuschlagen.

Wir freuen uns über Ihre Bereitschaft zur Mitgestaltung und danken Ihnen herzlich für Ihr Engagement im Dienste der Kristallographie.

Daniel Többens, Schriftführer

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN MAX-VON-LAUE-PREIS 2026

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 die Vorsitzende 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 2026 in Lübeck statt.

Einsendeschluss: **30. November 2025**

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

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE WILL-KLEBER-GEDENKMÜNZE 2026

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 **30.11.2025** 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/gremien/preiskomitee-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/

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DIE CARL-HERMANN-MEDAILLE 2026

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 ausgezeichneter 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 **30.11.2025** 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/

AUFRUF ZU NOMINIERUNGEN FÜR DEN LIESELOTTE-TEMPLETON-PREIS 2026

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen im Jahr 2026 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 34. Jahrestagung der DGK in Lübeck 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 2025

Preiskomitee für den Lieselotte-Templeton-Preis:
https://dgk-home.de/intern/gremien/preiskomitee-fuer-den-lieselotte-templeton-preis/

Preisordnung:
https://dgk-home.de/intern/statut-satzungen/satzung-fuer-den-lieselotte-templeton-preis/

Bisherige Preisträger:
https://dgk-home.de/intern/ehrenmitglieder-und-preistraeger/preistraeger-des-lieselotte-templeton-preises/

TAGUNGEN UND TERMINE

August 2025

28.07. – 02.08.2025 **19th International Summer School on Crystal Growth (ISSCG-19)**
Xi'an, China

Kontakt: *https://isscg-19.com/*

03.08. – 08.08.2025 **21st International Conference on Crystal Growth and Epitaxy (ICCGE-21)**
Xi'an, China

Kontakt: *https://www.iccge21.com*

04.08. – 07.08.2025 **Workshop: Advanced Crystal Structure Determination**
Garching, Deutschland

Kontakt: *https://www.crc.tum.de/crc/events/workshops/munich-crystallography-workshop/*

11.08. – 15.08.2025 **Building Capacity in AI-driven Drug Discovery and Vaccine Design: AlphaFold Training by BioStruct-Africa**
Nairobi, Kenia

Kontakt: *https://www.biostructafrica.org/upcoming-workshops*

25.08. – 29.08.2025 **35th European Crystallographic Meeting**
Poznan, Polen

Kontakt: *https://www.ecm35.ecanews.org/*

31.08. – 04.09.2025 **Microscopy Conference MC 2025**
Karlsruhe, Deutschland

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

September 2025

01.09. – 05.09.2025 **6th International School on Aperiodic Crystals**
Dresden, Deutschland

Kontakt: *https://www.cpfs.mpg.de/isac-6*

02.09. – 05.09.2025 **51st Meeting of the Italian Crystallographic Association (AIC)**
Florence, Italien

Kontakt: *https://congresso2025.cristallografia.org/*

02.09. – 30.09.2025 **X-ray and Neutron Science – International Student Summer Programme 2025**
Grenoble, Frankreich

Kontakt: *https://www.esrf.fr/home/events/conferences/2025/x-ray-and-neutron-science---international-student-summer-programme-2025.html*

08.09. – 10.09.2025 **5th ICCCM - International Conference on the Chemistry of Construction Materials**
Garching, Deutschland

Kontakt: *https://veranstaltungen.gdch.de/microsite/index.cfm?l=11743&sp_id=2*

08.09. – 11.09.2025 **ExTech 2025**
Mülheim an der Ruhr, Deutschland

Kontakt: *https://extech2025.com/*

09.09. – 16.09.2025 **EMBO Practical Course: Image Processing for Cryoelectron Microscopy**
London, Großbritannien

Kontakt: *https://meetings.embo.org/event/25-cryo-em*

15.09. – 16.09.2025 **MedChem Campus 2025**
Tübingen, Deutschland

Kontakt: *https://veranstaltungen.gdch.de/microsite/index.cfm?l=11748&sp_id=2*

15.09. – 18.09.2025 **46. FGMR Annual Discussion Meeting 2025**
Bonn, Deutschland

Kontakt: *https://veranstaltungen.gdch.de/microsite/index.cfm?l=11781&sp_id=2*

15.09. – 18.09.2025 **Workshop „Powder Pair Distribution Function (PDF) Analysis for Materials Science“**
Bremen, Deutschland

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

16.09. – 19.09.2025 **2025 European FIB (Focused Ion Beam) Network**
Valencia, Spanien

Kontakt: *https://www.eu-fib.net/*

24.09. – 25.09.2025 **14th German-French Workshop on Oxide, Dielectric, and Laser Single Crystals 2025 (WODIL)**
Ettlingen, Deutschland

Kontakt: *https://www.iosb.fraunhofer.de/en/events/2025/wodil-2025.html*

29.09. – 01.10.2025 **Science Forum Chemistry 2025**
Karlsruhe, Deutschland
Kontakt: *https://www.gdch.science/*

Oktober 2025

01.10. – 02.10.2025 **8th cryoNET Symposium**
Umea, Schweden
Kontakt: *https://www.umu.se/en/cryonet2025*

01.10. – 03.10.2025 **Mass Spectrometry and Microscopy. MS+M_2025**
Utrecht, Niederlande
Kontakt: *https://msandm2025.org/*

14.10. – 17.10.2025 **LACA-ABCr 2025**
Fortaleza, Brasilien
Kontakt: *https://laca-abcr-2025.abcristalografia.org.br/*

29.10. – 31.10.2025 **Annual Meeting of the German Young Crystallographers**
Berlin, Deutschland
Kontakt: *https://dgk-home.de/arbeitskreise/jkyc/young-crystallographers-meetings/*

Dezember 2025

01.12. – 05.10.2025 **19th Conference of AsCA**
Taipei, Taiwan
Kontakt: *https://asca2025.org/*

Februar 2026

25.02. – 28.02.2026 **34. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie**
Lübeck, Deutschland
Kontakt: *https://dgk-conference.de*

März 2026

März **HERCULES European School**
Grenoble, Frankreich
Kontakt: *https://hercules-school.eu/*

03.03. – 13.03.2026 **14th Annual Meeting of the Young Crystal Growers (jDGKK)**
Karlsruhe, Deutschland

Kontakt: *https://www.dpg-physik.de/veranstaltungen/2026/dpg-fruehjahrstagung-dresden*

08.03. – 13.03.2026 **DPG-Frühjahrstagung of the Condensed Matter Section (SKM)**
Dresden, Deutschland

Kontakt: *https://www.dgkk.de/de/aktuell/tagungskalender*

Juni 2026

28.06. – 04.07.2026 **11th European Crystallography School**
Stockholm, Schweden

Kontakt: *https://ecanews.org/european-crystallography-school/*

Juli 2026

Juli **DESY Summer Student Programme**
Hamburg, Deutschland

Kontakt: *https://summerstudents.desy.de/*

DGK-Homepage

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*

DMG-Homepage

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*

DGKK-Homepage

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*

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	[ ]	Biomolekulare 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	45 €
B	Studentische Mitglieder	15 €
D	Doktoranden[1]	15 € auf Antrag
E	Stellungslose Mitglieder	15 € auf Antrag
F	Mitglieder im Ruhestand bzw. Vorruhestand[2]	20 € auf Antrag
G	Unpersönliche Mitglieder[3]	nach Vereinbarung mit dem Vorstand

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

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

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

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

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

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

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

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

Die Mitgliedsbeiträge für die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V. (Steuernummer 162/141/20724) sind mit Steuerbescheid vom 01.04.2025 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 11. März 2025 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.