

Neue Redaktion – gedruckte
Ausgabe zukünftig nur noch
auf Antrag! ab S. 23

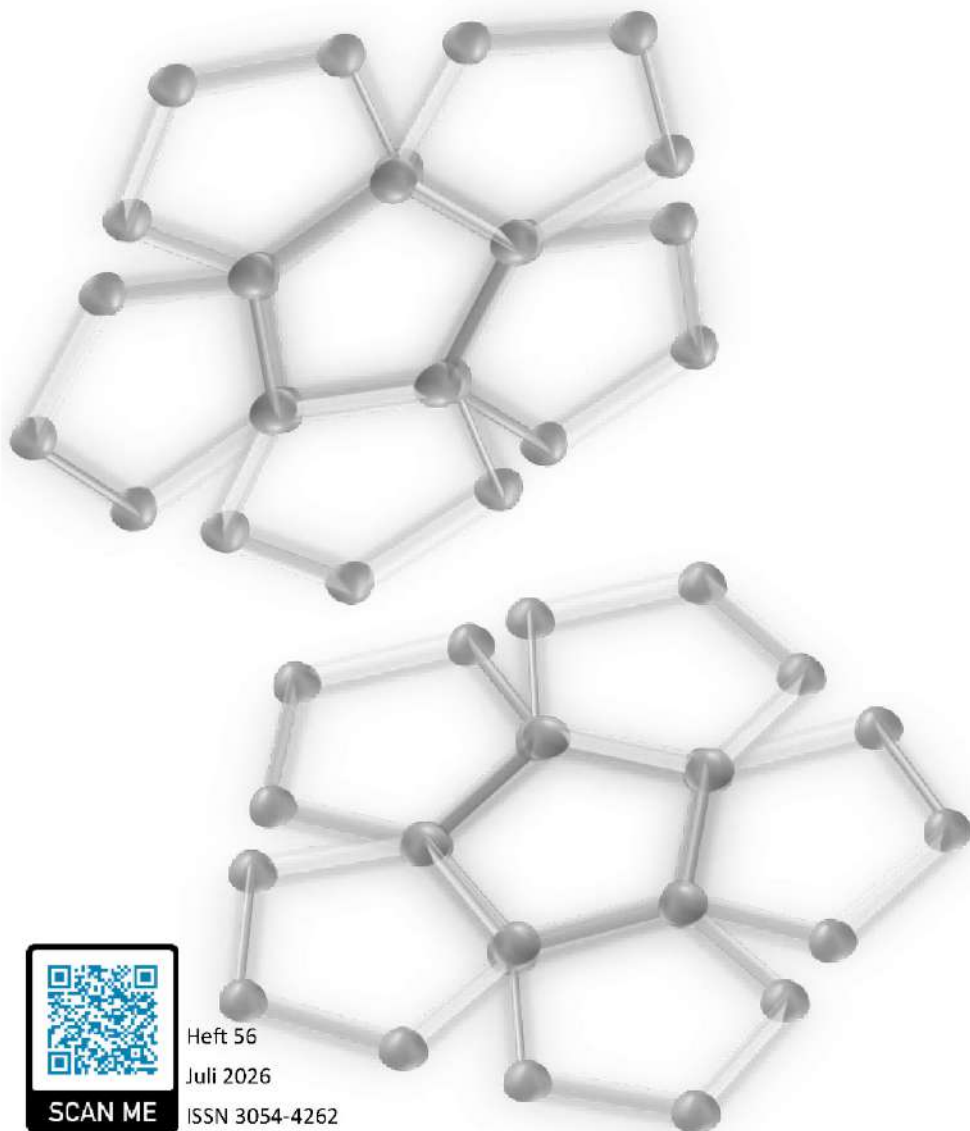
Berichte der
Arbeitskreise
ab S. 25

Wissen &
Weiterbildung
ab S. 51

Änderungen
Wahlordnung
ab S. 115

MITTEILUNGEN

Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.



SCAN ME

Heft 56

Juli 2026

ISSN 3054-4262

Editorial

In diesem Jahr erscheinen die „Mitteilungen“ der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. im neuen Layout und mit neuer Redaktion. Ich wünsche Ihnen viel Spaß beim Lesen.

Mit freundlichen Grüßen

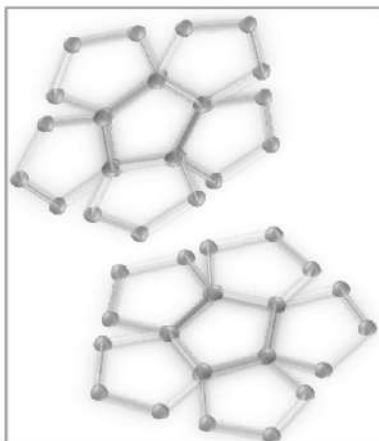
Alexander Wollbrink

Titelbild

(Alexander Wollbrink, Hannover)

Der Pentagon-Dodekaeder schmückt das Heft seit der ersten Auflage der DGK-Mitteilungen im Juni 1991 und ist Teil des offiziellen Logos der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. bis heute (2026).

Um keine bestimmte Kristallstruktur oder Forschungsgebiet zu bevorzugen habe ich mich entschieden das Motiv des Pentagon-Dodekaeders als Cover der kommenden Mitteilungshefte zu verwenden. Das neue Cover zeigt den Pentagon-Dodekaeder in zwei Hälften geteilt, in einer dreidimensional aufgefalteten Darstellung.



Grußwort

(Ute Kolb, Mainz)

Liebe Mitglieder der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie,

mit dem vorliegenden Jahresheft blicken wir auf ein ereignisreiches Jahr unserer Gesellschaft zurück und werfen zugleich einen Blick auf das, was vor uns liegt. Sie halten das Heft in neuem Gewand in den Händen: Die „Mitteilungen“ erscheinen mit frischem Layout und unter neuer Redaktion. Mein herzlicher Dank gilt Dr. Alexander Wollbrink, der die Gestaltung übernommen und den Mitteilungen ein modernes Gesicht gegeben hat, sowie dem bisherigen Redaktionsteam um Prof. Dr. Dirk C. Meyer und Dr. Hartmut Stöcker für ihre langjährige und verlässliche Arbeit. Dieses Mitteilungsheft wird letztmalig an alle Mitglieder in gedruckter Form verschickt. Ab 2027 erscheinen die Mitteilungen *online* als PDF. Sie werden zusammen mit unseren früheren Jahresheften von der Deutschen Nationalbibliothek archiviert. Eine gedruckte Ausgabe bleibt im Rahmen eines *Opt-in*-Verfahrens erhalten – wer sie weiterhin beziehen möchte, kann dies aktiv anfordern. Ich danke der Kommission, die diese zukunftsweisende Neuausrichtung sorgfältig vorbereitet hat, und bitte Sie, von der Möglichkeit der aktiven Anmeldung Gebrauch zu machen, wenn Ihnen das gedruckte Heft am Herzen liegt.

Ganz vorne in unserem Rückblick steht natürlich die 34. DGK-Jahrestagung, die vom 25. bis 28. Februar 2026 an der Universität zu Lübeck stattfand. 243 Teilnehmerinnen und Teilnehmer aus Deutschland und 18 weiteren Ländern kamen in den „echten Norden“, um in 18 Mikrosymposien mit rund 100 Vorträgen und sechs herausragenden Plenarvorträgen zu diskutieren. Aus 200 eingereichten *Abstracts* entstand ein wissenschaftlich vielfältiges und inspirierendes Programm, das alle neun Arbeitskreise gleichberechtigt mitgestaltet haben. In zwei Ehrensymposien wurde zudem das Lebenswerk der 2025 verstorbenen Kristallographen George Sheldrick und Rolf Hilgenfeld gewürdigt. Mein aufrichtiger Dank gilt Prof. Dr. Lars Redecke und seinem Team für die hervorragende Organisation dieser rundum gelungenen Tagung. Der „Staffelstab“ der Jahrestagungen ist für 2027 inzwischen an Prof. Dr. Thomas Doert und die TU Dresden übergeben worden und wir können uns auf die 35. DGK-Jahrestagung freuen, die in Kooperation mit unseren polnischen Kollegen stattfindet und ideale Voraussetzungen für einen fruchtbaren wissenschaftlichen Austausch über Ländergrenzen hinweg schafft. Mit besonderer Freude schauen wir auf den „28th Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography“ der 2029 in Berlin stattfinden wird. Die Vorbereitungen sind in vollem Gange, und wir werden auf den kommenden internationalen Tagungen aktiv für diesen Höhepunkt der weltweiten Kristallographie in Deutschland werben.

Fachtagungen als Foren zu einem intensiven, persönlichen Austausch sind für unsere wissenschaftliche Arbeit unerlässlich. Die DGK förderte auch in diesem Jahr die Teilnahme junger Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler: mit einem Stipendium zur 11. *European Crystallography School* (ECS11) in Stockholm, einem Stipendium für die XTOP in Karlsruhe sowie mit drei Reisestipendien zum 27. Kongress der *International Union of Crystallography* (IUCr) in Calgary, Kanada. Die Reiseberichte unserer Stipendiatinnen und Stipendiaten vom 35. *European Crystallographic Meeting* (ECM35)

in Poznań geben einen lebendigen Eindruck davon, wie wertvoll diese Förderung für den wissenschaftlichen Nachwuchs ist.

Unsere Gesellschaft lebt von der aktiven Teilnahme aller Kristallographinnen und Kristallographen. Ich lade Sie daher herzlich ein, sich weiterhin einzubringen, durch wissenschaftliche Beiträge zum Jahresheft und zur *Homepage*, durch Nominierungen für unsere Preise oder durch die Mitarbeit in den Arbeitskreisen. Die nächsten Wahlen werden erstmals online stattfinden, mit dem Ziel, Transparenz, Flexibilität und Wahlbeteiligung des Verfahrens noch weiter zu verbessern. Ich möchte Sie hiermit ermutigen, Vorschläge für die einzelnen Ämter und Komitees einzureichen. So können wir eine lebendige Kristallographie in Deutschland und international ermöglichen. Ich freue mich, Sie auf den kommenden Veranstaltungen zu treffen, und hoffe auf eine anregende und zukunftsorientierte Zusammenarbeit.

Ihre Ute Kolb (DGK-Vorsitzende)



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

Inhaltsverzeichnis

Editorial	3
Grußwort	5
Inhaltsverzeichnis	8
Aus dem Vereinsleben	11
Rückblick auf die 34. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 2026 in Lübeck	11
Entscheidungsvorlage der Kommission zum zukünftigen Umgang mit den Mitteilungen „Übergabe und mögliche Neuausrichtung der DGK-Mitteilungen“	13
Neue Redaktion stellt sich vor	23
Berichte der Arbeitskreise für den Zeitraum 2025/2026	25
Junge Kristallographen/ <i>Young Crystallographers</i> (JKYC): Arbeitskreis 1	25
Experimentelle Methoden: Arbeitskreis 3	29
Theoretische Methoden: Arbeitskreis 4	33
Chemische Kristallographie: Arbeitskreis 6	37
Physikalische Kristallographie: Arbeitskreis 7	45
Materialwissenschaftliche Kristallographie: Arbeitskreis 9	49
Wissen & Weiterbildung	51
Berichte der Reisestipendiaten	51
Reisebericht zur ECM25 in Poznań 2025	51
Reisebericht zur ECM25 in Poznań 2025	55
Reisebericht zur Swiss Summer School on Materials Chemistry 2025	60
Reisebericht zum 2. Schweizer Symposium für Materialchemie 2025, MatChem25	63
Reisebericht zum 27. Laborkurs 2025 am <i>Jülich Centre for Neutron Science</i> (JCNS)	65
Crystallify: A Modern Virtual Laboratory for Space Groups and Symmetry	69
Mitglieder & Ehrungen	73
Laudationes zur Verleihung des Lieselotte-Templeton-Preis 2026	73
Johanna Bantol	75
Greta Hempelmann	76
Lukas Manuel Seifert	77
Laudatio zur Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2026 an Florian Kleemiß	79
Laudatio zur Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2025 an Horst Philipp Beck ...	83
Jubilare 2026	89
Verstorbene Mitglieder	91

Nachruf auf Herrn Georg Schulz (24. August 1939 - 2. April 2026).....	93
Nachruf auf Herrn Jan Willem Bats (1949 - 2025).....	95
Aus dem Vorstand	97
Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.....	97
Anhang zu TOP 6.2 - Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees	107
Anhang zu TOP 6.4 - Bericht des Schatzmeisters	109
Anhang zu TOP 6.7 - Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand	111
Anhang zu TOP 6.7 - Bericht des Vertreters der Deutschen Physikalischen Gesellschaft im Vorstand der DGK	113
Zu den Änderungen bei der DGK-Vorstandswahl und zu Online- Mitgliederversammlungen.....	115
Aufrufe und Ankündigungen	117
Aufruf zur Mitwirkung in den Preiskomitees	117
35. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. - Gemeinsames polnisch-deutsches kristallographisches Treffen 2027 in Dresden.....	121
Mitgliedschaft und Beiträge	123
Homepages von DGK, DMG und DGKK	123
Antrag auf Aufnahme in die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.	124
Einzugsermächtigung.....	125
Beitragsordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.	126
Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. bezüglich personenbezogener Mitgliedsdaten	127
Einräumung von Nutzungsrechten von Beiträgen und Fotos	128
Vorstand	131
Impressum	132



XRD CAPILLARIES | MARK TUBES & MORE

We offer various standard Mark tubes for a wide range of applications. In addition to our standard products, we position ourselves in the market with customized products.



Standard Mark tubes for a wide range of applications



High-purity, amorphous quartz glass powder



Glass goniometer pins for reliable fixation of XRD capillaries



UV adhesive & lamp for rapid fixation of capillaries in a glass pin.



The XRD flame-sealing & vacuum unit fully standardises the sealing of your Mark tubes. Mark tubes are precisely positioned and fixed into special glass pins.

Aus dem Vereinsleben

Rückblick auf die 34. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V. 2026 in Lübeck

(Lars Redecke, Lübeck)

Liebe KollegInnen,

auch wenn die 34. Jahrestagung der DGK schon wieder seit längerer Zeit Geschichte ist, freue ich mich, im Namen der lokalen Organisatoren auf die Tagung zurückzublicken, die vom 25.-28. Februar 2026 im Audimax der Universität zu Lübeck stattfand. Unser herzlicher Dank geht an die 243 Teilnehmenden, die aus allen Teilen Deutschlands sowie aus 18 weiteren Ländern in den „echten Norden“ (wie sich Schleswig-Holstein selbst nennt) kamen, teilweise mit weiten Anreisewegen. Wir hoffen, dass nicht nur die Hansestadt Lübeck als UNESCO-Weltkulturerbe die Reise wert war. Auch die Tagung mit den zahlreichen Vorträgen und Diskussionen sollte einen geeigneten Rahmen für einen interdisziplinären Austausch bieten, um mit neuen Inspirationen und Ideen im Gepäck in den Forschungsalltag zurückzukehren. Die zahlreichen sehr positiven Rückmeldungen zeigen, dass Sie sich in Lübeck wohl gefühlt haben, was uns sehr freut! Auch der kurzfristig angekündigte Streik der kommunalen Busunternehmen hat die Tagung glücklicherweise nur am Donnerstagmorgen etwas beeinflusst. Allerdings war es schon ein merkwürdiges Gefühl, zum geplanten Beginn des morgendlichen Plenarvortrags allein im Hörsaal zu stehen, ohne Sprecher und Publikum.

Das Programmkomitee setzte sich in diesem Jahr aus den Leitungen aller neun Arbeitskreise der DGK zusammen, sodass alle Bereiche der Kristallographie gleichberechtigt an der Gestaltung des wissenschaftlichen Programms beteiligt waren. In äußerst produktiven Online-Sitzungen wurden grundlegende Konferenz-Themen festgelegt, Plenarsprecher ausgewählt und eingeladen sowie Mikrosymposien geplant und mit ausgewählten Vorträgen gefüllt. Allen Beteiligten herzlichen Dank für die großartige, äußerst produktive Zusammenarbeit! Es hat wirklich viel Spaß gemacht!

Die hohe wissenschaftliche Qualität der 200 eingereichten Abstracts ermöglichte es uns, ein äußerst interessantes und vielfältiges Programm zusammenzustellen, das 18 Mikrosymposien mit 100 Vorträgen umfasste, die in vier parallelen Fachsitzungen durchgeführt wurden. Zusätzlich wurde das Lebenswerk der im Jahr 2025 verstorbenen Kristallographen George Sheldrick und Rolf Hilgenfeld im Rahmen von zwei Ehrensymposien geehrt. Wegbegleitende Kolleginnen und Kollegen demonstrierten in ihren Vorträgen die wissenschaftliche Bedeutung der Forschung beider Kollegen, präsentierten aber auch persönliche Erinnerungen und Erfahrungen. Somit stellten beide Ehrensymposien ein gebührendes, emotionales Andenken an die international renommierten Kollegen dar. Traditionell sehr gut besucht waren erneut die „Lightning Talks“ der Jungen Kristallographen, in denen kurze Präsentationen das Interesse auf Posterbeiträge lenken sollten. Insgesamt 87 Poster wurden im Foyer des Audimax präsentiert, die bei *Snacks* und Getränken zum wissenschaftlichen Austausch einluden. Wie üblich wurde die Konferenz von einer Industrieausstellung begleitet, bei der sich 16 Firmen vor Ort präsentierten. Herzlichen Dank, auch den 10 weiteren Sponsoren, für diese Unterstützung, die unverzichtbar für die DGK-Jahrestagungen sind!

Höhepunkte des wissenschaftlichen Programms stellten die sechs Plenarvorträge dar, die von renommierten Experten aus den verschiedenen Bereichen der Kristallographie präsentiert wurden. Unser besonderer Dank für die wirklich hervorragenden Vorträge, welche die Bedeutung der Kristallographie in der Breite der aktuellen Wissenschaft eindrucksvoll hervorhoben, geht an:

- **Claire White** (Princeton, US): „Pair distribution function analysis of cement-based materials: Beyond the standard approach“
- **Esko Oksanen** (Lund, SE): „Macromolecular crystallography at the European Spallation Source“
- **Bo Brummerstedt Iversen** (Aarhus, DK): „Disorder in thermoelectric materials“
- **Pierro Macchi** (Mailand, IT): „The subtle exchange mechanism in magnetic coordination polymers at ambient and non-ambient conditions“
- **Eike C. Schulz** (Hamburg, DE): „Time-resolved serial crystallography: watching enzymes at work“
- **Katharine Page** (Oak Ridge, US): „Compositionally complex oxides: A modern frontier“

Auch der gesellige Austausch kam nicht zu kurz, beispielsweise auf dem Begrüßungsempfang im Foyer des Audimax nach dem DGK-Ehrenabend, den der letztjährige Max-von-Laue Preisträger Nicholas Pearce (Linköping, SE) mit einem hervorragenden Vortrag abrundete. Ein weiterer Höhepunkt war für viele der Teilnehmenden sicherlich der Gesellschaftsabend im Radisson Blu Senator Hotel direkt an der Trave gegenüber der Lübecker Altstadt. Bei einem hervorragenden Buffet und zahlreichen Getränken wurde bis in den (sehr) späten Abend gefeiert.

Ein besonderer Dank gilt den Studierenden des Bachelor-Studiengangs „Molecular Life Science (MLS)“ (3. Semester, WS 2025/26) der Universität zu Lübeck, die den Ablauf der Mikrosymposien sowie den Auf- und Abbau tatkräftig unterstützten. Hervorheben möchte ich außerdem die großartige Zusammenarbeit mit Conventus Congress Management während der Organisation und der Durchführung der Jahrestagung. Herzlichen Dank an Jessica Kolb und ihr Team!

Der „Staffelstab“ der Organisation der DGK-Jahrestagungen wurde nun an Thomas Doert (TU Dresden) weitergegeben. Wir wünschen dem neuen Organisationsteam viel Erfolg und freuen uns auf ein Wiedersehen im Februar 2027 in Dresden!

Lars Redecke

im Namen des Organisationskomitees der DGK-Jahrestagung 2026 in Lübeck

Entscheidungsvorlage der Kommission zum zukünftigen Umgang mit den Mitteilungen „Übergabe und mögliche Neuausrichtung der DGK-Mitteilungen“

(Elisabeth Fetter, Hannover; Michael Fischer, Bremen; Ute Kolb, Mainz; Tilmann Leisegang, Freiberg; Florian Meurer, Regensburg; Hartmut Stöcker, Freiberg; Alexander Wollbrink, Duisburg-Essen)

Ausgangssituation:

- Redaktion der *Mitteilungen* und Druck seit 2006 in Dresden/Freiberg (Übernahme durch Dirk C. Meyer von L. Bohaty, Köln).
- Bisherige Druckerei schließt bis 2026.
- Personelle Veränderungen des aktuellen vierköpfigen Redaktionsteams. Es möchte seine bisherige Tätigkeit abgeben und sich anderen Aufgaben widmen.
- Der neuen Redaktion obliegt es, die Strategie, ob eine gedruckte Mitgliederzeitschrift noch erwünscht oder erforderlich ist und ob das bisherige Format noch zeitgemäß ist, vorzuschlagen.

Entscheidungsfindung:

- Seitens des Vorstands wurde auf der Jahresversammlung der DGK am 11.03.2025 eine Kommission zur „Übergabe und möglichen Neuausrichtung der DGK-Mitteilungen“ gebildet und alle anwesenden DGK-Mitglieder zur Teilnahme eingeladen.
- Die Kommission hat ihre Entscheidung in drei gemeinsamen Treffen diskutiert, eine Umfrage der Mitglieder gestaltet und bis zum 31.08.2025 durchgeführt und daraus eine Entscheidungsvorlage erarbeitet.

Zusammenfassung der Empfehlung der Kommission:

Die Kommission empfiehlt dem Vorstand auf Basis aller betrachteten Aspekte

- (1) in Zukunft die formatierte PDF-Variante als das präsenste Hauptformat der *Mitteilungen* zu führen, die wie bisher auf der Internetpräsenz der DGK verfügbar ist, deren Erscheinen den Mitgliedern per E-Mail mitgeteilt wird, für die eine ISSN-Nummer beantragt und die damit von der Deutschen Nationalbibliothek (DNB) archiviert wird,
- (2) eine gedruckte Ausgabe der Mitteilungen nur im Rahmen eines *Opt-in*-Verfahrens anzubieten, bei dem Mitglieder aktiv und ausdrücklich zustimmen müssen, um ein gedrucktes Exemplar zu erhalten,
- (3) die Inhalte der PDF-Variante weiterhin wie bisher zusammenzustellen, künftig jedoch um zusätzliche Beiträge aus dem Blog sowie um Anregungen aus der Mitgliederumfrage zu ergänzen – ausgewählte Inhalte der Mitteilungen, insbesondere redaktionelle Beiträge und Tagungsberichte, sollen zusätzlich als Blogbeiträge auf der Website der DGK erscheinen, da diese Form besonders gut in modernen Medien geteilt werden kann und für eine breitere *Community* sichtbar ist (z. B. auf *LinkedIn*) – und

- (4) das Format der Mitteilungen (DIN A5) beizubehalten, Formatierungen und Layout jedoch an gegenwärtige Möglichkeiten und allgemeine Empfehlungen anzupassen.

In diesem Vorgehen wird aus unserer Sicht dem allgemeinen Meinungsbild innerhalb der DGK entsprochen, heutige Möglichkeiten der Kommunikation werden berücksichtigt, Kosten und weitere Ressourcen wie Papier, Druck und Versand eingespart. Der durch eine gedruckte Variante mit ISSN-Nummer identitätsstiftende Aspekt, die Verbundenheit mit älteren Mitgliedern und die Zugänglichkeit für weniger digital-affine Mitglieder bleiben dabei durch die *Opt-in*-Möglichkeit erhalten. Transparenz der vielfältigen Tätigkeiten unserer Gesellschaft und der informative Charakter der *Mitteilungen* sind durch die PDF-Variante weiterhin gegeben. So bleiben wir sichtbar, persönlich und verbindlich, identitätsstiftend für alle Generationen und über alle Kanäle hinweg.

Freiberg, den 28.10.2025

Mitglieder der Kommission:

Elisabeth Fetter (Hannover)
Michael Fischer (Bremen)
Ute Kolb (Mainz)
Tilmann Leisegang (Freiberg)
Florian Meurer (Regensburg)
Hartmut Stöcker (Freiberg)
Alexander Wollbrink (Duisburg-Essen)

Erläuterungen zu Punkt (1) bis (4)

Zu (1) Wie bisher soll es eine PDF-Version geben, was 75 % der Mitglieder wünschen. Zudem stellt sie ein geeignetes Format dar, um die Mitglieder in transparenter Weise über alle Aktivitäten der DGK zu informieren und die entsprechenden Berichte des Vorstands zu kommunizieren.

Zu (2) Eine gedruckte Version der Mitteilungen in einer *Opt-in*-Variante sollte zumindest in einer Übergangsphase angeboten werden. Sie ist möglich, kostengünstig und entsprechende Angebote liegen vor. Zudem gibt es mindestens 44 Personen, hochgerechnet 300 Mitglieder, die potenziell eine gedruckte Version haben möchten. Die Gründe sind: Identitätsstiftung, Archivierung (Bewahrung des kulturellen Erbes im Fachgebiet Kristallographie), den Zugang zu wissenschaftlichen Themen- und Tätigkeitsbereichen der DGK verbessern und sich der DGK nahe fühlen.

Zu (3) Ein Blog ist zeitgemäß und stellt einen Mehrwert für Autoren und DGK dar. Denn die einzelnen Blogbeiträge können leicht mit *Social-Media*-Plattformen (wie *LinkedIn* o. ä.) verlinkt und dort geteilt werden. Damit erhöht sich die Reichweite insbesondere der DGK und der Kristallographie über ihre Mitglieder hinaus und nutzt

ihre größte Stärke, die Interdisziplinarität. Das beruht jedoch auf der persönlichen Aktivität der jeweiligen DGK-Mitglieder.

Zu (4) Das Format (DIN A5) sollte beibehalten werden, da es zunächst einfacher für das neue Redaktionsteam weiterführbar ist. Das Layout sollte „moderner“ gestaltet, also gegenwärtigen Möglichkeiten und Empfehlungen, z. B. hinsichtlich der Lesbarkeit, angepasst werden.

Anlagen

- Anhang 1: Allgemeines
- Anhang 2: Darstellung der Vor-/Nachteile einer gedruckten Mitgliederzeitschrift gegenüber einer rein digitalen Lösung – mit Blick auf Mitgliederbindung, Reichweite und Vereinsidentität.
- Anhang 3: Ergebnisse der „Umfrage zur möglichen Neuausrichtung der *DGK-Mitteilungen*“
- Anhang 4: Auswertung der Mitgliederbefragung und Einschätzung

Anhang 1

Allgemeines

Zu den Mitteilungen:

- Es existiert ein Archiv zu den Online-Ausgaben der Mitteilungen aus früheren Jahren: <https://web.archive.org/web/20020703052954/http://www.kristall.ethz.ch/DGK/>
- Die Online-Ausgabe war bereits seit 1999 da: Nr. 18 (1999) bis Nr. 23 (2002).
- Jürgen Schreuer bzw. Ladislav Bohatý hatten diese damals eingeführt.
- Freiberg (Dirk C. Meyer) ist seit 2006 (fast 20 Jahre) verantwortlich.

Wie machen das andere Gesellschaften?

- DGKK: gedruckte DIN-A4-Version, aufwendigeres Layout
- IUCr: Newsletter
- DMG: Mitglieder der DMG beziehen viermal im Jahr das gedruckte Heft „GMIT“, in dem neben Gesellschaftsübergreifende redaktionelle Beiträge jede der beteiligten Geo-Gesellschaften (DMG, DGGV, PalGes u. a.) einige Seiten bekommt, um Mitteilungen zu Aktivitäten der Gesellschaft zu verbreiten. Dieses Modell lässt sich vermutlich, wegen des deutlich größeren Lesenden-Kreises der GMIT (höhere Auflage, größeres Redaktionsteam, Attraktivität für Werbekunden etc.) nicht auf die DGK übertragen.

Was sind die Voraussetzungen für „Pro Druckversion“?

- Freiwillige/Ehrenamtliche für Redaktionsteam: 1 Chefredakteur, 1 Redakteur für Werbeanzeigen, 1 Redakteur für Termine,
- Druckerei finden.

Empfehlungen für neues Redaktionsteam:

- Unterstützung/Beratung bei bisherigem Redaktionsteam einholen
- Eigenes Team zusammenstellen
- Einbeziehung von Kommentaren aus der Mitgliederbefragung
- Einbeziehung der Protokolle der Kommissionssitzungen
- Erstellung einer spezifischen E-Mail-Adresse (z. B. *Mitteilungen@DGK-Home.de*), die für alle Redaktionsmitglieder gleichbleibt
- Information der Werbekunden über ggf. Neustrukturierung der *Mitteilungen*.

Können (temporäre/permanente) Honorare/Werkverträge aus den eingesparten Mitteln bereitgestellt werden?

- die ein Redaktionsteam zusätzlich honoriert und zusätzlich motiviert,
- die einen Homepage-Verantwortlichen motivieren, die *Homepage* aktuell zu halten,
- die eine beauftragte Person motivieren, *Highlight*-Informationen aus der deutschen/internationalen Kristallographie zusammenzustellen,
- die einen verbesserten (aktuelleren) digitalen Auftritt der DGK ermöglichen, insbesondere hinsichtlich einer *Social-Media*-Strategie.

Neues Redaktionsteam

- Alexander Wollbrink (Duisburg-Essen) ist bereit, die Nachfolge der Redaktion der *DGK-Mitteilungen* zu übernehmen.

Anhang 2

Darstellung der Vor-/Nachteile einer gedruckten Mitgliederzeitschrift gegenüber einer rein digitalen Lösung – mit Blick auf Mitgliederbindung, Reichweite und Vereinsidentität.

Soll/muss es eine Art Mitgliederzeitschrift/Jahresbericht geben:

- Gesetzlicher Rahmen für eingetragene Vereine: Es besteht **keine generelle gesetzliche Pflicht**, einen Jahresbericht zu veröffentlichen. Aber: Die Mitglieder haben ein Auskunftsrecht (§ 27, § 666 BGB analog), z. B. zu Kassenstand, Tätigkeiten des Vorstands, Verwendung der Mittel.
- Ein Jahresbericht ist daher sinnvoll.
- **Fazit:** Mitteilungen sind nicht notwendig, aber sinnvoll, da Berichte zu u. a. Kassenstand, Jahresvollversammlung, Laudationes, Nachrufe bereits vorliegen und dadurch für das zurückliegende Jahr (Jahresrückblick) gebündelt abrufbar sind. Die Informationen können demzufolge auch in anderer Form an die Mitglieder herangetragen werden, z. B. durch ein PDF-Dokument, einen Newsletter, einen Blog.
- Eine Alternative oder Ergänzung zu einem PDF-Dokument wäre ein Blog. Mit einem Blog, also kurzen Beiträgen auf der Homepage, und der Einführung einer geeigneten „#Jahreszahl“, könnte man so auf der Homepage auch eine Bündelung herbeiführen.

Soll/muss es eine gedruckte Art Mitgliederzeitschrift/Jahresbericht geben oder reicht eine Online-Variante?

- Dazu **Gegenüberstellung von Pro und Contra** einer **gedruckten Form**:

Pro (Print)	Contra (Print = pro Online)
Informationen für die Mitglieder müssen transparent jeden erreichen (lt. Gesetz), daher ist gedruckte Form, die an alle Mitglieder herausgeht, gut geeignet (einfach) im Gegensatz zu Blog (möglicherweise hinter Passwortbereich und unsortiert)	Es ist Aufwand notwendig, um ein druckfähiges Dokument zu erstellen: Beiträge (Texte, Bilder) setzen, Druckanzeigen überprüfen, Kommunikation mit Druckerei; Online-Variante würde weniger ehrenamtlichen Aufwand bedeuten, weniger Verantwortung und damit niederschwelliger Gewinnung von Personen für Redaktionsteam
Haptik und Wahrnehmung: wertiger, persönlicher, mehr Aufmerksamkeit, bleibt besser in Erinnerung, Handhabbarwerdung der Existenz der DGK → „Wenn man alles abschaltet, ist Mitteilungsheft realer Beweis, dass DGK existiert“	Geringe (keine) Kosten (Kosteneinsparung); schnellere Umsetzung eines Jahresrückblicks; ggf. Ressourcenschonung da kein Druckpapier, Toner, Versand → Nachhaltigkeit der DGK
Zugänglichkeit für weniger digital affine Mitglieder, generationenübergreifend → Inklusion ist höher	Bessere Messbarkeit (Klicks, Views) einer Online-Variante
Stärkt Mitgliedsbindung und Gefühl von Zugehörigkeit	Online-Variante kann jederzeit editiert werden: mehr Flexibilität, höhere Aktualität, geringere Fehler, bessere Gewährleistung der Darstellungsqualität der Bilder und Werbeanzeigen
Langfristige Archivierung und Dokumentation; Überdauern der DGK-Präsenz im Internet → gedruckte Exemplare stets zu finden; digitale Zugänglichkeit muss stets angepasst werden (Mehraufwand)	Digitale Ausgaben ermöglichen Verlinkungen, Videos, Bildergalerien, Audio-Dateien oder eingebettete Formulare (interaktive Elemente); eine Archivierung ist dennoch möglich durch sogenannte Repositorien (mit DOI) oder durch ISSN-Nummer

Forsetzung Tabelle

Pro (Print)	Contra (Print = pro Online)
Wirkt professioneller gegenüber externen Partnern; Anzeigen in gedruckten Heften haben z. T. höheres Vertrauen und Werbewert; Kunden von Werbeanzeigen möchten u. a. gedruckte Version → jedoch noch mal zu klären bzw. Risiko eingehen Werbekunden zu verlieren	Mitgliederkommunikation ist mit Online-Variante effizienter, flexibler und ggf. nachhaltiger
Einfache Darstellung/Zugang des Jahresrückblicks → macht die Arbeit der DGK auch für die Allgemeinheit einfach zugänglich	Die eingesparten Kosten könnten anderweitig genutzt werden (professionellerer Auftritt, Stipendien, insbesondere Nachwuchsförderung)
Niederschwelligkeit für Beiträge, die nicht bei einschlägigen Journalen erscheinen könnten, aber doch für die Gesellschaft wichtig bzw. von Bedeutung sind → z. B. Berichte über Aktivitäten, insbesondere auch vom Nachwuchs	Es muss (sehr wahrscheinlich) eine flexible Druckerei geben.
Außendarstellung wird unterstützt; man kann jemanden das Heft in die Hand geben und sagen: „Das ist die DGK!“; professioneller, vertrauenswürdiger, seriösere Wahrnehmung der DGK	Newsletter-System könnte eingeführt werden, daher häufigere Ausgabe möglich, aber schnelleres Überlesen, Wegklicken möglich
Persönliche Ansprache & Identifikation bei Zusendung von <i>Mitteilungen</i> → stärkt Zugehörigkeitsgefühl	Ggf. bessere Suchfunktionen in digitaler Variante → im PDF lässt sich zwar suchen, aber nicht nach Themen jahresübergreifend, daher Blog besser
Ergänzung durch digitale Formate möglich; QR-Codes in der Printausgabe können z. B. zur Webseite führen	Erreichbarkeit neuer Zielgruppen bei Digital-Variante (fällt bei Hybridvariante weg) → jüngere WissenschaftlerInnen

Anhang 3**Ergebnisse der „Umfrage zur möglichen Neuausrichtung der DGK-Mitteilungen“**

Welches Format sollen die DGK-Mitteilungen zukünftig annehmen?

Antwort (mehrfache Stimmabgabe möglich)	Anzahl	Prozent
Blögeinträge (auf der DGK-Webseite)	65	45,77 %
PDF-Dokument (auf der DGK-Webseite)	107	75,35 %
Gedrucktes Heft (wie bisher bzw. in anderem Layout)	44	30,99 %

Wie sollen die DGK-Mitteilungen inhaltlich gestaltet werden?

Antwort	Anzahl	Prozent
Jährlicher Tätigkeitsbericht	51	35,92 %
Heft ohne Themenschwerpunkt	46	32,39 %
Themenheft (mit jährlich wechselndem Gasteditor)	45	31,69 %

Was ist Ihre Lieblingsrubrik in den aktuellen DGK-Mitteilungen?

Antwort	Anzahl	Prozent
Redaktionelle Beiträge	50	35,21 %
Tagungsberichte	26	18,31 %
Berichte der Arbeitskreise	36	25,35 %
Preisträger	10	7,04 %
Nachrufe	4	2,82 %
Termine	6	4,23 %
Werbung	0	0,00 %

Wären Sie prinzipiell bereit einen Artikel für die DGK-Mitteilungen zu schreiben?

Antwort	Anzahl	Prozent
Ja	74	52,11 %
Nein	64	45,07 %
Keine Antwort	4	2,82 %

Haben Sie weitere Anmerkungen zur Neugestaltung der DGK-Mitteilungen?

Antwort	Anzahl	Prozent
Antwort	37	26,06 %
Keine Antwort	105	73,94 %

Anhang 4

Auswertung der Mitgliederbefragung und Einschätzung

Unterscheidung in (1) gedruckte Variante, (2) Formatierung/Layout und (3) Inhalte

Zu (1):

- Rücklaufquote ca. 15 % (142 Rückläufe bei aktuell 962 Mitgliedern). D. h. 85 % der Mitglieder scheinen generell desinteressiert. Dennoch sollte die Befragung Aussagekraft haben, da sich deutlich mehr Mitglieder beteiligt haben, als bei der vergangenen Jahresversammlung (5 % – 6 %) anwesend waren.
- $44/142 = 31\%$ der Befragten wollen ein gedrucktes Heft. Berücksichtigt man das Desinteresse der 85 % anderen und unterstellt ihnen, dass es ihnen egal ist, ob ein gedrucktes Heft vorliegt, dann würden $44/962 = 5\%$ ein gedrucktes Heft wollen. Das sind sehr wenige. Ein selektiver Versand einer gedruckten Version ist möglich: etwas aufwendiger aber Befriedigung derjenigen, die es wünschen. Gleichbleibende Qualität wäre möglich. Es wären maximal 300 Exemplare, wenn man die Zahlen hochskaliert, mindestens aber 50 Exemplare zu drucken. Dieser Umfang wäre in Hannover (und auch noch bis auf weiteres in Dresden) möglich. Eine *Opt-in*-Variante könnte dem Rechnung tragen: „Wer das Heft in gedruckter Form haben möchte, bekommt es.“
- Kosteneinsparung von ca. 3000 € pro Jahr möglich. Einsatz der Druckkosten für Anderes. Bisher deckt Werbung diese Kosten nicht vollständig ab und kann dieses auch nicht leisten, da das Heft damit Gefahr läuft, zu kommerziell zu werden, was das Finanzamt beobachtet.
- Bei *Opt-in*-Variante: Wenn ein Heft bisher ca. 10 € kostet, dann wären ca. 300 Hefte ohne zusätzliche Werbeeinnahmen möglich. Der Druckpreis könnte, laut eines Angebots der Druckerei „DruckTeam – Druckgesellschaft mbH“ aus Hannover auf ca. 4 € pro Heft gesenkt werden. Damit gäbe es trotzdem Kosteneinsparung. Werbeanzeigen wären nicht mehr notwendig und ein Anzeigenredakteur müsste nicht mehr zur Verfügung stehen.
- Keine Kommentare betreffen irgendeiner Art „gesetzlicher“ oder „organisatorischer“ Notwendigkeit einer gedruckten Variante.
- Nur ein Kommentar (Nr. 589) setzt sich mit der Identifikation auseinander, dass ein Heft da sein muss.
- 75 % möchten eine PDF-Variante wie bisher.
- Nur eine PDF-Variante würde die Verbundenheit zu älteren nicht wirklich schwächen, da die Aktivitäten der DGK dort tatsächlich nachlesbar sind. Zudem ist Textgröße variabel (leichtere Lesbarkeit).

- Die Nutzung eines öffentlichen Repositoriums (mit DOI) ist sinnvoll und sollte geprüft werden. Ebenso die Beantragung einer ISSN-Nummer, die eine Archivierung in der Deutschen Nationalbibliothek ermöglicht.
- Ein Blog sollte definitiv eingerichtet werden. Er hat eine größere Reichweite. Z. B. sind einzelne Artikel auf *Linkedin* oder auf anderen Plattformen einfach zu verlinken. Dort werden sie dann verteilt und multiplizieren sich. Damit ergäbe sich gleichzeitig eine größere Reichweite der DGK und ein größerer Mehrwert für Autoren. Später kann daraus zusätzlich ein Beitrag für die Mitteilungen generiert werden.

Zu (2):

- Überarbeitung des Layouts wird gewünscht.

Zu (3):

- Die Idee mit kurzen Beiträgen der Preistragenden ist super und sollte sofort aufgegriffen werden. Für die LT-Preise werden solche Dokumente ja bereits eingereicht.
- Mehrheit spricht sich für „mehr als jährlichen Tätigkeitsbericht“ aus. Das inhaltliche Interesse ist an redaktionellen Beiträgen, Berichten und Preistragenden am größten.
- 50 % der Befragten wären bereit etwas zu schreiben. Das entspricht 74 Personen. Bei 3 Artikeln pro Ausgabe wären redaktionelle Beiträge für 20 Jahre gewährleistet.
- Neben Themenheften könnten auch ein geografischer Schwerpunkt als Leitthema gewählt werden. Hier könnte der nächste Tagungsort sich z. B. wissenschaftlich vorstellen.
- Die Einführung einer Kategorie „Berichte aus anderen Vereinigungen“ scheint sinnvoll.
- Redaktionelle Beiträge sind wichtig, aber mehr Aufwand muss wahrscheinlich nicht betrieben werden. Wenn die Preisträger einen Beitrag schreiben, z. B. in einem *Proceedings*-Stil, dann stehen jeweilige Arbeitsgruppen dahinter. Somit würde die *Community* arbeitsgruppenspezifisch informiert, und ein spezieller „Highlight-Artikel“ wäre damit ebenso vorhanden.

- Es gibt Kommentare (Personen) die insbesondere Beiträge zur Historie der Gesellschaft/Kristallographie betreffen und deren Dokumentation anregen.

Es gibt Content, der nicht für Blog-Eintrag geeignet ist (Berichte der Verantwortlichen, Schatzmeister etc.). Dieser muss in ein PDF-Dokument. Daher ist PDF-Variante notwendig.

Neue Redaktion stellt sich vor

(Alexander Wollbrink, Hannover)

Sehr geehrte Leser,

ich bin Alexander Wollbrink und ich freue mich auf meine Tätigkeit als neuer Redakteur der DGK-Mitteilungen ab diesem Jahr 2026.

Ich möchte mich kurz vorstellen: Ich bin studierter Geowissenschaftler mit dem Schwerpunkt Mineralogie und Geochemie. Ich befasse mich mit Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, Synthese und Charakterisierung von anorganischen Materialien u. a. im Bereich H_2 -selektiver Membranen, O_2 -Speichermaterialien in TWCs oder photokatalytisch aktiven Materialien.



Alexander Wollbrink

Die Übergabe der Redaktion erfolgt in diesem Jahr in enger Zusammenarbeit mit der bisherigen Redaktion mit dem gewohnten **Redaktionsschluss Ende Mai**, also dem **31.05.2026**. Die Veröffentlichung des Mitteilungsheftes erfolgt voraussichtlich im Juli eines Jahres. Im Rahmen der Übergabe und Neuausrichtung der „Mitteilungen“ gibt es folgende Neuerungen:

- **neue Kontaktadresse:** redaktion@dgk-home.de
- **Weltweit gültige ISSN** (*International Standard Serial Number*) jeweils für die Online- und Druck-Ausgabe (s. Impressum)
- **Zusätzliche Archivierung und Zuordnung einer DOI** (*Digital Object Identifier*) beim Institutionellen Repositorium der Leibniz Universität Hannover und TIB (Leibniz Information Centre)

In diesem Jahr 2026 wird das Mitteilungsheft Nr. 56 letztmalig an alle Mitglieder in gedruckter Form verschickt. Ab 2027 wird das Mitteilungsheft als **Hauptformat online als PDF-Datei** erscheinen. Das Mitteilungsheft bleibt aber in gedruckter Form erhalten. Dazu müssen Sie aktiv werden: **Falls gewünscht, beantragen Sie das gedruckte Heft bitte via Opt-In-Verfahren** mit Hilfe des Änderungsantrags (**QR-Code**).



Das Mitteilungsheft soll Informationen über den vielfältigen und aktuellen Tätigkeitsbereich der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. nicht nur dokumentieren, sondern auch über alle Generationen hinweg identitätsstiftend und vor allem sichtbar sein.

Dafür benötige ich Ihre Unterstützung.

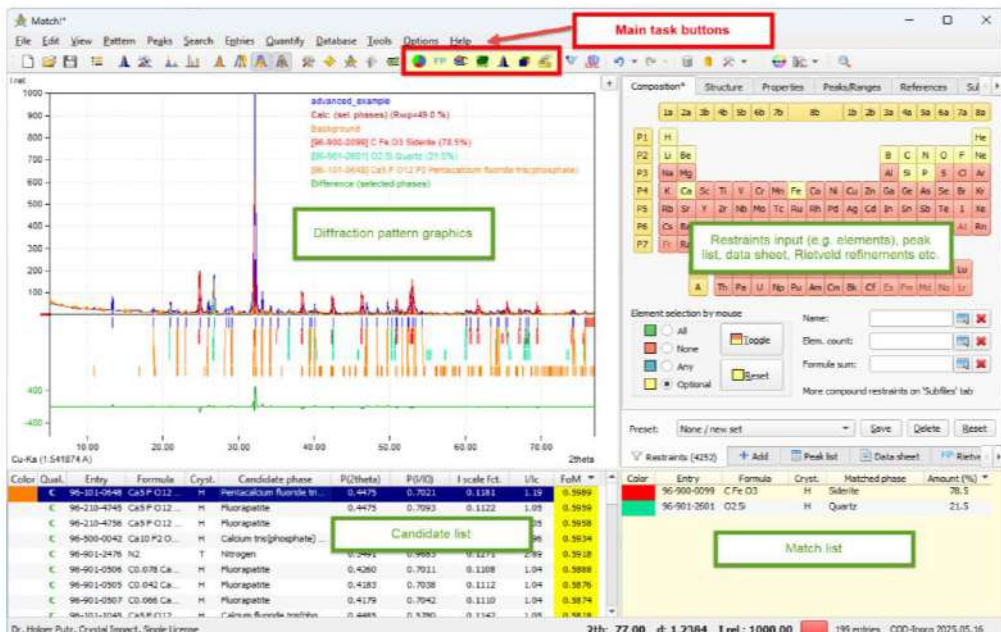
Ich möchte hiermit alle Mitglieder der DGK aus den verschiedenen Arbeitskreisen ermutigen Beiträge, z. B. anstehende Wahlen, Stipendiaten der DGK, Reiseberichte zu Workshops, diesjährige Preisträger der verschiedenen Auszeichnungen der DGK unter der neuen Kontaktadresse redaktion@dgk-home.de einzureichen. Abschließend möchte ich mich bei der aktuellen Redaktion herzlichst für die Unterstützung bei der Übergabe und Ihren Beitrag in den zurückliegenden 20 Jahren bedanken.



MATCH!

Phase Analysis using Powder Diffraction

Neue Version 4.3 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 4.3** 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 der Arbeitskreise für den Zeitraum 2025/2026

Junge Kristallographen/Young Crystallographers (JKYC): Arbeitskreis 1

(Ben Ebel, Aachen; Fernando Jardim, Regensburg; Anushka Ghosh, Berlin)



Ben Ebel

Das Berichtsjahr 2025/26 war erneut ein erfolgreiches und aktives Jahr aus Sicht des AK1. Unser jährliches Treffen, welches sich an Nachwuchskristallograph:innen aus dem mitteleuropäischen Raum richtet, durften wir in diesem Jahr am Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) für Materialien und Energie, BESSY II, abhalten. Wir möchten uns hier noch einmal ausdrücklich bei Susan Schorr (HZB), Daniel Többens (HZB) und Uwe Müller (HZB) sowie bei Melanie Nentwich (RIC/DESY) für ihre Zeit und ihre exzellenten Vorträge bedanken.

Die eingeladenen Sprecher:innen gewährten uns einen eindrucksvollen Einblick in die Themengebiete FAIR Data, den Operationsalltag einer Beamline, sowie aktuelle Synchrotron-Forschung in makromolekulare Kristallographie und an Halbleitern für Solarzellen. Zudem bekamen wir Eindrücke von ihrem persönlichen Weg zu ihrer jetzigen Position.

Zusätzlich möchten wir uns natürlich auch bei unseren Sponsoren STOE, DECTRIS, Rigaku, OlexSys und OSCARS sowie bei der DGK bedanken, ohne die unsere Treffen in der aktuellen Form gar nicht möglich wären.

Mit 15 Teilnehmenden und 12 Beiträgen, bestehend jeweils aus einem Lightning Talk und einer Posterpräsentation, war die Veranstaltung wie immer maßgeblich durch die aktiven Beiträge der Teilnehmenden geprägt. Das Programm bot neben den wissenschaftlichen Vorträgen auch Führungen durch die Experimentierhallen von BESSY II, bei denen die Teilnehmenden praktische Einblicke in den Betrieb des Synchrotrons erhielten.

Wie immer wurde die Veranstaltung mit ausreichend Gelegenheiten zum informellen Austausch unter den Jungen Kristallograph:innen ausgestattet, ob während der Poster-Session, beim gemeinsamen Abendessen im *Ristorante Due Amici* oder am Rande der Laborführungen. Abschließend wurden drei STOE-Poster-Preise für die überzeugendsten Kombinationen aus Lightning Talk und Poster vergeben. Das Preiskomitee zeichnete in diesem Jahr Benjamin Fahl, Martyna Peczek und Melissa Janesch aus – herzlichen Glückwunsch!

Jetzt freuen wir uns schon auf unser nächstes Treffen, welches vom 30.09. - 02.10.26 bei STOE in Darmstadt gemeinsam mit der GDCh Gruppe *Junge Feste* stattfindet. Weitere Informationen dazu folgen in unserem *Newsletter* sowie über *Instagram*, *LinkedIn* oder *Bluesky*. Die Accounts werden von zwei neuen Mitgliedern unseres Organisationsteams Francisca Bartley (RWTH Aachen) und Hannah Waldmann (LMU) geleitet – vielen Dank und willkommen im Team!

Abschlussarbeiten im Bereich der Kristallographie verliehen. Dieses Jahr wurde der Preis verliehen an: **Johanna Bantol** (FZ Jülich) in Anerkennung ihrer Arbeit zur CO₂-emissionsreduzierten Wasserstoffproduktion von Wolfram- und Vanadiumoxid mittels *in situ* Röntgenpulverdiffraktometrie, **Greta Hempelmann** (RWTH Aachen) in Anerkennung



Egal ob nach der Führung oder während der Poster-Session: Zeit für Diskussionen und Austausch gibt es immer.



Gruppenbild der Teilnehmer vor dem BESSY II.

ihrer Arbeit zur Koordinationschemie von Metall-Radionukliden mit TREN-basierten Liganden für theranostische Radiopharmaka und **Lukas Manuel Seifert** (RWTH Aachen) in Anerkennung seiner Arbeit zur Vorhersage von Elektronendichten mittels maschinellen Lernens für die Anwendung in der Kristallstrukturverfeinerung großer Moleküle. Wir gratulieren allen Preistragenden und freuen uns auch in Zukunft auf neue Bewerber:innen. Die Laudationes zum Preis finden sich weiter hinten in dieser Ausgabe der *DGK-Mitteilungen*.

Neben den hervorragenden Vorträgen der Lieselotte-Templeton Preistragenden, die in einem eigenen Mikrosymposium präsentiert wurden, gab es auch in diesem Jahr erneut die *Lightning Talks*, in denen dieses Jahr 14 Nachwuchsforschende in kurzen 5-Minuten-Vorträgen das Forschungsthema ihres Posters zusammengefasst.

Am Abend nach der Poster-Session fand das *Get Together* statt, bei dem die



Suchbild: Jungkristallograph:innen (und ein PI) nach dem Konferenz-Essen im Radisson Blu Senator Hotel.

Zusammensetzung des Vorstands des AK1 angepasst wurde: Anushka Ghosh, die zuvor den AK1 als Chair geleitet hatte, unterstützt den Ausschuss nun in der Funktion des beratenden Chair. Ben Ebel, der vorherige Co-Chair, übernahm die Rolle des Chair, und Fernando Jardim wurde zum neuen Co-Chair gewählt. Das *Get Together* war sehr gut besucht und markierte einen wichtigen Meilenstein für den AK1, da nach der Veranstaltung unsere Mitgliederliste erstmals die Marke von 300 Mitgliedern überschritt.

Auch hier wurden erneut STOE-Poster-Preise für die besten Kombinationen aus Poster und Lightning Talk an Hannah Waldmann, Lea von Soosten und Daniel Brück ausgegeben – herzlichen Glückwunsch!

Zu guter Letzt wollen wir uns noch einmal bei Lars Redecke für die fantastische Organisation und das starke Einbinden unserer Meinungen und Vorschläge während der Planungsphase der Konferenz bedanken und 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.

Crystal orientation metrology

Si | SiC | Diamond | AlN | GaAs | Quartz | LiNbO3 | BBO and 100s more

Azimuthal scan based with modern workflow - Simple. Fast. Precise.



Omega Theta (XRD)

Fully automated vertical three-axis X-ray diffractometer for ultra fast crystal orientation



DDCOM

Ultra-fast bottom surface measuring crystal orientation in a compact package



SDCOM

Ultra-fast, flexible, top surface measuring crystal orientation in a compact package



Wafer XRD 200

Fast, precise and fully equipped solution for wafer orientation and sorting



Scan the
QR code to
learn more

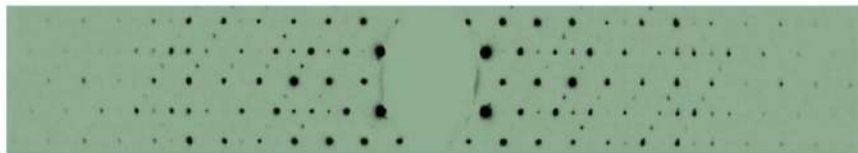
www.malvernpanalytical.com



**Malvern
Panalytical**

Experimentelle Methoden: Arbeitskreis 3**WiSe-Cryst 2026 Winter School on Electron Crystallography**

(Tatiana Gorelik und Genevieve Wilbs, Jülich)



Because education is integral to scientific work, the organization of scientific schools is crucial. Even experts gain new perspectives when programmes move beyond narrow specialties to include emerging approaches and cross-disciplinary ideas. Erice crystallographic schools have long exemplified this, setting a high bar for both teaching and organization.



In 2025, a school on electron crystallography was held in Erice (Italy) under the direction of Aleander Eggeman, Mauro Gemmi and Tatiana Gorelik. The school was planned for 40 participants but ultimately admitted 43; more than 80 applications were received, leaving many applicants unplaced and demonstrating strong demand for additional training in the field.

While the Erice atmosphere is unique and not easily replicated, we sought complementary strengths when organizing a winter school in Germany. Held on the campus of Forschungszentrum Jülich at the Ernst Ruska-Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons (ER-C), the obvious advantage was direct access to TEMs. We therefore designed the programme around extensive hands-on sessions on TEMs, showcasing different experimental setups available at ER-C for 3D electron diffraction (3D ED) data collection.

The lecture programme covered the core of electron crystallography: fundamentals of electron scattering and symmetry determination, and crystallographic approaches to the phase problem (direct methods, global optimization, iterative algorithms, molecular replacement). We deliberately presented a spectrum of structure-solution approaches to emphasize the field's interdisciplinary nature. Emerging topics and neighbouring areas included ultra-low and ultra-high energy electrons, machine learning in crystallography, crystal structure prediction, coherent diffraction imaging, 4D-STEM techniques, defect analysis, and more.

Nearly half the programme was devoted to demonstrations and tutorials, giving attendees practical experience with various experimental setups and 3D ED data-collection strategies. Commercial and academic solutions were presented side-by-side; we gratefully acknowledge the active contributions of our industry partners Thermo Fisher Scientific, Rigaku, Tescan, Dectris, Nanomegas and Gatan. Their support—

both financial and programmatic—was particularly valuable given the current global climate.

Academic sponsors included HiDA, IUCr, ECA, EMS, DGE and DGK. We especially thank DGK for reliable and flexible support, and Christian Lehmann for helping navigate administrative matters related to events hosted by Helmholtz and Max-Planck institutions. We hope that streamlined guidelines for such settings will be established in the future to optimize the administrative effort for all involved.



The Winter School ran successfully: over 70 people attended in total, including 52 registered participants (40 external and 12 from FZJ) and 21 lecturers and demonstrators, representing three continents. More than one third of the participants were from Germany, alongside strong contingents from Belgium, Switzerland and the Czech Republic.

We are grateful to DGK and all sponsors and partners, and we look forward to continued collaboration and further training opportunities in electron crystallography.

Bericht zum DMG-Shortcourse 2025 „Anwendungen der Festkörper NMR Spektroskopie in der mineralogischen und geowissenschaftlichen Forschung“ vom 10.-13. Juni 2025 in Bochum

(Michael Fechtelkord, Bochum; Isabelle Hartleib, Tübingen; Felix Reinhard, Tübingen; Nimo Radtke, Potsdam)

Vom 10. bis 13. Juni 2025 fand am Institut für Geologie, Mineralogie und Geophysik der Ruhr-Universität Bochum bereits zum 22. Mal der DMG-Shortcourse zur Anwendung der Festkörper-NMR-Spektroskopie in den Geowissenschaften statt. Unter der Leitung von Dr. Michael Fechtelkord nahmen sieben Teilnehmer aus verschiedenen Fachrichtungen an der Veranstaltung teil – darunter drei Masterstudenten, drei Doktoranden mit Forschungsschwerpunkten in den Geowissenschaften und der Zementforschung sowie ein NMR-erfahrener Mitarbeiter aus der Industrie aus Tübingen, Potsdam, München und Ludwigshafen.



Der erste Tag begann mit einer Einführung in die physikalischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie, deren geschichtliche Entwicklung, den Geräteaufbau sowie typische Pulsfolgen zur Messung von Spin-Gitter-Relaxationszeiten. Im Fokus stand anschließend die detaillierte Theorie zur Protonenrelaxation (^1H), einschließlich der BPP-Gleichung zur Beschreibung dynamischer Prozesse. Am Nachmittag wurde die Theorie anhand temperaturabhängiger T_1 -Messungen an Tetramethylammoniumjodid (TMAJ) direkt in der Praxis angewandt. Die Teilnehmer führten unter Anleitung erste Experimente am NMR-Spektrometer durch, bestimmten relevante Parameter wie Pulslängen und RF-Feldstärken und werteten die erhaltenen Daten klassisch auf halblogarithmischem Papier aus. Dabei wurden Aktivierungsenergien und Korrelationszeiten aus den T_1 -Daten ermittelt. Der Abend klang bei einem geselligen Kennenlernen in der Kneipe „Filou“ am Buscheyplatz aus.

Der zweite Tag widmete sich zunächst den Grundlagen der magnetischen Wechselwirkungen – insbesondere der homonuklearen und heteronuklearen dipolaren Kopplung sowie der chemischen Verschiebung. Nach der theoretischen Einführung wurde das Konzept des *Magic Angle Spinning (MAS)* als Ausmittelungstechnik vorgestellt. Im anschließenden Praxisteil führten die Teilnehmer MAS-NMR-Experimente an synthetischen Mineralien durch (^1H , ^{19}F und ^{29}Si), unter anderem an aluminiumreichen F/OH-Phlogopiten. Die am Nachmittag erfolgende Auswertung der Spektren erfolgte mithilfe der Software *DmFit2023*. Hier standen insbesondere die Anpassung von Linienformen, die Einbindung von Seitenbanden sowie die Interpretation chemischer Verschiebungen im Fokus.

Am dritten Workshoptag lag der Schwerpunkt auf der Anwendung von Multipulstechniken. Nach der Einführung in das Hahn'sche Echo wurden verschiedene Korrelationsexperimente diskutiert – darunter *Cross-Polarization Magic Angle Spinning (CPMAS)*, *Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment (INADEQUATE)* und *heteronukleare Kopplungen*. In der Praxis führten die Teilnehmer kontaktzeitabhängige CPMAS-Experimente an Kaolinit durch. Dabei wurden unter anderem die Hartmann-Hahn-Bedingung eingestellt sowie Pulsängen und RF-Feldstärken ermittelt. Im Auswertungsteil wurden H-Si-Abstände anhand des zweiten Moments berechnet und mithilfe von Excel grafisch dargestellt. Ergänzend erfolgte eine vertiefende Einführung in die Spektrenanalyse mit *DmFit2023*, wobei insbesondere Anisotropien und Linienformparameter behandelt wurden.

Am letzten Tag wurden die theoretischen und experimentellen Herausforderungen bei der Untersuchung von Kernen mit einem *Kernspin $I > \frac{1}{2}$* thematisiert. Nach einer Einführung in die Quadrupolwechselwirkungen und deren Auswirkungen auf Spektren unter MAS-Bedingungen wurden verschiedene NMR-Methoden vorgestellt, darunter:

- *Double Rotation (DOR)*
- *Multi-Quanten-Magic-Angle-Spinning (MQMAS)*
- *Satellite Transition Spectroscopy (SATRAS)*

Im praktischen Teil führten die Teilnehmer ^{23}Na -MAS-Experimente an ausgewählten Salzen sowie eine ^{27}Al -SATRAS-Messung an Korund durch. Die anschließende Spektrenauswertung mit *DmFit2023* ermöglichte eine detaillierte Analyse von Quadrupollinienformen und Satellitenübergängen.

In der abschließenden Diskussionsrunde wurden Eindrücke gesammelt, Anregungen besprochen und die Ergebnisse der intensiven vier Tage reflektiert. Die Rückmeldungen der Teilnehmenden fielen durchweg positiv aus. Besonders hervorgehoben wurden die ausgewogene Kombination aus Theorie und Praxis, der hohe fachliche Anspruch sowie die lebendige und anschauliche Vermittlung durch Dr. Fechtelkord.

Insgesamt bot der Workshop eine ausgewogene Mischung aus theoretischem Wissen und praktischer Erfahrung. Die vielfältigen Anwendungen der Festkörper-NMR-Spektroskopie wurden umfassend und praxisnah vermittelt. Dank der klar strukturierten Organisation, des lebendigen Vortragsstils und der einprägsamen, vergleichsbasierten Erklärungen konnten auch komplexe Prozesse nachvollzogen und die Begeisterung bei allen Teilnehmern geweckt werden.

Theoretische Methoden: Arbeitskreis 4

(Florian Kleemiss, RWTH Aachen)

Im Rahmen der 34. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) in Lübeck organisierte der AK 4 zwei *Plenary Lectures*, die das wissenschaftliche Profil des Arbeitskreises unterstreichen:

- **Prof. Bo B. Iversen** (Aarhus University) präsentierte aktuelle Entwicklungen in der Analyse von Fehlordnung in thermoelektrischen Materialien.
- **Prof. Piero Macchi** (Politecnico di Milano) stellte Fortschritte in der Modellierung von Austauschmechanismen in magnetischen Koordinationspolymeren bei Umgebungs- und Extrembedingungen vor.

Zusätzlich zu den Plenary Lectures wurden von AK 4 zwei Mikrosymposien organisiert, die sowohl das methodische Spektrum als auch die wachsende Bedeutung von Dateninfrastrukturen in der Kristallographie reflektierten:

- **„New Trends and Modelling of Crystal Structures and Properties“** – Dieses Symposium widmete sich neuartigen Modellierungsansätzen, die strukturelle Eigenschaften von Kristallen vorhersagen und optimieren und in Beziehung setzen können.
- **„Theory and Software, Data Infrastructure, Big Data, and Artificial Intelligence“** – Hier standen aktuelle Entwicklungen in theoretischer Software, die Gestaltung von Dateninfrastrukturen, die Nutzung von Big-Data sowie KI-gestützte Analyseverfahren im Fokus.

Beide Mikrosymposien wurden durch zahlreiche Vorträge und Posterpräsentationen belebt und boten ein intensives Forum für den fachlichen Austausch zwischen jungen Forschern, erfahrenen Wissenschaftlern und Industriepartnern. Die aktive Beteiligung der AK-4-Mitglieder verdeutlichte die lebendige und interdisziplinäre Ausrichtung des Arbeitskreises.

Im September 2026 findet das *2nd PhD Seminar Chemical Crystallography* statt, welches von der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) ausgerichtet wird. Das viertägige Treffen vom 14. bis 17. September wird von der DGK finanziell durch einen Antrag des AK 4 unterstützt; die lokale Koordination liegt bei Prof. Dr. Florian Kleemiß. Ziel des Seminars ist die niederschwellige Vernetzung von Promovierenden: Jede*r Teilnehmende stellt eigene Forschungsergebnisse vor, Freiwillige übernehmen die Rolle des *Session-Chair* und leiten Diskussionen. *Highlight* wird ein *Workshop* zur Raumgruppenbestimmung in schwierigen Fällen sein, geleitet von Regine Herbst-Irmer und Anna Krawczuk. Weitere Informationen zum Seminar finden Sie unter <https://chemkristphd.de>.

AK 4 unterstützt aktiv die Initiative der SIG 2 der *European Crystallographic Association* (ECA) zur Entwicklung eines erweiterten Quantum-Crystallography-CIF. In diesem Zusammenhang wird Prof. Dr. Florian Kleemiß gemeinsam mit internationalen Kollegen*innen an der Definition und Implementierung neuer Datenstandards arbeiten, um die Reproduzierbarkeit und Austauschbarkeit quantenkristallographischer Modell- und Ergebnisdaten zu verbessern. Dieses Projekt ist ein wichtiger Baustein zur

Umsetzung von *FAIR-Data*-Prinzipien (*Findable, Accessible, Interoperable, Reusable*) im Bereich der Kristallographie.

Der Arbeitskreis 4 bleibt zudem bestrebt, Methodenentwicklung und Validierung von Kristallstrukturdaten weiter voranzutreiben. Hierzu zählen geplante Workshops zu automatisierten Validierungsverfahren, die Einbindung von KI-Methoden in die Datenanalyse sowie die Zusammenarbeit mit dem *IUCr Data Committee* und anderen internationalen Gremien.

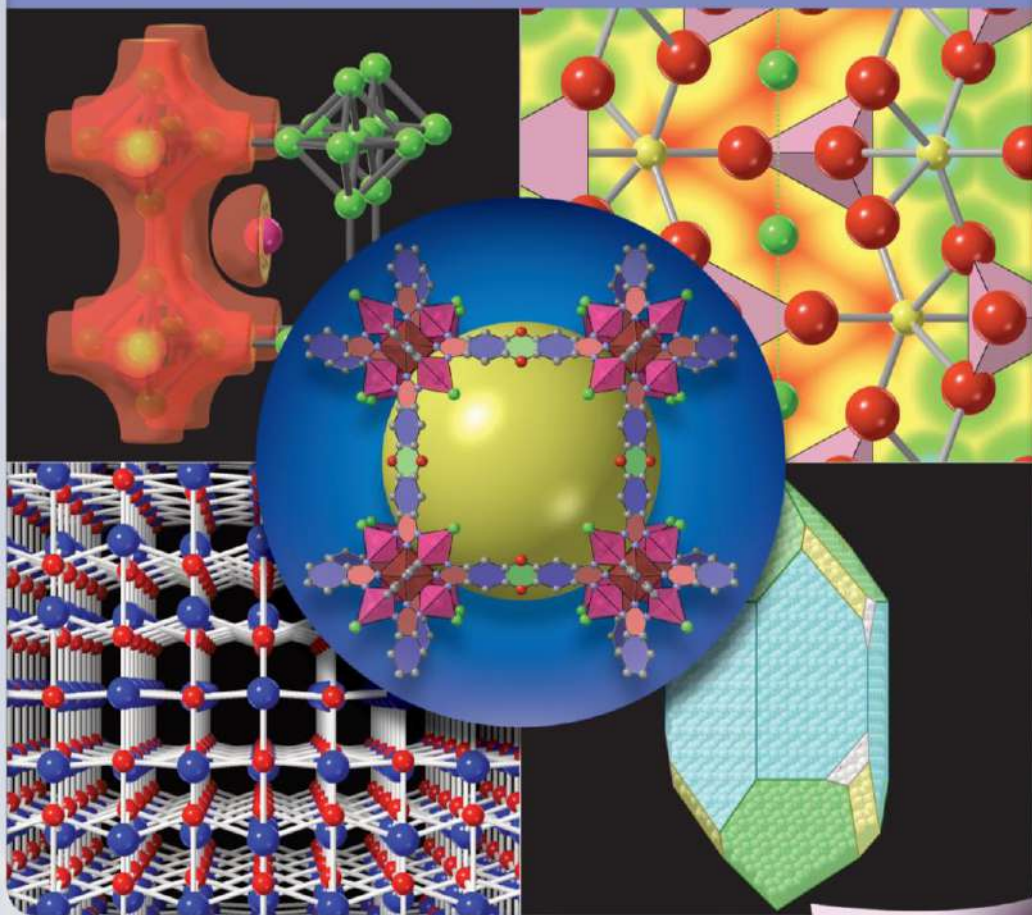
NEW
version 11.7

CRYSTALLOGRAPHY FOR THE 21ST CENTURY

CrystalMaker[®]

CrystalMaker[®] 11 is the easiest way to understand crystal/molecular structures & properties. Featuring the best interface, graphics, animation, video—plus breakthrough energy modelling.

Now with MOF Automation!



Since 1994

32 Years of Innovation

CrystalMaker Software Ltd
Oxford • UK

WWW.CRYSTMALMAKER.COM

Free Demo Software
Video Tutorials



Chemische Kristallographie: Arbeitskreis 6**6th International School on Aperiodic Crystals 2025 (ISAC-6) in Dresden**

(Eteri Svanidze und Thomas Doert, Dresden)

Vom 1. bis 5. September 2025 fand am Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe (MPI-CPFS) in Dresden die fünftägige *6th International School on Aperiodic Crystals* statt (<https://www.cpfs.mpg.de/isac-6>). Die Reihe von Sommerschulen wurde 2010 von der Kommission „Aperiodic Crystals“ der *International Union of Crystallography* (IUCr) ins Leben gerufen und findet in einem dreijährigen Turnus statt; dieses *Jahr als Satellite Meeting* der ECM-35 in Poznan und Lviv.

50 Teilnehmerinnen und Teilnehmer aus aller Welt waren der Einladung von Dr. Eteri Svanidze (MPI CPFS, Dresden) und Prof. Thomas Doert (Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie der TU Dresden) gefolgt, um in 14 Vorträgen die Grundlagen zu aperiodischen Kristallen, Superraumsymmetrie, und Quasikristallen zu erlernen, sowie profunde Einblicke in diffuse Streuung, elektronische und physikalische Eigenschaften aperiodischer Kristalle, und in aperiodische magnetische Strukturen zu erhalten. In vier ausgedehnte Übungseinheiten lernten die Teilnehmenden den Stoff mit tatkräftiger Unterstützung der Dozentinnen und Dozenten anzuwenden und zu vertiefen.

Die Vortragenden, allesamt international renommierte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, haben durch ihre didaktisch klug aufgebauten Beiträge und ihr großes Engagement bei den Übungen wesentlich zum Erfolg der Veranstaltung beigetragen.

Nach einführenden Vorträgen von Prof. Marc de Boissieu (Grenoble), Prof. Sander van Smaalen (Bayreuth) und Dr. Václav Petříček (Prag), konnten sich die Kursteilnehmer:innen bereits am Lösen einer modulierten Kristallstruktur versuchen. Prof. Emilie Gaudry (Nancy) beleuchtete am Dienstag die elektronischen und physikalischen Eigenschaften aperiodischer Kristalle bevor Prof. Tsunetomo Yamada (Tokio) die Grundlagen zum Verständnis von Quasikristallen legte. Der Zusammenhang zwischen diffuser Streuung und Fehlordnung wurden am Mittwoch von Prof. Ella M. Schmidt (Bremen) erörtert bevor Prof. de Boissieu in das Konzept kollektiver Anregungen in aperiodischen Strukturen einführte. Am Donnerstag gewährten Dr. Eteri Svanidze und Prof. Juri Grin (Dresden) spannende Einblicke in Strukturen und in die chemische Bindung in komplexen intermetallischen Verbindungen. Nach einem zweiten Vortrag über Quasikristalle analysierten die Teilnehmenden unter Anleitung von Prof. Yamada das Beugungsbildes eines ikosaedrischen Quasikristalls. Der letzte Tag der Schule war dem Thema aperiodische magnetische Strukturen in Theorie (Prof. Anuradha Jagannathan, Paris) und Praxis (Dr. Margarida Henriques (Prag) gewidmet, und wurde ebenfalls in einer Übung vertieft.

In einer *Postersession* am Dienstag bestand Gelegenheit, eigene Forschungsergebnisse vorzustellen und mit den Dozentinnen und Dozenten zu erörtern. Die drei besten Posterbeiträge wurden anschließend prämiert.

Abgerundet wurde das Programm mit einer Exkursion in die *terra mineralia* in Freiberg, eine der größten Mineraliensammlungen weltweit.

Der hohen Informationsdichte und den anspruchsvollen Übungsaufgaben begegneten die Teilnehmerinnen und Teilnehmer durchweg mit hoher Motivation und

Konzentration, die sich während der Woche auch in vielen lebhaften Diskussionen in Vorträgen, Übungen und an den Postern, aber auch außerhalb des Seminarraums widerspiegeln.

Die ISAC-6 bot insbesondere Nachwuchswissenschaftler:innen eine hervorragende Plattform, sich fundierte Kenntnisse von Strukturen und Eigenschaften aperiodischer Kristalle in Theorie und Praxis anzueignen. Die Kombination aus Vorlesungen, Tutorien und Posterdiskussionen förderte die Vernetzung, den Gedankenaustausch und potenzielle zukünftige Kooperationen. Die praktischen Komponenten einer solchen Veranstaltung sind besonders wichtig, da viele Konzepte und *Software-Tools* dieses Themenkomplexes nicht zur Standardausbildung gehören.

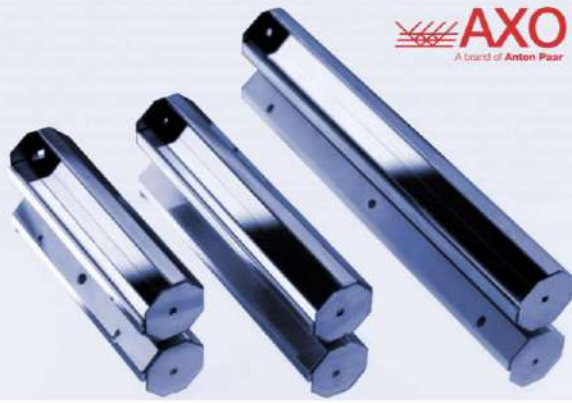
Dank der großzügigen finanziellen Unterstützung durch die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, die Gesellschaft Deutscher Chemiker und die IUCr konnten die Teilnahmegebühren für junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler reduziert und Reisekostenzuschüsse gewährt werden.

Unser Dank gilt auch dem „*European Integrated Center for the Development of New Metallic Alloys and Compounds*“ (ECMetAC, Leuven, B), dem Sonderforschungsbereich 1143 „Korrelierter Magnetismus: Von Frustration zu Topologie“, sowie den industriellen Sponsoren Bruker AXS (Karlsruhe), Dectris (Baden, CH), Quantum Design Europe (Pfungstadt), Rigaku SE (Neu-Isenburg), und STOE & Cie. (Darmstadt) für die finanzielle Unterstützung.

Nicht zuletzt bedanken wir uns bei den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des MPI-CPfS für die Bereitstellung der Infrastruktur sowie die freundliche, kompetente und unkomplizierte Unterstützung im Vorfeld und während der Veranstaltung!



(Foto: U. Prautzsch, MPI-CPfS)



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)

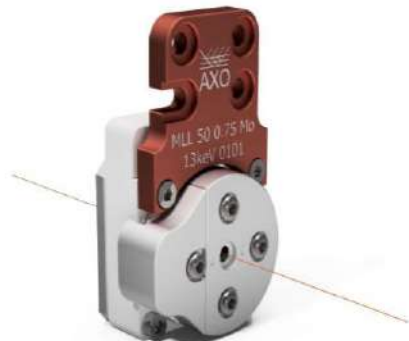
nanometer X-ray focusing and imaging

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



2nd Munich Crystallography Workshop 2025 (MCW) an der TU München

(Alexander Pöthig, München)



Alexander Pöthig

Mit einer inspirierenden Mischung aus Interaktion, Praxis und Fachkompetenz fand der 2. *Munich Crystallography Workshop* (MCW) des AK ChemKrist an der Technischen Universität München statt. Obwohl die Veranstaltung eine Veranstaltung des AK ChemKrist der GDCh war, wurde sie in besonderem Maße finanziell und personell in Form des AK 6 Chemische Kristallographie durch die DGK mitgetragen. Diese enge Zusammenarbeit trug wesentlich zum Erfolg des Workshops bei. Diesmal versammelten sich 40 engagierte Teilnehmende aus unterschiedlichsten Bereichen der Kristallographie – sowohl national als auch international – in München. Die Veranstaltung zeigte eindrucksvoll, wie wertvoll der direkte Austausch zwischen Fachleuten und Nachwuchswissenschaftler*innen ist, wenn eigene Forschungsprobleme im Mittelpunkt stehen und gemeinsam Lösungswege erarbeitet werden.

Viele der Teilnehmenden brachten nicht nur grundlegende Erfahrung in der Kristallographie mit, sondern reisten auch mit konkreten Herausforderungen aus ihrer eigenen Forschung an. Klassische Themen wie Verzwilligung und Fehlordnung wurden anschaulich erläutert; praxisnah konnte erlebt werden, wie diese Probleme mit verschiedenen *Softwaretools* gezielt angegangen werden. Der Workshop bot eine unkomplizierte Gelegenheit, mit erfahrenen Kristallograph*innen sowie Entwickler*innen und Programmierer*innen der eingesetzten Software ins Gespräch zu kommen und von deren umfassendem Wissen zu profitieren.

Zu den Höhepunkten zählten die Postersessions, bei der die Teilnehmenden ihre aktuellen Forschungsprobleme anschaulich präsentierten. Sie war Ausgangspunkt für vertiefte Diskussionen und fachlichen Austausch. Besonders bereichernd erwiesen sich außerdem dieses Mal die ausgedehnten *Hands-on Sessions*: Hier arbeiteten die Teilnehmenden entweder mit eigenen Datensätzen oder anhand bereitgestellter Aufgabenstellungen intensiv und praxisnah an ihren jeweiligen Fragestellungen. Diese Phasen boten Raum für konzentriertes Arbeiten, persönlichen Dialog und das Entwickeln neuer Perspektiven für Lösungswege. Ein besonderer Dank gilt den engagierten Expert*innen, die als Vortragende oder Tutor*innen zur Verfügung standen und mit großem Einsatz ihr Fachwissen weitergegeben haben. Ebenso gilt an dieser Stelle herzlicher Dank den großzügigen Sponsoren sowie der DGK für die finanzielle Förderung, ohne die der Workshop in dieser Form nicht möglich gewesen wäre. Durch diese Förderung konnte nicht nur die Durchführung der Veranstaltung gesichert, sondern auch für das leibliche Wohl der Teilnehmenden bestens gesorgt werden.

Ein positives Echo der Teilnehmenden unterstreicht die hohe Bedeutung von Formaten wie dem *Munich Crystallography Workshop* für die ChemKrist-Community. Besonders erfreulich: Einige waren bereits beim ersten Workshop dabei, andere kamen neu hinzu. Dadurch bot sich die Möglichkeit, bestehende Kontakte zu pflegen und neue Netzwerke zu knüpfen. So wachsen Verbindungen, die weit über das Event hinausgehen und den wissenschaftlichen Austausch nachhaltig stärken. Die sehr schöne Resonanz lässt bereits

jetzt Vorfreude auf ein Wiedersehen im Jahr 2027 aufkommen. Zuvor lädt der GDCh AK ChemKrist jedoch zum diesjährigen Doktorandenworkshop ein, der vom 14.09.2026 bis 17.09.2026 in Aachen stattfinden wird. Auch hier gilt der ausdrückliche Dank für die Unterstützung der DGK, die solche Formate für den wissenschaftlichen Nachwuchs überhaupt erst ermöglichen.



©Alexander Pöthig



©Michael Bodensteiner



©Michael Bodensteine

POLLUX

Versatile by Design
Exceptional by Performance



Designed for the lab, engineered for seamless integration, and built to deliver exceptional results – across every experiment.



Optimal energy resolution
for effective background suppression



Superior count rates
and unparalleled dynamic range



Large active area
up to 58 by 14 mm



Pixel detector
with 2D / 1D / 0D readout modes

Discover more



Physikalische Kristallographie: Arbeitskreis 7

(Eiken Haussühl, Frankfurt am Main)

Im Arbeitskreis AK7 „Physikalische Kristallographie“ bündeln sich Forschungsarbeiten, die sich der Analyse und Interpretation der physikalischen Eigenschaften kristalliner Festkörper widmen. Den thematischen Kern bildet das Zusammenspiel zwischen Kristallstruktur und makroskopischem Verhalten. Das Spektrum reicht dabei von grundlagenorientierten Untersuchungen – etwa zum elastischen, thermischen, optischen oder piezoelektrischen Verhalten – bis zu industrienahen Anwendungen. Da sich derartige Eigenschaften vielfach als Tensoren beschreiben lassen, kommt den Symmetriebetrachtungen eine Schlüsselrolle zu. Leitend ist daher das Bestreben, das physikalische Verhalten aus Symmetrie, Kristallstruktur und atomaren Bindungsverhältnissen heraus zu verstehen. Der tensoranalytische Zugang bindet die kristallographische Symmetrie konsistent in die physikalischen Beziehungen ein und erlaubt es beispielsweise vorherzusagen, welche Tensorkomponenten in einem gegebenen Kristallsystem von null verschieden sind und welche verschwinden.

Als Querschnittsdisziplin greift die Kristallphysik auf Methoden aus Physik, Chemie, Materialwissenschaften und Mathematik zurück. Ihr Wert liegt deshalb nicht allein im Erkenntnisgewinn, sondern ebenso in einer Vielzahl technischer Anwendungen – von der Akusto- und Optoelektronik über die Sensorik und die Frequenzstabilisierung bis hin zur nichtlinearen Optik und zur Quantenoptik. So dienen z.B. piezoelektrische und pyroelektrische Einkristalle als Ausgangsmaterial für Resonatoren, Aktoren, Sensoren, sowie für Bauelemente auf Basis akustischer Oberflächenwellen (SAW). Ein genaues Verständnis der dahinterstehenden Struktur-Eigenschafts-Beziehungen besitzt damit sowohl wissenschaftlich als auch technologisch einen hohen Stellenwert.

Einen derzeitigen Arbeitsschwerpunkt bildet die Charakterisierung piezoelektrischer Einkristalle; von besonderem Interesse ist dabei, wie sich deren piezoelektrische Effekte mit der Temperatur ändern und wie sich dieses Verhalten aus der Kristallstruktur erklären lässt. Zur experimentellen Erfassung der elektromechanischen Eigenschaften wird unter anderem die resonante Ultraschallspektroskopie (RUS) eingesetzt. Darüber hinaus befasst sich der Arbeitskreis mit temperatur- und druckinduzierten Phasenumwandlungen sowie den damit einhergehenden Änderungen der physikalischen Eigenschaften.

Auf der 34. Jahrestagung der DGK vom 25. bis 28. Februar 2026 an der Universität zu Lübeck war der Arbeitskreis 7 mit einem eigenen Mikrosymposium „Crystal Physics“ vertreten. Die Fachvorträge spannten einen repräsentativen Bogen über die Themen des Arbeitskreises: von Ordnungsphänomenen und Struktur-Eigenschafts-Beziehungen in Seltenerd-Oxoboraten über Tieftemperaturanomalien der elastischen Eigenschaften perowskitartiger Mischkristalle und Phasenumwandlungen in vanadiumbasierten Oxiden bis hin zur Einkristallzüchtung von stöchiometrischem Lithiumtantalat sowie zur druckinduzierten Depolarisation von BaTiO_3 . Diese thematische Breite unterstreicht weiterhin das anhaltende Interesse an kristallphysikalischen Fragestellungen innerhalb der DGK.

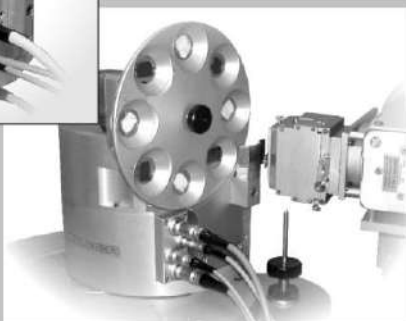
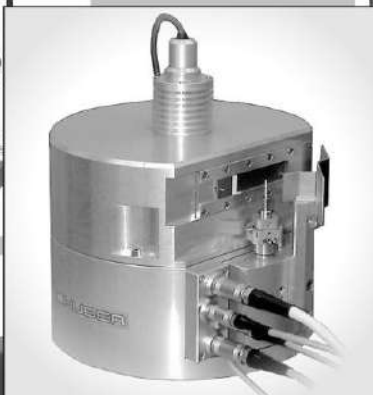
Über die Jahrestagung hinaus engagiert sich der Arbeitskreis aktiv in der Nachwuchsförderung. So wird in Zusammenarbeit mit J. Schreuer (Ruhr-Universität

Bochum) und M. Münchhagen (Ruhr-Universität Bochum) sowie mit dem Sprecher des hiesigen Arbeitskreises (Goethe-Universität Frankfurt) für das Frühjahr 2027 ein Kompaktkurs mit dem Titel „Elektromechanische Eigenschaften von Kristallen“ vorbereitet. Der Kurs findet vom 22. bis 26. Februar 2027 am Institut für Geowissenschaften der Ruhr-Universität Bochum statt und richtet sich an Doktoranden sowie Masterstudenten der Kristallographie, Mineralogie, Materialwissenschaften und verwandter Fächer. Ziel ist es, das in der heutigen Grundlagenforschung unentbehrliche Basiswissen der Kristallphysik zugänglich zu machen und sein Anwendungspotenzial an aktuellen Themen beispielhaft zu erläutern. Behandelt werden unter anderem Bezugssysteme und der Einfluss der Kristallsymmetrie, tensorielle Basiseigenschaften, der pyroelektrische Effekt, dielektrische Eigenschaften, thermische Ausdehnung, der piezoelektrische Effekt und die Elastizität sowie die zugehörigen Struktur-Eigenschafts-Beziehungen. Für die erfolgreiche Teilnahme mit Prüfung können 4 ECTS-Kreditpunkte erworben werden; Kursgebühren fallen nicht an. Anmeldungen werden bis zum 8. Januar 2027 bei E. Haussühl (haussuehl@kristall.uni-frankfurt.de) entgegengenommen. Dieser Kompaktkurs ist als gemeinsame Veranstaltung von DGK und Deutscher Mineralogischer Gesellschaft (DMG) geplant.

Der Arbeitskreis versteht sich als offenes Forum für den fachübergreifenden Austausch und freut sich über Beteiligung aus allen Erfahrungsstufen – ausdrücklich auch aus dem wissenschaftlichen Nachwuchs. Wer mitwirken möchte, wendet sich gern an den AK-Sprecher Eiken Haussühl (haussuehl@kristall.uni-frankfurt.de). Anregungen und neue Impulse zur Weiterentwicklung der Arbeitskreisthemen sind jederzeit willkommen.

SPEED...

in X-ray Powder Diffractometry



HUBER Imaging Plate Guinier Camera 670

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

HUBER
X-RAY DIFFRACTION EQUIPMENT

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

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

Materialwissenschaftliche Kristallographie: Arbeitskreis 9

(Claudia Weidenthaler, Mülheim a. d. Ruhr; Andrea Kirsch, Bochum)

Der Arbeitskreis 9 „Materialwissenschaftliche Kristallographie“ hat sich im Rahmen der Jahrestagung 2026 in Lübeck getroffen. Dabei wurden mögliche Themen für einen Workshop diskutiert, der derzeit für das Frühjahr 2027 geplant wird.



Im Rahmen der Jahrestagung hatte der Arbeitskreis zudem die Gelegenheit, drei Mikrosymposien zu den Themen „Functional Materials“, „Non-crystalline/Disordered Materials“ sowie „In situ/Operando Characterization“ zu organisieren. Die *Sessions* waren sehr gut besucht, worüber wir uns besonders gefreut haben.

Für das Jahr 2027 planen wir einen Workshop zum Thema „Crystallographic Tools for Materials Science“, der voraussichtlich in der Woche vom 15. bis 19. März 2027 am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr stattfinden wird. Für Nachwuchswissenschaftler*innen werden Unterstützungsmöglichkeiten angeboten. Weitere Informationen zur Anmeldung sowie das detaillierte Programm werden zu gegebener Zeit auf der Website der DGK veröffentlicht.

Darüber hinaus stehen auf der nächsten Jahrestagung 2027 in Dresden die Neuwahlen der Sprecher*innen sowie ihrer Stellvertretung an. Wir rufen daher alle interessierten Mitglieder, sowie diejenigen, die es werden möchten, dazu auf, sich für diese Ämter nominieren zu lassen.

Außerdem würden wir uns sehr über weitere Mitglieder in unserem Arbeitskreis freuen. Insbesondere möchten wir jüngere Kollegen*innen ermutigen, sich aktiv im Arbeitskreis zu engagieren und an der Mitgliederversammlung teilzunehmen. Neue Ideen und Perspektiven sind jederzeit willkommen.

PhotonJetMAX-S

Maximum Flexibility
Maximum Flux



Now available in Cu and Mo

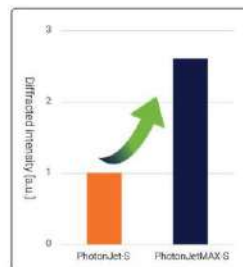
A new high-performance sealed tube source from Rigaku Oxford Diffraction

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



Wissen & Weiterbildung

Berichte der Reisestipendiaten

Reisebericht zur ECM25 in Poznań 2025

(Juliane Kamlah, Göttingen)

Vom 25. - 29. August fand das 35th *European Crystallographic Meeting* (ECM35) in Poznań, Polen, statt. Ursprünglich war Lviv in der Ukraine als Austragungsort vorgesehen, doch aufgrund des andauernden russischen Angriffskrieges gegen die Ukraine musste die Tagung verlegt werden. Trotz dieser Umstände bot die ECM35 eine offene und motivierende Atmosphäre für Gemeinschaft und wissenschaftlichen Austausch. Zahlreiche Forscherinnen und Forscher der internationalen Kristallographie-Community kamen zusammen. Dank des Reisestipendiums der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie konnte ich an der Konferenz teilnehmen, mein Poster präsentieren, wertvolle Erfahrungen sammeln, neues Wissen gewinnen und wichtige Kontakte knüpfen.

Mein Aufenthalt in Poznań begann mit dem *European Young Crystallographers Satellite Meeting*, das jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern durch seine offene und einladende Atmosphäre eine hervorragende Gelegenheit zum Kennenlernen und Austausch in einem kleineren, persönlichen Rahmen bot. Gleichzeitig konnte ich den modernen Campus der Adam-Mickiewicz-Universität sowie das Chemie-Institut erkunden, das sich als idealer Standort für einige der Satellitenveranstaltungen erwies.

Im Anschluss begann die eigentliche Tagung im Poznań *Congress Center*, einem modernen und gut erreichbaren Veranstaltungsort mit großzügigen Vortragsräumen und einem weitläufigen Foyer, in dem sowohl die Aussteller als auch die gut organisierte Pausenverpflegung Platz fanden. Die Mittagspausen waren durch ein abwechslungsreiches Buffet bestens versorgt und in den Kaffeepausen mangelte es nie an Kaffee, Säften oder Keksen.



Das Chemische Institut der Adam-Mickiewicz-Universität in Poznań, Veranstaltungsort einiger Satelliten-Events

Das wissenschaftliche Programm war außerordentlich vielfältig. Neben den zahlreichen *Keynote*-Vorträgen fanden 48 Mikrosymposien statt, die sämtliche Bereiche der Kristallographie abdeckten. Besonders eindrucksvoll waren für mich als Doktorandin in Göttingen die Veranstaltungen zu Ehren von George Sheldrick, der über 30 Jahre an der Georg-August-Universität Göttingen wirkte. Der Vortrag „George Sheldrick’s ShelX: success for all“ unterstrich die Bedeutung und Reichweite von ShelX, während die Session „Remembering George Sheldrick“ durch persönliche Anekdoten von Wegbegleitern ein eindrucksvolles Bild seines wissenschaftlichen Lebens zeichnete.

Die langen Zeiträume für die Posterpräsentationen, über zwei Tage und vier Sessions hinweg, boten genügend Gelegenheit, sich intensiv mit den Beiträgen

auseinanderzusetzen. Ich selbst konnte mein Poster mit dem Titel „Design and Synthesis of Bifunctional Cobalt-based Single-Molecule Magnets“ in den Sessions am Dienstag und Mittwoch im Rahmen des Mikrosymposiums MS11 „Molecular Structure with Material Properties“ vorstellen. Im Zuge dessen habe ich wertvolles Feedback für mein Promotionsprojekt erhalten, das mir neue Perspektiven eröffnet und Anregungen für die weitere Ausrichtung meiner Forschung gegeben hat.

Neben dem wissenschaftlichen Teil bot die ECM35 auch ein abwechslungsreiches Rahmenprogramm. Zu den Höhepunkten gehörten für mich das Konzert im wunderschönen Konzertsaal der Adam-Mickiewicz-Universität, das Konferenzdinner mit Live-Jazz, der *Science Slam* sowie das unterhaltsame *Pub-Quiz*, organisiert von Dectris und Stoe. Darüber hinaus blieb etwas Zeit, die Stadt Poznań mit ihrer beeindruckenden Architektur und hervorragenden polnischen Küche zu erkunden.

Ich verlängerte meinen Aufenthalt um einen Tag, um die Stadt, ihre Atmosphäre und Kultur in Ruhe zu erkunden. Besonders beeindruckend waren das historische Stadtzentrum, die vielen architektonisch interessanten Gebäude sowie die lebendige Kulturszene. Poznań gilt zudem als LGBTQIA*-Hauptstadt Polens, was sich im vielfältigen Kulturprogramm widerspiegelte. Ein persönliches Highlight war ein Jazz-Straßenkonzert im Rahmen des 17. *Old Jazz Festivals* Poznań.

Abschließend möchte ich der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herzlich danken. Durch das Reisestipendium wurde mir diese Teilnahme ermöglicht, die für mein Promotionsprojekt und meine wissenschaftliche Weiterentwicklung von großem Wert war. Die Konferenz bot nicht nur fachliche Impulse und neue methodische Ansätze, die ich



Mein Poster, für das ich wertvolles Feedback erhalten habe.



Der Festsaal der Adam-Mickiewicz-Universität, in dem das Konferenzkonzert stattfand (links). Die Ziegen von Poznań, die sich täglich um 12:00 Uhr auf dem Turm des Rathauses die Köpfe stoßen (rechts)

in meine zukünftige Arbeit integrieren möchte, sondern auch zahlreiche Gelegenheiten, Kontakte innerhalb der Kristallographie-Community sowie zu Industrievertretern zu knüpfen, die mich sicherlich noch lange begleiten werden.



Ein ukrainischer Frauenchor während der Eröffnungszeremonie der ECM35.

Reisebericht zur ECM25 in Poznań 2025

(Christin Wiggers, Bremen)

The 35th European Crystallographic Meeting took place from 25 to 29 August 2025 in the vibrant Polish city of Poznań. As one of Poland's oldest and largest cities, conveniently located between Berlin and Warsaw, Poznań provided an inspiring backdrop for this major crystallographic event. The Poznań Congress Center, situated close to the historic city center, welcomed more than a thousand participants for a week of scientific exchange, poster sessions, and social events.

The conference was jointly organized by the Ukrainian Crystallographic

Committee, the Polish Crystallographic

Association, the Ivan Franko National University of Lviv, and Adam Mickiewicz University. Several satellite

workshops preceded the main program; I attended the one on diffuse scattering analysis and three-

dimensional difference pair distribution function (3D- Δ PDF), where we explored data treatment and analysis using the programs *yell* and *DISCUS*. This proved to be a fitting introduction to many of the

themes that resurfaced throughout the week.

After registration and collecting our conference materials, participants gathered for the official opening. Sven Lidin delivered the first plenary lecture, titled *"Crystallography – a subject that constantly reinvents itself"*, which set the tone for the days ahead. Part of the ceremony was the awarding of the Perutz Prize to Professor Gilberto Artioli (University of Padova) for his contributions across materials science, cultural heritage, and public engagement in crystallography. The formalities were followed by a moving performance from the women's choir of the University of Lviv, performing classical works as well as Ukrainian folk songs. The evening concluded with a lively welcome reception, where new connections were made, and old ones rekindled.

The scientific program began with a keynote lectures from Berthold Stöger on modulation and modularity in sulfosalts, Simona Galli on *in situ* powder diffraction in functional materials, and Isabel Uson on the impact of George Sheldrick's *SHELX* programs. Before and after lunch we could choose from six parallel microsymposia offering a wide range of topics—from enzymology to teaching crystallography. I personally attended the microsymposia on *Short-range order as seen by different techniques*, showcasing advances in diffuse scattering, PDF methods, and modelling. In the late afternoon there were again three keynote lectures on structural insights into the regulation of the Calvin-Benson cycle by Simona Fermani, electron density and chemical bonding in intermetallic compounds by Juri Grin and on the application of crystal



Poznań Congress Center

engineering tools in the food and pharmaceutical industry. In between the keynotes, microsymposia and lunch, the poster session created a buzzing atmosphere. The first full day at the conference center ended with a remembering of George Sheldrick and awarding the Sheldrick Prize to Lauren E. Hatcher for her pioneering contributions to time-resolved crystallography and the structural study of photoactive materials. In the evening, we enjoyed a classical concert in the beautiful AMU Hall. The day closed with the Young Crystallographers' mixer at the Blue Note Jazz Club—an enjoyable evening that encouraged informal exchanges, particularly among early-career scientists.

Wednesday opened with keynotes on electron diffraction at nanoscale, self-learning in integrative structural biology, and new approaches to discover the details of protein structures. Among the microsymposia, I was especially drawn to *Aperiodic order and complex superstructures*, which explored quasicrystals, modulated structures, and complex unit cells. In parallel, other sessions addressed



Concert in the AMU Hall

functional molecular structures and biomolecular interactions. After a full day of engaging keynotes and microsymposia, the Kalman Prize was presented to Felipe Gándara Barragán in recognition of his pioneering crystallographic work, which combines experimental and computational approaches in the field of reticular chemistry and the study of MOFs and COFs. The day closed with the conference dinner at the Conference Center, where everyone enjoyed delicious food and the jazz band playing after dinner.

Thursday's program started with Keynotes on data and model quality of experimental charge density and a session celebrating the 60th anniversary of the Cambridge Structural Database (CSD), with Suzanna Ward reflecting on its enduring impact. During the day there were a number of compelling microsymposia on software developments, surfaces, interfaces and thinfilms, advances and new techniques to study inorganic



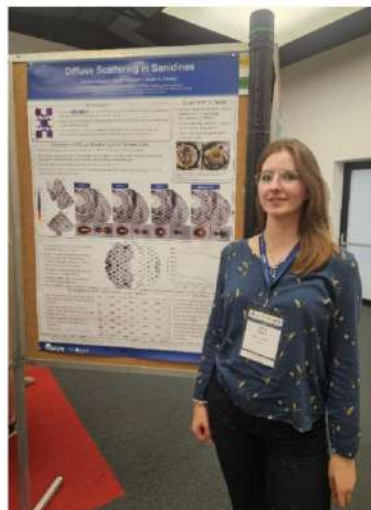
The Jazzband playing at the Conference dinner

materials, Quantum mechanical models for disorder, dynamics and diffuse scattering, as well as how to (successfully) apply for funding, just to name a few. Some Talks emphasized how databases now underpin structure solving, refinement, and validation in both academia and industry, while others showcased how experimental innovation and theoretical modeling jointly advance our understanding of complex systems. On this forth day off the ECM the second group got to put up their posters (including myself) and a lot of lively discussions were had over the lunch and coffee breaks. In the evening a fun science slam was followed by an open lecture "The Nobel Prize winner Max von Laue was a schoolboy in Poznań".

Despite an intense week, the final day was well attended. Keynotes and microsymposia sessions tackled topics ranging from serial crystallography at 4th generation synchrotrons to cross-method structural studies. Two microsymposia on disordered systems on complex inorganic and molecular systems highlighted how structural imperfections can drive material functionality. The meeting closed with reflections from the organizing committee marking the end of an inspiring week.

The 35th ECM in Poznań was a comprehensive and vibrant meeting that showcased the full breadth of crystallography. Across plenary lectures, keynotes, microsymposia, and poster sessions, the program highlighted advances in theory, methodology, and applications ranging from materials science to biology and cultural heritage. Sessions devoted to short-range order, aperiodic and complex structures, and disordered systems underlined the continuing importance of combining experimental and computational approaches to address structural complexity.

Beyond the scientific content, the meeting was enriched by cultural and social events, including the opening choir performance, the classical concert in the AMU Hall, and the Young Crystallographers' activities, which together fostered exchange and strengthened community ties. I am sincerely grateful to the MARUM Research Academy and the *Deutsche Gesellschaft für Kristallographie* (DGK) for their financial support, which enabled me to attend this conference.

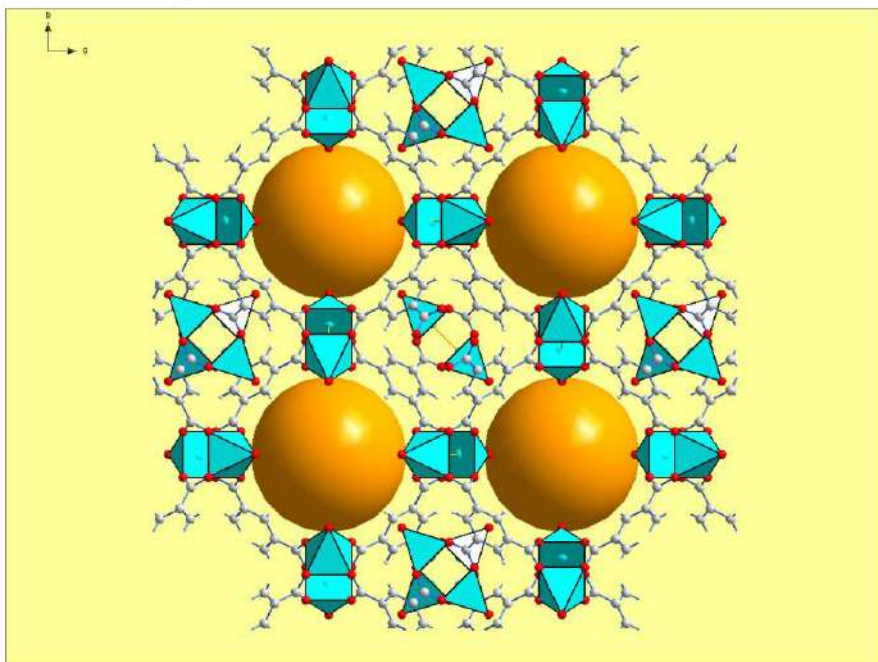


Me at the Poster section



DIAMOND

Crystal and Molecular Structure Visualization



Neue Version 5.2

Die aktuelle Version 5.1 enthält eine Reihe von Kommandos und funktionellen Erweiterungen, die das Arbeiten mit **MOF (Metal Organic Frameworks)** erleichtern.

Diese werden in der folgenden **Version 5.2** ergänzt um Funktionen zur Darstellung von **Hohlräumen (Poren)** als **Sphäroide, Ellipsoide oder Zylinder**.

Version 5.2 wird auch erweiterte Informationen zu **H-Brückenbindungen** und **nicht-bindenden Kontakten** im Info-Tip-Fenster sowie in der *Properties pane* anzeigen als auch Kommandos zum einfachen und direkten Zugriff auf H-Brücken und Kontakte aus den entsprechenden Bindungs- bzw. Kontaktparameterlisten bieten.

Version 5.2 erscheint im 2. Hj. 2026 und ist für lizenzierte Nutzer von Diamond 5 und 4 kostenlos.

<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>

Reisebericht zur Swiss Summer School on Materials Chemistry 2025

(Alexander Wollbrink, Duisburg-Essen)

Vom 23.06. bis 25.06 2025 habe ich an der Summerschool mit dem Fokus auf „X-ray Total Scattering“ als moderne Charakterisierungsmethode teilgenommen. Die Veranstaltung fand in der Unterkunft „Le-Domaine“ im Stadtteil „Villar-sur-Glâne“ in Fribourg (Schweiz) statt und war gerichtet an Doktoranden und Postdocs mit und ohne Erfahrungen im Bereich „X-ray Total Scattering“ (<https://matsem25.scg.ch/>).

Die Anreise mit dem Zug war leider wie immer geprägt von Verspätungen und einem schlechten Internet im Zug bis zur deutsch-schweizerischen Grenze in Basel. Das war insbesondere eine Herausforderung, da im Vorfeld diverse Installationen für die angekündigten *Hands-on Tutorials* durchgeführt werden mussten, wofür vorher leider wie immer keine Zeit war.

In der Unterkunft, die gleichzeitig auch Schulungsort war, wurde man mit einem beeindruckenden Blick auf die imposanten Freiburger Voralpen willkommen geheißen und die Unterbringung und Verpflegungsräume waren praktischer Weise angrenzend an dem Vortragsraum.



Alexander Wollbrink



Die Summerschool war in fünf Themenbereiche gegliedert wozu die eingeladenen Experten unmittelbar, in den Pausen oder nach der Veranstaltung für Fragen ein offenes Ohr hatten. Das führte zu einer sehr angenehmen und offenen Diskussionskultur die ich sehr geschätzt habe.

[Prof. Federica Bertolotti](#), Università degli Studi dell'Insubria and [To.Sca.Lab](#) "Debussy"

[Prof. Reinhard Neder](#), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg "Building complex and decorated nanoparticles with DISCUS"

[Dr. Adam Sapnik](#), University of Copenhagen "Diffpy CMI"

[Dr. Simon Boehme](#), ETH Zurich "Data visualization with python"

[Dr. Maxwell Terban](#), Momentum Transfer, Germany "PDF on organic molecules and polymers"

Als sehr effizientes aber auch anstrengendes Lehrkonzept wurde immer erst eine Vortrags-Session zu einem Thema von dem jeweiligen Experten als Einleitung zum Thema gegeben. Nach einer kurzen Pause wurde direkt anschließend an den Vortrag eine Hand-on Tutorial gegeben, wodurch die Hemmschwelle zum Einstieg oder ersten



Nutzung der jeweiligen Programme deutlich gesenkt wurde, einschließlich noch vorhandener Installationsprobleme.

Während der *Hand-on Tutorials* konnten ebenfalls reale Probleme besprochen werden. Unabhängig ob es sich um eigene Probenmessungen oder allgemeine Fragen zu den Methoden handelte, wie z.B. Unterschiede zwischen verschiedenen Standard- oder Referenzmaterialien im Kontext „klassischer“ Beugungsexperimente oder im Bereich Totalstreu-Experimente (PDF), Auswirkungen von Vorzugsorientierung, grundsätzliche Informationen, die aus einem Diffraktogramm und einem PDF ausgelesen werden können, hinsichtlich Dichte, Bindungslängen, Defekte in Kristallstrukturen und Oberflächendekoration mit organischen Linkern und vieles mehr.

In den Pausen war ebenfalls immer wieder Gelegenheit sich mit den anderen Teilnehmern auszutauschen und sich über andere Forschungsthemen und -bereiche frei austauschen zu können, was von allen Teilnehmern bis in die späten Abendstunden auch gerne genutzt wurde.

Rückblickend kann ich jedem im Bereich der Materialforschung diese Summerschool empfehlen. Vielen Dank an die Veranstalter und die *Swiss Chemical Society* (SCS).

Organizing Committee

Dr. Jonathan De Roo, *University of Basel (Chair of the seminar)*

Prof. Jovana Milic, AMI Fribourg

Prof. Maksym Kovalenko, Empa / ETH Zurich

Dr. Simon Böhme, ETH Zurich

Dr. Andrea Doderio, AMI Fribourg

Reisebericht zum 2. Schweizer Symposium für Materialchemie 2025, MatChem25

(Alexander Wollbrink, Duisburg-Essen)

Am 25.06.2025 habe ich im Anschluss der schweizer *Summerschool* für „X-ray Total Scattering“ noch am schweizer Symposium für Materialchemie 2025 teilgenommen (<https://mat25.scg.ch/>). Die Veranstaltung fand im *Adolphe-Merkle-Institute* der Universität Fribourg (Schweiz) statt und war gerichtet an alle Forschende im Bereich Materialchemie mit dem Schwerpunkt auf „Nachhaltige Materialien: Innovationen in der fortgeschrittenen Charakterisierung“.



Alexander Wollbrink



Interessanterweise fand die „Welcome Reception“ am vorherigen Abend statt und war somit gleichzeitig auch das abschließende „Conference Dinner“ der vorangegangenen *Summerschool*.



Auf Grund des heißen Wetters fand die Poster Session spontan in der Grünanlage des *Adolphe-Merkle-Institutes* statt, was eine sehr gute Idee war. Das Vortragsprogramm beinhaltete neue Charakterisierungsmethoden, wie z.B. mittels Totalstreuung (PDF) und Modellierungsansätze mit DISCUS (Prof. Reinhard Neder, Erlangen) oder DiffPy-CMI (Dr. Adam Sapnik, Copenhagen), nachträgliche Modifikation poröser Materialien für relevante Gas- und Flüssig-Trennverfahren oder Katalyse (Prof. Wendy Lee Queen, EPFL Schweiz) oder die Konzeption und Möglichkeiten an der Debye Beamline des Paul-Scherrer-Institutes durch Prof. Dr. Maarten Nachtegaal (PSI).

Auffällig waren hier ebenfalls die offene und entspannte Atmosphäre des Symposiums und der Austausch mit den Schweizer Kollegen von Anton Paar (Schweiz) als einer der wenigen Teilnehmer mit deutschem Hintergrund. Ein Symposium, das ich rückblickend auch jedem im Bereich Materialforschung und internationaler Austausch nur empfehlen kann, auch wenn nach 2 Tagen intensiver *Summerschool* zuvor etwas die Konzentration gelitten hat.

Vielen Dank an die Organisatoren und die *Swiss Chemical Society* (SCS).

Reisebericht zum 27. Laborkurs 2025 am Jülich Centre for Neutron Science (JCNS)

(Alexander Wollbrink, Duisburg-Essen)

Vom 25.08. bis 29.08.2025 habe ich am Laborpraktikum „Neutronenstreuung“ am Forschungszentrum Jülich teilgenommen. Der Laborkurs richtet sich hauptsächlich an Doktoranden mit und ohne theoretische und praktische Erfahrung im Bereich Streumethoden mittels Neutronenquellen. In diesem Jahr war die Anzahl an Bewerbern so hoch, dass Postdocs, wie ich, nur an dem theoretischen Teil in der ersten Woche teilnehmen durften, da die Räumlichkeiten in Jülich die doppelte Anzahl an Teilnehmern erlaubt. Für den praktischen Teil der am ILL in Grenoble stattfand wurden nur Doktoranden zugelassen.



Die Unterbringung erfolgte in der Jugendherberge (Maria-Theresia-Allee 260) in Aachen in den bekannten 4-Bett-Etagenbetten mit Teilnehmern aus ganz Europa. Als tägliche Herausforderung erwies sich die pünktliche Überfahrt von Aachen zum Forschungszentrum Jülich, die dann doch etwa eine Stunde pro Fahrt dauerte.

In den folgenden fünf Tagen wurden die grundlegenden Kenntnisse in den Bereichen Neutronen und ihre Eigenschaften, Neutronenquellen, Beugung, in- und elastische Streuung, Kleinwinkelstreuung, Spin-abhängige und magnetische Streuung polarisierter Neutronen, Reflektometrie, magnetische Nanostrukturen, stark korrelierte Elektronensysteme, SAXS, WAXS und deren Anwendungsbereiche vermittelt. Am späteren Nachmittag folgten zu den täglichen Themen Übungsaufgaben in kleineren Gruppen mit dem Buch zum Kurs, was jeder Teilnehmer zu Beginn erhalten hat. Je nach Umfang der Themen war die dafür eingeplante Bearbeitungszeit häufig zu knapp bemessen, sodass wir nicht alle Punkte bearbeiten konnten.



Interessant war der sehr unterschiedliche Kenntnisstand der verschiedenen Teilnehmer im Bereich der Streumethoden, d.h. von bekannten Anwendern an entsprechenden *Beamlines* bis Teilnehmer ohne grundlegende Kenntnisse von Kristallographie und Beugung, was zeitweise zu grundlegenden Fragen in den jeweiligen Vorlesungen und Übungen führte, die die Vortragenden teilweise an Ihre eigenen Grenzen führten und das vollgepackte Vortragsprogramm etwas in Anspruch nahmen.

Beeindruckend war der Vortrag von Prof. Dr. Mirijam Zobel (RWTH Aachen) die für die Einführung der kristallographischen Grundlagen, u.a. Punktsymmetrien und Raumgruppen, in nur 45 Minuten klar und verständlich erklären konnte. Es war schön zu sehen, dass noch jemand Abbildung und Inhalt von Borchardt-Ott (Kristallographie, Springer) verwendet und anwendet. Seit meinem Studium bei Prof. Buhl (Leibniz Universität Hannover, 2012) war ich häufig genug der Einzige der dies als grundlegendes Werk kannte und nutzte.

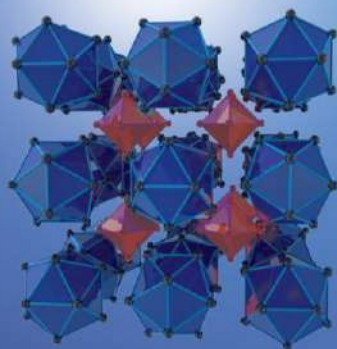


Foto: Bernd Nörig

Sehr eindrucksvoll war der Besuch in den Hallen der neuartigen „High Brilliance Neutron Source“ (<https://hbs.fz-juelich.de/de>) der theoretisch in fünf Jahren aufgebaut und auf dem Gelände des Forschungszentrums Jülich inbetrieb genommen werden könnte. Bei unserer Führung stand die Quelle offen, sodass wir in die Neutronenquelle selbst gehen konnten. Mit einem Umfang von mehreren Metern war dies sehr eindrucksvoll, da man üblicherweise nur die kleinen Röntgenquellen aus dem Labor kennt, was in der Welt der Neutronen natürlich ganz andere Dimensionen erreicht.

Grundsätzlich war eine offene und interessierte Diskussion der jeweiligen Vortragsthemen möglich. Dies kam aber aufgrund des doch sehr unterschiedlichen Wissensstands der Teilnehmer zu kurz, sodass mehr grundlegende Themen erklärt werden mussten und tiefergehende Fragen sich dadurch erübrigten.

Vielen Dank an die Organisatoren vom Forschungszentrum Jülich (Dr. Margerita Kruteva und Dr. Reiner Zorn)



SINGLE CRYSTAL X-RAY DIFFRACTION

D8 VENTURE HE - The Power of Ag Radiation

High resolution structures quick and easy

With the enhanced μ S DIAMOND II intensity and the superior PHOTON IV sensitivity the D8 VENTURE HE delivers

- High resolution and superior-quality data
- Significantly enhanced data collection efficiency
- A closer look at the atomic structure
- Deeper insight into the electronic structure of materials

Benefit from more accurate and reliable structural models and deeper molecular insights

For more information, visit bruker.com/d8venture

Crystallify: A Modern Virtual Laboratory for Space Groups and Symmetry

(Giovanni Valenti, Angelo Galavotti, Lorenzo Galfano, Italy)

While the crystallography community relies on several excellent online databases, we noticed a recurring challenge when explaining space group symmetries: existing tools, though highly accurate, often lacked the intuitive, interactive visual feedback needed to truly grasp how equivalent positions are generated in 3D space.



Giovanni Valenti

Angelo Galavotti

Lorenzo Galfano

Initially developed as a personal prototype, the tool was shared among colleagues and friends. The immediate, positive feedback made us realize its broader potential for the community. This led to the formation of our current team: a PhD student working at the intersection of crystal engineering, crystallography, and computational chemistry, and two MSc graduates in *Artificial Intelligence* with the goal of transforming Crystallify into a comprehensive virtual laboratory.

Crystallify offers an interactive, WebGL-powered 3D environment where users can explore all 230 crystallographic space groups (Figure 1). We designed the platform so that symmetry operations are not just abstract matrices, but tangible elements designed for direct interaction.

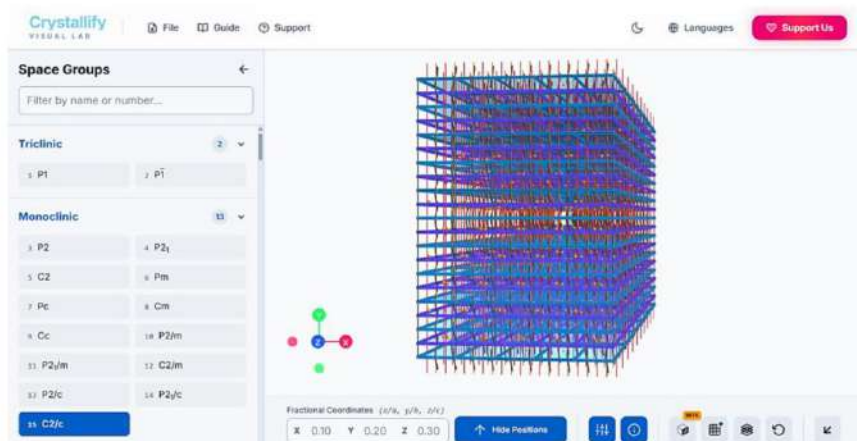


Figure 1: The main interface of Crystallify exploring space group C2/c (No. 15), demonstrating the real-time 3D rendering of the unit cell, fractional coordinates input, and the extensive symmetry network.

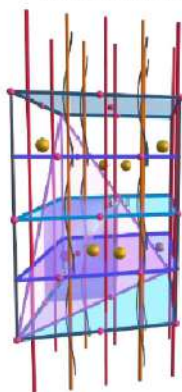
By inputting fractional coordinates (x/a , y/b , z/c), users can instantly generate all equivalent atomic positions. The original atom is highlighted in fuchsia, while the symmetrically generated copies appear in yellow. Selecting any atom in the 3D viewer or the side panel reveals the exact algebraic operation and the specific symmetry

element responsible for its generation. Currently, Wyckoff positions can be explored by modifying these fractional coordinates, though quick selection for special positions is a feature we plan to add.

To prevent visual clutter, users can toggle the symmetry elements between a Reduced view (showing only the group's generators) and a Complete view, which calculates and displays all equivalent elements within the $[0,1]^3$ unit cell (Figure 2).

Beyond basic symmetry, we implemented several advanced crystallographic features:

- **Miller Planes:** Users can input hkl indices to dynamically project planes into the lattice. The application calculates the exact intersections, rendering a semi-transparent plane with clickable vertices that reveal precise fractional coordinates.
- **Asymmetric Unit Calculation:** The code mathematically identifies and renders the Dirichlet domain as a cyan polyhedron, visually defining the minimum volume required to rebuild the entire cell via symmetry operations.
- **Supercell Expansion:** The lattice can be expanded up to $5 \times 5 \times 5$, replicating both the structural framework and all calculated atoms and symmetry elements.



Crystallify is primarily intended for students taking their first steps into the world of crystallography, providing a robust interactive support tool to rapidly understand space groups, atomic positions, and symmetry elements. At the same time, its advanced features make it highly beneficial for PhD students, researchers, and university professors. We built a dedicated animation module that isolates specific symmetry operations, such as glide planes or screw axes, showing the fluid movement of an atom alongside its fractional translation vectors and rotation angles (Figure 3). The platform also includes a comprehensive user guide and researchers can easily export high-quality images of their customized cells for presentations and publications.

Figure 2: Advanced visualization features. The (111) Miller plane is projected alongside the dynamically calculated asymmetric unit (cyan polyhedron) and various rotation/screw axes.

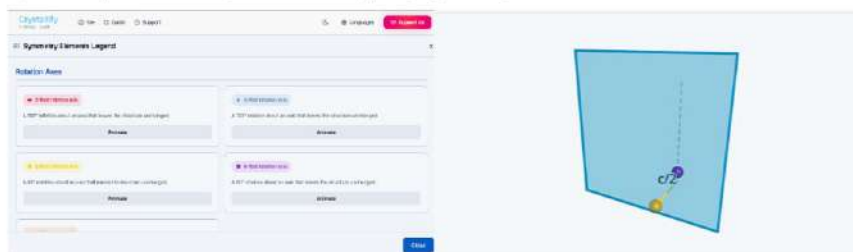


Figure 3: The built-in Symmetry Elements Legend and the interactive animation module, which isolates operations (like the c -glide plane) to help visualize atomic translation and rotation.

From a technical standpoint, the platform uses a decoupled architecture: a Next.js/React frontend handles the heavy 3D rendering, while a Python FastAPI backend manages the complex geometric and crystallographic calculations. To accelerate development, we utilized also AI. However, this process reinforced a critical lesson: while AI drastically speeds up coding, it requires constant supervision and deep domain expertise to ensure the crystallographic mathematics are flawless.

We are incredibly proud to be officially listed in the CCDC's DECOR database as a support tool, and it is rewarding to see professors already using Crystallify in their lectures. The platform is completely ad free, supported entirely by voluntary donations.

Our roadmap includes implementing fast, interactive visualization for experimental and theoretical .XYZ and .CIF files, as well as a diffraction pattern calculator. Ultimately, we plan to make our backend API public, allowing researchers to accurately generate structural models programmatically.

Link: <https://www.crystallify.com/>

A dedicated team website is also coming soon!

Mitglieder & Ehrungen

Laudationes zur Verleihung des Lieselotte-Templeton-Preis 2026

(Tobias Beck, Hamburg; Holger Kohlmann, Leipzig; Tilmann Leisegang, Freiberg; Ben Ebel, Aachen; Anushka Ghosh, Berlin; Ute Kolb, Mainz)

Der folgende Text entspricht der Laudatio, die anlässlich der Vergabe des Lieselotte-Templeton-Preis auf unserer 34. Jahrestagung am 25.02.2026 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 NachwuchswissenschaftlerInnen zu vergeben. Das Preiskomitee besteht aus insgesamt fünf Mitgliedern. In diesem Jahr sind dies: Tobias Beck, Holger Kohlmann und ich, *ex officio* die Vorsitzenden der Jungen Kristallographen, Ben Ebel und Anushka Gosh, sowie die Vorsitzende unserer Gesellschaft, Ute Kolb.

Ich möchte an dieser Stelle kurz darauf hinweisen, dass die Neubesetzung des Komitees bevorsteht. Wer also an der Mitarbeit im Komitee interessiert ist, kann sich bei mir oder dem Vorstand der DGK gerne noch bis Donnerstag melden.

Der Lieselotte-Templeton-Preis soll die besten Abschlussarbeiten eines Jahres im Bereich der Kristallographie auszeichnen. Unsere Gesellschaft ehrt damit 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. Sie arbeitete an der *University of California* in Berkeley unter anderem zur Absorptionskorrektur, zum Röntgendiffraktionsismus und zu anomaler Dispersion. Zudem galt ihre Aufmerksamkeit auch den jungen Studierenden. Sie vereinte also wissenschaftliche Schaffenskraft und das Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs. In diesem Sinne freuen wir uns, den Preis in ihrem Namen für drei herausragende Masterarbeiten zu verleihen.

Bevor ich nun aber zur Verkündung und Kurzvorstellung der diesjährigen Preistragenden komme, möchten wir uns als Preiskomitee ganz herzlich bei den Betreuenden aller eingereichten Vorschläge für ihr Engagement für den wissenschaftlichen Nachwuchs und für unsere Gesellschaft bedanken. Und Sie gleichzeitig motivieren auch für das nächste Jahr herausragende Vorschläge einzureichen.

Kommen wir nun zu den diesjährigen Preistragenden. Dies sind:

- Frau M. Sc. Johanna Bantol von der Universität Leipzig,
- Frau M. Sc. Greta Hempelmann von der RWTH Aachen und
- Herr M. Sc. Lukas M. Seifert von der RWTH Aachen.

Lassen Sie mich jeweils kurz die drei Honorees würdigen:



Übergabe der Lieselotte-Templeton-Preise 2026 durch Ute Kolb (jeweils links) und Tilmann Leisegang (jeweils rechts) an Johanna Bantol (oben), Greta Hempelmann (mitte) und Lukas Manuel Seifert (unten). Fotos: Ben Ebel.

Johanna Bantol

Frau Johanna Bantol wurde für ihre Masterarbeit mit dem Titel „**In Situ Röntgenpulver-diffraktometrie der Wasserstoff-reduktion von WO_3 und V_2O_5** “ ausgezeichnet. Die Arbeit fertigte sie in der Arbeitsgruppe von Holger Kohlmann am Institut für Anorganische Chemie und Kristallographie der Universität Leipzig an. Frau Bantol studierte Chemie, Materialwissenschaft und Werkstofftechnik und *Advanced Spectroscopy in Chemistry*.



Johanna Bantol

Industriell relevante Metalle wie auch Wolfram und Vanadium liegen in der Natur vorwiegend als Oxide oder Erze vor und müssen für Anwendungen in z. B. Hochleistungslegierungen, in der Energiespeicherung oder in verschleißfesten Schneidwerkzeugen in ihre elementare Form überführt werden. Die dazu verwendeten konventionellen Extraktionsverfahren, wie die Pyrometallurgie, basieren meist auf kohlenstoffgestützten Reduktionsreaktionen und tragen damit zu industriellen CO_2 -Emissionen bei. Die Wasserstoffreduktion, die bei idealem Prozessverlauf Wasserdampf statt Kohlendioxid erzeugt, stellt dabei eine potenziell klimaneutrale Alternative dar.

Allerdings ist die Reduktion von Metalloxiden mit Wasserstoff oft mehrstufig und stark von Thermodynamik, Kinetik und Temperaturprofil, Wasserstoffpartialdruck und Partikelmorphologie abhängig. Die Bildung intermediärer Oxidphasen und strukturelle Veränderungen während der Reaktion erschweren dabei das Prozessverständnis und erfordern gezielte Untersuchungen zur Entwicklung effizienter Extraktionsrouten.

Genau hier hat Frau Bantol mit ihrer Arbeit angesetzt. Sie nutzte **die in situ Röntgenpulverdiffraktometrie** und die **Rietveld-Analytik** für detaillierte Untersuchungen zur **Wasserstoffreduktion** auf die Phasenbildung und Kristallstruktur der Ausgangsstoffe WO_3 und V_2O_5 . Sie verfolgte speziell den Reaktionsweg des WO_3 zu $\beta\text{-W}$. Dabei gelang ihr, das bisher übersehene und schwer herzustellende Zwischenprodukt $\beta\text{-W}$, das in der Literatur auch als W_3O bezeichnet wird, nachzuweisen. Sie bestimmte weiterhin Gitterparameter und thermischen Ausdehnungskoeffizienten für alle Zwischenprodukte und das Endprodukt in Abhängigkeit verschiedener Temperaturprotokolle und Wasserstoffflussraten. Mit ihrer detaillierten kristallographischen Analyse lieferte sie so wichtige Prozessdetails zur Wasserstoffreduktion im W-O-System.

Für das zweite von ihr untersuchte Stoffsystem, das V_2O_5 , gelang ihr durch gezielt eingestellte Prozessparameter Zwischenphasen, wie das zuvor nicht beobachtete V_3O_5 , im Reduktionsprozess zu isolieren. Auch hiermit trägt sie zu einem detaillierteren Verständnis des Wasserstoffreduktionsprozesses bei.

Ihr Betreuer, Holger Kohlmann, schreibt: „Ihre Forschung entspricht einem sehr hohen Standard für eine Masterarbeit, sowohl hinsichtlich der Qualität als auch der Quantität der wissenschaftlichen Ergebnisse.“

Auch uns im Komitee hat die Qualität und Quantität ihrer Arbeiten überzeugt. Daher freuen wir uns, Frau Bantol nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2026 zu übergeben.

Greta Hempelmann

Frau Greta Hempelmann wurde für ihre Arbeiten im Rahmen ihrer Masterarbeit mit dem Titel **„Koordinationschemie von Metall-Radionukliden durch TREN-basierte Liganden“** ausgezeichnet. Diese fertigte sie in der Arbeitsgruppe von Iris Oppel am Institut für Anorganische Chemie der RWTH-Aachen an. Frau Hempelmann hat Chemie studiert.



Greta Hempelmann

Wie Sie vielleicht bereits wissen, hat das BMFTR – das Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt – das Wissenschaftsjahr 2026 unter das Motto **„Medizin der Zukunft“** gestellt. Dabei geht es unter anderem darum, wie Forschende mit ihren Ideen und Lösungen schon heute die Medizin von morgen gestalten können, etwa durch effektivere Behandlungen. Genau hier setzt die Arbeit von Frau Hempelmann an, die mit ihrem theranostischen Ansatz einen wichtigen Beitrag leistet. **Theranostik** ist ein Kofferwort aus den Begriffen Therapie und Diagnostik und beschreibt einen kombinierten Ansatz.

Frau Hempelmann hat in ihrer Arbeit neue Koordinationsverbindungen synthetisiert, die die Radionuklide Ti^{IV} und Sn^{IV} stabil im menschlichen Körper transportieren sollen: das Isotop ^{45}Ti dient dabei als aktives Metall für die PET-Diagnostik, um Tumoren sichtbar zu machen, während das Isotop ^{117m}Sn für die gezielte Krebsbehandlung eingesetzt werden kann. Die neuen Verbindungen wurden von ihr dann unter anderem spektroskopisch mittels NMR- und Massenspektroskopie charakterisiert. Der Fokus lag auf TREN-basierten Liganden zur Entwicklung stabiler mono- und bimetallischer Komplexe. Weiterhin stellte sie ein neues, unsymmetrisches Ligandenmolekül her, welches, in Kombination, sich später gezielt mit einem Tumor-Bindebaustein koppeln lässt.

Die Ergebnisse von Frau Hempelmann befinden sich aktuell in einer Patentierungsphase, wie ihre Betreuerin, Iris Oppel, angibt. Sie ergänzt: „Insgesamt ist Frau Hempelmann eine begnadete Jungwissenschaftlerin, die meinen Arbeitskreis in allen Bereichen [...] bereichert“.

Uns hat die Arbeit von Frau Hempelmann ebenfalls „bereichert“, also überzeugt. Und so freuen wir uns, Frau Hempelmann nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2026 zu übergeben.

Lukas Manuel Seifert

Herr Seifert wurde für sein Masterarbeit mit dem Titel „Vorhersage von Elektronendichten mithilfe Maschinellen Lernens zur Anwendung in der Kristallstrukturverfeinerung“ ausgezeichnet. Diese fertigte er in der Arbeitsgruppe von Florian Kleemiß am Institut für Anorganische Chemie der RWTH-Aachen an. Herr Seifert hat Chemie studiert.



Lukas Manuel Seifert

In seiner Masterarbeit entwickelte Herr Seifert ein maschinelles Lernverfahren, das molekulare (also asphärische) Elektronendichten präzise vorhersagen kann, ohne dass dafür eine explizite quanten-chemische Berechnung des gesamten Systems erforderlich ist. Hierzu nutzte er bestehende Ansätze wie das SALTED-Framework, das atomzentrierte Elektronendichte-Koeffizienten vorhersagt. Diese Koeffizienten überführte er mithilfe geeigneter mathematischer Werkzeuge in atomare Streufaktoren für die kristallographische Strukturverfeinerung. Grundlage seines Verfahrens sind spezielle Deskriptoren, die die lokale atomare Umgebung rotations- und translations-equivariant beschreiben und dadurch auch für bislang unbekannte funktionelle Gruppen zuverlässige Vorhersagen ermöglichen. Nach der Implementierung seines Verfahrens in die Verfeinerungssoftware NoSphera2 zeigte Herr Seifert in Benchmark-Studien, dass das Verfahren atomare Streufaktoren in einem Bruchteil der üblichen Rechenzeit bereitstellt. Damit hat er ein zentrales Anwendungsproblem der wellenfunktionsbasierten Quantenkristallographie für größere Systeme wie Proteine oder supramolekulare Strukturen praktikabel gemacht.

Sein Betreuer, Florian Kleemiß, schreibt: „Durch seine Arbeit hat Lukas außergewöhnliche analytische Fähigkeiten, Kreativität bei der Problemlösung und ein tiefes Verständnis der Prinzipien der Quantenkristallographie unter Beweis gestellt.“

Auch wir denken, dass Herr Seifert theoretisches Verständnis, programmiertechnisches Fachwissen und praktische Anwendung synergistisch überzeugend in seiner Masterarbeit dargelegt hat. Daher freuen wir uns, Herrn Seifert nun die Urkunde für den Lieselotte-Templeton-Preis 2026 zu übergeben.

Wer mehr zu den drei Preistragenden erfahren möchte, ist herzlich zum Lieselotte-Templeton Award Symposium der Young Crystallographers, am Freitag, um 14:15 Uhr, in den Raum AM 4 eingeladen.

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

Laudatio zur Verleihung des Max-von-Laue-Preises 2026 an Florian Kleemiß

(Simon Grabowsky, Bern)



Abb: Florian Kleemiß (links) und Simon Grabowsky (rechts) am Rande einer der vielen Messzeiten an SPring-8

Jun.-Prof. Dr. Florian Kleemiß wird mit dem Max-von-Laue-Preis 2026 der DGK ausgezeichnet für seine *herausragenden Beiträge zur modernen Quantenkristallographie*. In der Quantenkristallographie werden Phänomene wie chemische Bindungen, die jenseits der klassisch durch Verfeinerungen zugänglichen Atompositionen und Verschiebungsparameter liegen, ausgewertet und chemisch-physikalisch interpretiert. Dazu braucht es genaue, hochaufgelöste Einkristall-röntgenbeugungsmessungen und Formalismen, die Atomformfaktoren aus der tatsächlichen Elektronendichteverteilung im Molekül und Kristall erzeugen, wie zum Beispiel im Multipolmodell oder im *Hirshfeld Atom Refinement* (HAR) [1]. Herr Kleemiß hat aber schon während seiner Doktorarbeit in Bremen und Bern erkannt, dass es zusätzlich dazu schnelle, zuverlässige und nutzerfreundliche Software braucht, was das Forschungsfeld lange zurückgehalten hat. Er hat diese Software – NoSpherA2 – in einer Kooperation zwischen der Arbeitsgruppe Grabowsky und dem Olex2-Team in Durham in großer Eigenständigkeit und mit einer klaren Vision entwickelt [2]. Dies ist das Hauptwerk seiner Dissertation geworden und hat mittlerweile eine große

Nutzercommunity erreicht, die jenseits der Kristallographie liegt. Dies ist im Forschungsfeld der Quantenkristallographie nie zuvor gelungen und das ist Herrn Kleemiß großer Verdienst.

Nach dem Abschluss seiner Promotion an der Universität Bern im Jahr 2021 setzte Herr Kleemiß seine Karriere an der Universität Regensburg in der Gruppe von Dr. Michael Bodensteiner fort, unterstützt durch die Walter-Benjamin-Förderung der DFG. Während dieser Zeit entdeckte Herr Kleemiß, dass viele Konzepte und Theorien, die in Software-Programmen verewigt sind, veraltet sind. Mit modernen Ansätzen der Informatik bis hin zu „*Maschinellem Lernen*“ gewohnte Näherungen oder eingefahrene Arbeitsabläufe sind überholt. Herrn Kleemiß Arbeiten zur Theorie hinter Anomaler Dispersion, gemeinsam mit Prof. Norbert Peyerimhoff (Durham), sind fundamentaler Natur und werden nach der Veröffentlichung Wellen schlagen.

Im Jahr 2023 erhielt Herr Kleemiß den Ruf auf eine Juniorprofessur an der RWTH Aachen, die mittlerweile positiv zwischenevaluiert wurde. Dort hat er eine Arbeitsgruppe von hochmotivierten und begabten Mitarbeitenden aufgebaut, die nun Weiterentwicklungen der Quantenkristallographie und insbesondere von HAR mit einem unbeschreiblichen Tempo bei gleichzeitig hoher Qualität produzieren und veröffentlichen. Die Zusammenstellung dieser Arbeitsgruppe zeugt für Herrn Kleemiß ausgeprägte Menschenkenntnis und Menschlichkeit, die er in all den Jahren unserer Zusammenarbeit immer wieder unter Beweis gestellt hat. Aus Aachen kommen nun die Impulse für die Kristallographie, die uns in die Moderne der Computer-, KI- und Big-Data-Zeit führen wird.



Übergabe der Lieselotte-Templeton-Preise 2026 durch Ute Kolb (Mitte rechts) und Ella M. Schmidt (links) und Simon Grabowsky (rechts) an Florian Kleemiß (Mitte links). Foto: Ben Ebel.

Eine Auswahl der aktuellen Arbeiten aus Herrn Kleemiß Arbeitsgruppe umfasst die Nutzbarmachung von effektiven Rumpfpotentialen für HAR [3], die Ausweitung auf Proteinkristallographie [4], und ein *brute-force Benchmarking* von HAR,[5] das sehr gut Herrn Kleemiß rigorose und mutige Arbeitsweise zeigt. Enorm spannend werden seine

Arbeiten zur Nutzung von „Maschinellem Lernen“ für extrem schnelle quantenkristallographische Verfeinerungen sein, jenseits von HAR, wofür die Vorarbeiten gerade veröffentlicht wurden [6]. Herrn Kleemiß Arbeitsgruppe lässt aber trotz aller Sprünge in der Methodenentwicklung auch die Anwendungen für die Chemie nicht aus dem Auge, wie u.a. eine Arbeit zur experimentellen Bestimmungen von Spinzuständen in Eisenkomplexen zeigt [7].

Ich beglückwünsche Herrn Kleemiß zum Erhalt des Max-von-Laue-Preises 2026. Für uns alle ist dies ein Versprechen in die Zukunft der modernen Quantenkristallographie und der modernen Kristallographie im Allgemeinen.

Referenzen:

- [1] a) S. Grabowsky, A. Genoni, H.-B. Bürgi, Quantum crystallography. *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 4159–4176; b) A. Krawczuk, A. Genoni, Current developments and trends in quantum crystallography. *Acta Cryst. B* **2024**, *80*, 249–274.
- [2] F. Kleemiss, O. V. Dolomanov, M. Bodensteiner, N. Peyerimhoff, L. Midgley, L. J. Bourhis, A. Genoni, L. A. Malaspina, D. Jayatilaka, J. L. Spencer, F. White, B. Grundkötter-Stock, S. Steinhauer, D. Lentz, H. Puschmann, S. Grabowsky, Accurate crystal structures and chemical properties from NoSpherA2. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 1675–1692.
- [3] F. Kleemiss, F. Meurer, I. G. Shenderovich, M. Bodensteiner, The use of effective core potentials in Hirshfeld atom refinement: making quantum crystallography faster in NoSpherA2. *J. Appl. Cryst.* **2025**, *58*, 374–382.
- [4] J. Bergmann, F. Kleemiss, J. Creutzberg, E. Oksanen, U. Ryde, Linear-scaling aspherical crystallographic refinement of proteins: a case study for crambin and rubredoxin. *IUCr* **2026**, *13*, 53–62.
- [5] D. Brück, F. Meurer, F. Kleemiss, Benchmarking crystal structure refinement: A systematic study on Hirshfeld atom refinement. *Struct. Dyn.* **2025**, *12*, 054101.
- [6] L. M. Seifert, D. Brück, T. M. Piel, F. Kleemiss, Grid-free quantum crystallographic refinement using unbiased analytic atomic form factors from density fitting. *Z. Kristallogr.* **2026**, DOI: 10.1515/zkri-2026-0013.
- [7] D. Brück, B. Ebel, N. Pelzer, I. Kalf, F. Kleemiss, Experimental Spin State Determination of Iron(II) Complexes by Hirshfeld Atom Refinement. *Chem. Eur. J.* **2025**, *31*, e202404017.

Laudatio zur Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2025 an Horst Philipp Beck

(Robert Haberkorn, Saarbrücken; Holger Kohlmann, Leipzig)



Der Laureat Prof. Dr. Horst Philipp Beck spricht über die Historie von AGKR und DGK.

Prof. Beck im Kreise einiger seiner Schüler (v.l.n.r. Prof. Dr. H. Kohlmann, Dr. R. Haberkorn, Prof. Dr. O. Clemens.

Liebe DGK-Mitglieder, sehr geehrte Anwesende,

es ist uns eine Ehre heute die Laudatio zur Verleihung der Carl-Hermann-Medaille 2026 an Prof. Dr. Horst Philipp Beck hier halten zu dürfen.

Horst Philipp Beck erhält die Carl-Hermann-Medaille für strukturelle Untersuchungen an anorganischen Halogeniden und Chalkogeniden mittels experimenteller und quantenmechanischer Methoden sowie für die Erarbeitung eines besseren Verständnisses von Bindungsprinzipien und strukturdirigierenden Einflüssen.

Als Wissenschaftler steht man immer wieder vor der Frage, ob man den Schwerpunkt seiner Aktivitäten auf das Ansammeln von Erkenntnissen, auf das Verstehen von Zusammenhängen, die technische oder gar kommerzielle Nutzung von Wissen oder den persönlichen Erfolg ausrichten möchte. Horst Beck hat früh sein Wirken darauf ausgerichtet, Zusammenhänge besser zu verstehen, basierend auf experimentellen und theoretischen Ergebnissen.

Bereits in seiner Diplomarbeit (1967) beschäftigte sich Horst Beck mit Struktur und anisotropem thermischen Schwingungsverhalten von anorganischen Festkörpern, speziell Europiumdiiodid. In seiner Doktorarbeit wurde dies ausgeweitet auf eine Reihe von weiteren Seltenerd-Dihalogeniden. Dabei wurde neben den klassischen Methoden der Strukturfindung erstmalig auch die 1968 von Hirshfeld vorgestellten Cheshire-Gruppen zur Strukturfindung und Strukturklärung angewendet.

Im Rahmen der Habilitation wurde die Palette der betrachteten Verbindungen auf Halogenide und Oxohalogenide von Erdalkalielelementen und dreiwertige Seltenerden erweitert. Hochdruckexperimente spielten eine zentrale Rolle. Eine Belt-Apparatur ermöglichte Synthesen unter erhöhtem Druck und hoher Temperatur. So erhaltene Hochdruckphasen konnten nach Abschrecken oft als metastabile Phase unter Normalbedingungen charakterisiert werden¹. Um das Verhalten *in-situ* unter Druck charakterisieren zu können wurden zudem Diamantstempelzellen und Filmaufnahmen verwendet.

Während dieser Karlsruher Zeit war Horst Beck Mitglied im Arbeitskreis von Hartmut Bärnighausen, dessen Leistungen 1997 mit der Carl-Hermann-Medaille gewürdigt wurden. Horst Beck war beteiligt an der systematischen Entwicklung der Gruppe-Untergruppe-Beziehungen, die später als Bärnighausen-Stammbäume bekannt wurden und bis heute ein fundamentales Werkzeug kristallographischer Ableitungen darstellen.

Nach der Habilitation nahm Horst Beck einen Ruf an die Universität Erlangen an. Für ihn wurden die akademische Lehre und die Nachwuchsförderung ein besonderes Anliegen. Dabei wurden auch in persönlichen Gesprächen nicht nur die Fundamente und Werkzeuge der Festkörperchemie und Kristallographie vermittelt, sondern auch eine grundsätzliche Einstellung zu wissenschaftlichem Arbeiten: Bereitschaft auch scheinbar einfache Ergebnisse kritisch zu hinterfragen, Qualität vor Quantität zu stellen und ehrlich mit Ergebnissen umzugehen.

In den etwa 10 Jahren der Erlanger Zeit blieb die Hochdruck-Chemie ein Schwerpunkt. Ein klassisches Einkristalldiffraktometer, ein Philips PW1100, ermöglichte Messungen unter Normaldruck und mittels Diamantstempelzellen unter währendem Druck. Zudem wurde ein Vierkreis-Pulverdiffraktometer mit linear ortsauflösendem Proportionalzähler entwickelt und aufgebaut, das für Hochdruckexperimente optimiert war². Digitale Messungen an Polykristallen *in-situ* unter Druck an einem Labordiffraktometer waren damals noch weitgehend Neuland.

Für das Verhalten von Substanzen unter hohem Druck interessierten sich damals speziell Geologen und Geochemiker, die dadurch den Aufbau der tieferen Erdkruste besser verstehen wollten. Horst Beck hatte eine andere Motivation. In Kristallen ist die Größe von Ionen eine der strukturdirektierenden Parameter, ebenso wie der Bindungscharakter. Unter Druck verändern sich diese Parameter, sodass durch Druckexperimente auch deren Einfluss besser erkannt und verstanden werden kann. Dabei wurden als Schwerpunkt metastabile Hochdruck-Modifikationen von Seltenerdsulfidfluoriden untersucht und Strukturparameter von ternären Mischhalogeniden bestimmt.

1989 folgte Horst Beck einem Ruf an die Universität des Saarlandes in Nachfolge von Ewald Blasius. Die bis dato geltende Ausrichtung der Professur auf analytische Chemie und Radiochemie erhielt als neuen Schwerpunkt die Festkörperchemie.

Horst Beck hatte schon immer Interesse an mathematischen Modellen zur Beschreibung oder theoretischen Erklärung von anorganischen Strukturen. Dies konnten schon zu Erlanger-Zeiten so einfache Programme wie das 1969 von Villinger vorgestellte Programm DLS (*distance least squares*) sein. Mit zunehmender Verfügbarkeit auch leistungsfähiger Rechner wurden rechenintensivere Programme wie LMTO oder LMTART und später CASTEP oder VASP eingesetzt oder Programme selbst erstellt.

Die theoretischen Rechnungen waren kein Selbstzweck, sondern ermöglichten experimentelle Befunde zu ergänzen und tiefergehend zu interpretieren. Diese Rechnungen ermöglichten neben „einfachem“ Vergleichen von Stabilitäten der unterschiedlichen Phasen polymorpher Verbindungen auch das theoretische Abschätzen von Druck-induzierten Phasenübergängen. Neben Bulk-Enthalpien sind aber auch Ober- oder Kontaktflächenpotentiale zugänglich sowie sog. POPS, Null-Potentialflächen, die eine Charakterisierung von Strukturfamilien erlauben³.

Kristallstrukturen lassen sich anhand von Beugungsexperimenten an Einkristallen meist recht gut beschreiben. Ist die Struktur unbekannt, so ist die Strukturfindung an Einkristallen durch moderne Programme oft ebenfalls eher Routine als Herausforderung.

Die Strukturfindung an polykristallinen Proben ist dagegen oft problematischer und stellt höhere Anforderung an den Wissenschaftler. Mit zunehmender Rechenleistung und Entwicklung entsprechender Algorithmen und Programme ist das mittlerweile auch anhand von Messungen an Labor-Geräten oft machbar. Der Einsatz von Neutronenbeugung oder Synchrotron-Strahlung kann dies jedoch erleichtern oder Details besser erkennbar machen.

So wurde die Struktur der gemischtvalenten Verbindung Mn_3VO_8 anhand von Labor-Pulverdaten gelöst und anschließend durch Neutronenbeugung präzisiert.

Zum Phasendiagramm zum System RbCl-PbCl_2 konnten für zwei bis dahin unbekannte Verbindungen die Strukturen ebenfalls aus Pulverdaten gelöst werden⁴. Dazu waren jedoch Messungen an einem Synchrotron nötig. Dadurch konnte die Sonderstellung des ns^2 -Kations Pb^{+2} gegenüber denen der Erdalkalitionen konkretisiert werden. Auch in vielen anderen Untersuchungen von Horst Beck spielten ns^2 -Kationen, wie In^{+1} oder Sn^{+2} , eine wichtige Rolle, um zu klären wie stark der ns^2 -Charakter strukturdirigierend ist.

Bei den Untersuchungen an BiVO_4 ging es dagegen nicht um die Diskussion des ns^2 -Charakters des Bi^{+3} , sondern um das Verstehen des Einflusses von Dotierungen auf die Eigenschaften dieses Buntpigments.

Die Eigenschaften und die Struktur einer Phase werden nicht nur durch Art und Stöchiometrie der beteiligten Atome bestimmt. Auch Herstellungsweg, Druck, Temperatur und Realbau spielen eine entscheidende Rolle.

Zu perowskitischen Materialien, wie Erdalkalititanate und -zirkonate, wurde eine breite Palette an Reaktionsmethoden eingesetzt um diese im nano- und grobkristallinen Zustand vergleichend in Bezug auf Realbau und strukturellen Eigenschaften zu untersuchen. Der Herstellungsweg entscheidet jedoch auch darüber welche Nebenphasen entstehen können. Die entsprechenden Mechanismen wurden aufgeklärt - ein Beitrag zum Verständnis funktioneller Materialien⁵.

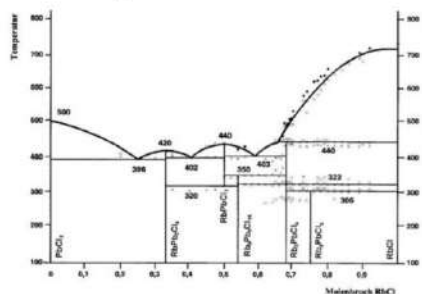


Abb. 1 Neuermessenes Phasendiagramm RbCl-PbCl_2 (Temperaturen in $^{\circ}\text{C}$)

Symbolerklärung:

- extrapolierte Onset-Temperaturen ○ Temperaturen im Peakmaximum
- ◆ Temperaturen aus der Alktilkurve bestimmt (durch Differenzbildung zweier Peakmaxima, von denen eines auch in der Aufheizkurve vorhanden sein muss)

Phasendiagramm $\text{PbCl}_2 - \text{RbCl}$. Entnommen aus ⁴

Nach der Würdigung von Lebensweg und Gesamtwerk möchten wir einen Beitrag besonders hervorheben, der das wissenschaftliche Denken von Horst Philipp Beck in charakteristischer Weise widerspiegelt und zeigt, dass er auch im Ruhestand die moderne Kristallchemie weiterhin auf kreative Weise mitgeprägt hat. Es geht um die erweiterte Koordinationszahlregel, um Segregation, elektrostatische Imbalance und Konnektivitäten in ionischen Festkörpern.

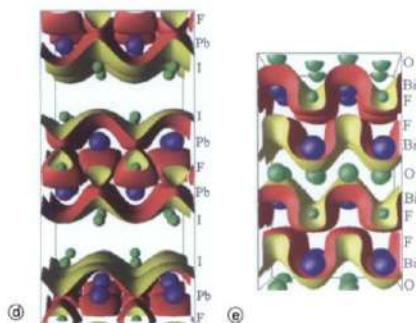


Fig. 4. POPS topology in the PbFCl structure type and in ...
d) PbF type (IV), e) BiOF type (V)

POPS-Darstellungen von PbFCl in zwei theoretischen Strukturtypen. Entnommen aus ³

Warum kristallisiert eine simple 1:2:6-Verbindung in einer recht komplexen triklinen Struktur mit neun verschiedenen Koordinationsumgebungen für die Oxidionen? Die Antwort, die Horst Philipp Beck gefunden hat, überrascht: Weil es nicht einfacher geht! Strukturelle Komplexität ist nämlich manchmal eine unausweichliche Folge bei bestimmten Kombinationen von Koordinationszahlen, Zusammensetzungen und formalen Ladungen, also vom Zusammenspiel kleiner ganzer Zahlen. Damit wird die Koordinationszahlregel von einer rein beschreibenden Betrachtung zu einem tieferen, erklärenden Verständnis geführt. Die Regel erlaubt nun mit konzeptioneller Klarheit eine differenziertere Bewertung komplexer Strukturen und eröffnet neue Perspektiven auf Stabilitätsprinzipien.

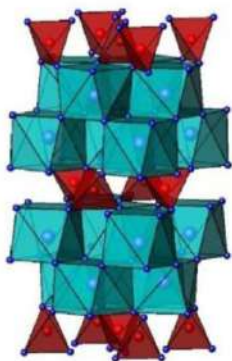


Figure 8. The structure of La_2MoO_6 , sequence of layers along [001].
 La polyhedra light blue, Mo polyhedra red.

Strukturbild von La_2MoO_6 . Entnommen aus ⁵

konzeptionellen Kern zurückzuführen, und Ihre kontinuierliche Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses haben Generationen von Schülerinnen und Schülern geprägt.

Kristallchemische Regeln, wie z. B. die von Pauling oder Baur, gehören zu den grundlegenden Konzepten der Strukturchemie. Sie erlauben eine rationale Beschreibung der Strukturen ionischer Festkörper. Aber wie erklärt man sich in ionischen Kristallen mit einfachen Zusammensetzungen und ganz gewöhnlichen Koordinationszahlen das Auftreten von sehr komplex aufgebauten Strukturen? Wer sich diese Frage schon einmal gestellt, aber keine befriedigenden Antworten gefunden hat, möge einmal die Beck'schen Arbeiten zu diesem Thema studieren.

Die Theorie geht weiter was wir hier nicht im Detail darstellen können und bezieht lokale elektrostatische Aspekte mit ein, betrachtet Konnektivitäten und zeigt sogar Wege zur Vorhersage von Strukturen auf. Und diese Reise geht weiter, lieber Herr Beck, denn Sie haben auch mit dieser Idee junge Leute angesteckt, die Ihre Ideen aufnehmen und versuchen weiter zu entwickeln. Sie können sich davon morgen früh im Mikrosymposium 6 Kristallchemie beim Vortrag von Niklas Langer gerne selber überzeugen. Ihre Ideen wirken weiter.

Über viele gemeinsame Jahre durften wir Ihre wissenschaftliche Klarheit, Ihre intellektuelle Neugier und Ihre große Offenheit in der wissenschaftlichen Diskussion miterleben. Ihre Fähigkeit, komplexe Sachverhalte auf ihren

Die Verleihung der Carl-Herrmann-Medaille durch die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie würdigt daher nicht nur ein bedeutendes wissenschaftliches Werk, sondern auch eine Persönlichkeit, deren Ideen, Begeisterung und wissenschaftliche Haltung unser Fach nachhaltig bereichert haben.

Lieber Herr Beck, von unserer Seite dazu die allerherzlichsten Glückwünsche.

Ausgewählte Literaturstellen:

1. Beck H, Strobel C. Zur Hochdruckpolymorphie der Seltenerdsulfidfluoride LnSF (Ln: Er, Yb, Lu) / High Pressure Polymorphism of Rare Earth Sulfidefluorides LnSF (Ln: Er, Yb, Lu). Zeitschrift für Naturforschung B. 06/02 1985;40:1644–1650. doi:10.1515/znb-1985-1209
2. Beck H, Kaliba C. High pressure investigations on ZrO₂ doped with Cr, Fe and Nb. Materials research bulletin. 1991;26(2-3):145–152. doi:10.1016/0025-5408(91)90004-6
3. Beck H, Beyer T. Lattice potentials as an instrument in crystal chemistry. II. Applications to the crystal bulk Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials. 1997;212(8):565–571. doi:10.1524/zkri.1997.212.8.565
4. Monzel H, Schramm M, Stöwe K, Beck HP. Zur Neuuntersuchung des Phasendiagramms RbCl/PbCl₂. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. 2000;626(2):408–411. doi:10.1002/(SICI)1521-3749(200002)626:2<408::AID-ZAAC408>3.0.CO;2-A
5. Beck H, Eiser W, Haberkorn R. Pitfalls in the synthesis of nanoscaled perovskite type compounds. Part I: Influence of different sol–gel preparation methods and characterization of nanoscaled BaTiO₃. Journal of the European Ceramic Society. 2001;21(6):687–693. doi:10.1016/S0955-2219(00)00270-3
6. Beck HP. The coordination number rule and its implications – a review. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. 2022;648(24):e202200130. doi:10.1002/zaac.202200130

Jubilare 2026

(Daniel Többens, Berlin)

95 Jahre	
Prof. Dr. Werner Fischer	Marburg
Prof. Dr. Rudolf Allmann	Marburg
85 Jahre	
Dr. Amaresh Gupta	Bonn
Prof. Dr. Georg Hinrichsen	Berlin
Prof. Dr. Michael Czank	Kiel
Prof. Dr. Horst P. Beck	Saarbrücken
Dr. Irmela Hähnert	Berlin
Dr. Dieter Zobel	Berlin
Prof. Dr. Hartmut Fueß	Frankfurt
Dr. Dieter Schmitz	Aachen
Prof. Dr. Jochen Schneider	Hamburg
Dr. Hans Weitzel	Darmstadt
80 Jahre	
Dr. Wolfgang Adlhart	Wien
Dr. Manfred Zabel	Regensburg
Prof. Dr. Klaus Bente	Leipzig
Dr. Claus-Dieter Knöchel	Darmstadt
75 Jahre	
Prof. Dr. Peter Klüfers	München
Dr. Karl Berroth	Rauenstein
Dr. Jürgen Glinnemann	Frankfurt am Main
Prof. Dr. Götz Eckold	Göttingen
Prof. Dr. Hans-Joachim Klein	Kiel
Rainer Krysch	Kaarst
Dr. Christian Hohlfeld	Potsdam
Prof. Dr. Peter G. Jones	Braunschweig
70 Jahre	
Dr. Gabriele Lampert	Berlin
Dr. Bernd Marler	Bochum

Prof. Dr. Hellmut Eckert	Münster
Dr. Helga Hoier	Stuttgart
Prof. Dr. Johannes	Beck
Dr. Gerhard Zorn	München
Prof. Dr. Gert Heino Klöß	Leipzig
Dr. Maximilian Stadler	Burghausen
Dr. Andreas Zahn	Osnabrück
Prof. Dr. Arnold Adam	Clausthal-Zellerfeld
Dieter Linke	Berlin
Prof. Dr. Christian Betzel	Hamburg
65 Jahre	
Dr. Matthias Schreck	Augsburg
Prof. Dr. Elena Boldyreva	Novosibirsk
Prof. Dr. Natalia Dubrovinskaia	Bayreuth
Dr. Claus Rüschert	Hannover
Dr. Jeroen Raymund Mesters	Lübeck
Dr. Ulrich Schwarz	Dresden
Dr. Reinhard Kleeberg	Freiberg
Dr. Dirk Kostrewa	München
Dr. Paul Ulrich Pennartz	Eschweiler
Dr. Achim Trampert	Berlin
Dr. Petra Pennartz	Eschweiler
Dr. Guido Kreiner	Düsseldorf
Dr. Stefan Kek	Freiberg
Prof. Dr. Richard Dronskowski	Aachen
Prof. Dr. Uwe Ruschewitz	Köln
Dr. Christina Günter	Potsdam
Dr. Dieter Schollmeyer	Mainz

Verstorbene Mitglieder

(Daniel Többens, Berlin)

Prof. Dr. Hartmut Bärnighausen

† 30. März 2025

Institut für Anorganische Chemie des Karlsruher Institut für Technologie KIT

Prof. Dr. Rolf Hilgenfeld

† 19. Juni 2025

Institut für Biochemie der Universität zu Lübeck

Dr. Wilhelm Mertin

† 26. September 2025

Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Justus-Liebig-Universität Gießen

Dr. Jan Willem Bats

† 22. Oktober 2025

Institut für Organische Chemie der Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dr. Wolfgang Wilde

† 24. Dezember 2025

Berlin

Prof. Dr. Wolfram Saenger

† 16. Februar 2026

Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin

Prof. Dr. Georg E. Schulz

† 2. April 2026

Institut für Biochemie der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Nachruf auf Herrn Georg Schulz (24. August 1939 - 2. April 2026)

(Yves A. Muller, Erlangen-Nürnberg; Thilo Stehle, Tübingen; Manfred S. Weiss, Berlin)

Mit tiefer Trauer nehmen wir Abschied von Prof. Dr. Georg E. Schulz, einem der Pioniere der Proteinkristallographie und einem herausragenden Strukturbologen.

Georg Schulz begann seine wissenschaftliche Laufbahn mit einem Physikstudium in Berlin und Heidelberg, wo er 1966 promovierte. Zu einer Zeit, als die Strukturblogie noch in den Kinderschuhen steckte und nur eine Handvoll Proteinstrukturen bekannt waren, entschied er sich, dieses weitgehend unerforschte Gebiet zu bearbeiten. Als Postdoktorand an der Yale University machte er sich mit der Methodik der Proteinkristallographie vertraut und legte damit den Grundstein für seine weitere wissenschaftliche Laufbahn. Nach seiner Rückkehr nach Deutschland gründete er am Max-Planck-Institut für medizinische Forschung in Heidelberg eine der ersten deutschen Forschungsgruppen, die sich der Proteinkristallographie widmete. Es folgten mehrere Forschungsaufenthalte, darunter 1980 ein Aufenthalt am Weizmann-Institut in Rehovot, bevor er 1983 zum Professor an der Universität Freiburg berufen wurde, wo er bis zu seiner Pensionierung im Jahr 2007 tätig war.

Obwohl Georg Schulz eine Ausbildung als Physiker absolviert hatte, war er von einem tiefen Interesse am Verständnis der molekularen Grundlagen biologischer, biochemischer und medizinischer Prozesse getrieben. Er leistete zahlreiche wegweisende Beiträge zur Aufklärung der Struktur-Funktions-Beziehungen bei Proteinen. Seine frühen Arbeiten konzentrierten sich auf Nukleotid-bindende Proteine und die strukturellen Prinzipien, die dem Reaktionsmechanismus der Enzyme Adenylatkinase und Glutathionreduktase zugrunde liegen. Später, Anfang der 1990er Jahre, gelang es ihm als Erstem, die Struktur des passiven Kanals Porin zu bestimmen, was grundlegende Erkenntnisse über β -Fass-Membranproteine lieferte. Diese und viele andere Studien haben unser Verständnis der Proteinfunktion tiefgreifend beeinflusst und maßgeblich zur Entwicklung der Strukturblogie als Wissenschaftsdisziplin beigetragen. Insgesamt sind mittlerweile mehr als 200 Strukturen in der Protein Data Bank mit seinem Namen verbunden.

Im Laufe seiner wissenschaftlichen Laufbahn hat Georg Schulz mehr als 250 wissenschaftliche Publikationen verfasst oder mitverfasst, von denen die meisten in renommierten Fachzeitschriften erschienen sind. Außerdem schrieb er 1979 gemeinsam mit R. Heiner Schirmer das Lehrbuch „Principles of Protein Structure“, das bis heute ein grundlegendes Werk ist, das Generationen von Wissenschaftlern geprägt und geleitet hat. Georg Schulz war zudem Mitglied der Redaktionsbeiräte führender Fachzeitschriften auf diesem Gebiet, darunter „Science“ und das „Journal of Molecular Biology“.

Ebenso bedeutend war seine Rolle als Lehrer und Mentor. Zahlreiche Studenten schlossen unter seiner Betreuung ihre Promotion ab, von denen viele später selbst zu führenden Persönlichkeiten in der Strukturblogie wurden.

Seine wissenschaftlichen Leistungen wurden mit mehreren Auszeichnungen gewürdigt, darunter der Max-Planck-Forschungspreis und der *Phoenix Pharmacy Science Award*. 1998 wurde er in die Leopoldina, die Deutsche Akademie der Naturforscher, gewählt.

Für sein herausragendes Lebenswerk erhielt er 2019 die renommierte Carl-Hermann-Medaille der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK), mit der sowohl seine wissenschaftlichen Leistungen als auch sein nachhaltiger Einfluss auf das Fachgebiet gewürdigt wurden.

Mit dem Tod von Georg E. Schulz verliert die Wissenschaftsgemeinschaft einen visionären Forscher, einen engagierten Lehrer und eine der Gründungsfiguren der modernen Proteinkristallographie. Sein Vermächtnis lebt in seinen Arbeiten, in seinen Schülern und in dem Fachgebiet weiter, das er so maßgeblich mitgeprägt hat.

*Anmerkung: Die hier veröffentlichte deutsche Version des Nachrufs wurde aus J. Mol. Biol. **438**, 169843 (2026) (<https://doi.org/10.1016/j.jmb.2026.169843>) übersetzt und wird hier mit Genehmigung von J. Mol. Biol. abgedruckt.*



Das Foto zeigt Georg Schulz im November 2014 anlässlich des 50. Geburtstags seiner Tochter Annette.

Nachruf auf Herrn Jan Willem Bats (1949 - 2025)

(Martin U. Piepenbring, Frankfurt am Main; Michael Göbel, Frankfurt am Main)

Dr. Jan Willem Bats war an der Goethe-Universität in Frankfurt am Main als unabhängiger Wissenschaftler für die Röntgenstrukturanalyse organischer Verbindungen verantwortlich.

Am 8.2.1949 wurde er in Eibergen in den Niederlanden geboren. Nach dem Abitur studierte er Chemie in Enschede (Niederlande) mit Schwerpunkt Kristallographie. Bereits 1971, also mit 22 Jahren, erschien seine erste Veröffentlichung, über die Kristallstruktur von Dimethylferrocenium-triiodid [1].

Während seiner Doktorarbeit war er für 2 Jahre in Buffalo (USA). Abends um 18 Uhr kam er nach Hause, kochte sich etwas und ging dann um 20 Uhr wieder zur Arbeit, weil ihm das Thema –



Kristallstrukturanalyse – so viel Spaß machte. Und das an 7 Tagen pro Woche. Offenbar hat er sich dabei überarbeitet und zu wenig auf seine Gesundheit geachtet. Jedenfalls hatte er, als er aus den USA zurückkehrte, Rheuma – mit 25 Jahren – und musste ins Krankenhaus. Trotzdem promovierte er 1975 in Enschede. Anschließend blieb er noch ein Jahr in Enschede. Er wäre gerne wieder in die USA gegangen, entschied sich aber wegen seiner Krankheit dagegen.

1977 trat er eine Stelle bei Prof. Hartmut Fieß am Institut für Kristallographie an der Goethe-Universität in Frankfurt am Main an. Mit Hartmut Fieß arbeitete er auch am Reaktor in Grenoble. Sein Engagement ging noch weiter: Bei einer Havarie in einem niederländischen Kernkraftwerk half er mit, eine Kernschmelze zu verhindern.

1986 heiratete Jan W. Bats seine Frau Marianne. Zunächst wohnten sie in Darmstadt, seit 1989 in einem Eigenheim in Steinbach am Taunus bei Frankfurt. 1987 und 1990 kamen zwei Söhne zur Welt.

Als Hartmut Fieß 1989 nach Darmstadt ging, wechselte Jan Bats ins Institut für organische Chemie (später „Institut für organische Chemie und chemische Biologie“). Dort wollte man in die Röntgenstrukturanalyse einsteigen. Parallel dazu wurde ein Einkristalldiffraktometer beschafft, und Ernst Egert als Professor für Modelling und Kristallographie berufen.

In den folgenden Jahren bestimmte Jan Bats weiterhin unzählige Kristallstrukturen organischer Verbindungen. Dies führte zu mehr als 400 Publikationen mit Jan W. Bats als Autor oder Coautor. Teilweise waren sehr knifflige Fälle darunter. Beispielsweise beobachtete er bei einer unserer Verbindungen (1,5-Dianilinopentane-1,3,5-trione) eine seltsame Auslöschungsregel: In einer C-zentrierten monoklinen Elementarzelle waren 5/8 der Reflexe ausgelöscht: Zusätzlich zu den Reflexen, die wegen der C-Zentrierung fehlen, waren auch alle Reflexe mit geradem h und k , aber ungeradem l ausgelöscht. Es stellte sich heraus, dass der Kristall aus Domänen von zwei verschiedenen Polymorphen

bestand, deren Reflexe sich teilweise exakt überlagerten und daher diese seltsamen Auslöschungsbedingungen verursachten [2]. Solche Domänenkristalle fand er insgesamt drei Mal [3,4]. Schade, dass solche spannenden kristallographischen Highlights oft in der Masse der anderen Publikationen untergehen.

Jan Bats war – bei aller wissenschaftlichen Brillanz – stets bescheiden, hilfsbereit und kooperativ. Wenn ihm jemand, was häufiger vorkam, eine schlechte Probe brachte, sagte er nur: „Mal sehen, ob man etwas machen kann“ – und in vielen Fällen fand er dann doch einen Kristall, aus dem er die Struktur bestimmen konnte. 2014 wurde er pensioniert.

Sein Leben war gekennzeichnet durch seine Krankheit, das Rheuma, das sich mit den Jahren immer weiter verschlimmerte. Er war stark gehbehindert und hatte deformierte Füße, Knie und Hände. Später kamen Hautkrebs (wahrscheinlich durch eines der Rheuma-Medikamente verursacht) und zwei Schlaganfälle hinzu. Hilfsmittel wie Rollstuhl, Hörgerät oder Therapien lehnte er als zu anstrengend und nicht effektiv ab. Dafür blieb seine Begeisterung für die Kristallographie bis zu seinem Tode ungebrochen und half ihm, alle Beschwerden mit bewundernswerter Tapferkeit zu ertragen. Bis wenige Tage vor seinem Tod las er noch wissenschaftliche Artikel und freute sich über jede Ausgabe der „DGK-Mitteilungen“. Aber auch ein starker, wacher Geist ist der Vierfachbelastung aus Rheuma, Krebs, Schlaganfall und jahrzehntelanger Einnahme von starken Medikamenten auf Dauer nicht gewachsen. So starb er am 22.10.2025 mit 76 Jahren in Oberursel bei Frankfurt an Herz-Kreislaufversagen.

Er hinterlässt seine Ehefrau, zwei Söhne und zwei Schwiegertöchter. Wir werden ihn immer als hilfsbereiten, begeisterten Kristallographen in Erinnerung behalten.

Prof. Dr. Martin U. Piepenbring
Goethe-Universität
Institut für Anorganische
und Analytische Chemie
Max-von-Laue-Str. 7
60438 Frankfurt am Main

Prof. Dr. Michael Göbel
Goethe-Universität
Institut für Organische Chemie
und Chemische Biologie
Max-von-Laue-Str. 7
60438 Frankfurt am Main

[1] J.W. Bats, J.J. De Boer, D. Bright: "Crystal structure of 1,1'-dimethylferrocenium triiodide", *Inorg. Chim. Acta* 1971, 5, 605-10, DOI [10.1016/s0020-1693\(00\)95995-4](https://doi.org/10.1016/s0020-1693(00)95995-4).

[2] J.W. Bats, J. Brüning, M.U. Schmidt: "1,5-Dianilinopentane-1,3,5-trione: a crystal structure containing two polymorphic domains", *Acta Cryst.* 2011, C67, o212-o218, DOI [10.1107/S0108270111017501](https://doi.org/10.1107/S0108270111017501).

[3] J.W. Bats, P. Haufe, A.S.K. Hashmi: "Polymorphism of (Z)-4-bromo-N-(pent-2-enyl)-N-(3-phenylprop-2-ynyl)benzenesulfonamide", *Acta Cryst.* 2005, C61, o288-o290. DOI: [10.1107/S0108270105008176](https://doi.org/10.1107/S0108270105008176).

[4] J.W. Bats, T. Kretz, H.-W. Lerner: "A polymorph of tetrakis(acetonitrile-κN)copper(I) tetrafluoridoborate", *Acta Cryst.* 2009, C65, m94-m96. DOI: [10.1107/S0108270109001139](https://doi.org/10.1107/S0108270109001139).

Aus dem Vorstand

Protokoll zur Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.

(Daniel Többens, Berlin)

Die Mitgliederversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. fand im Rahmen der 34. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie in Lübeck am Donnerstag, den 26. Februar 2026, von 17:45 bis 19:45 Uhr am Tagungsort in Lecture Hall 1 (AM) statt. Eine vollumfängliche Teilnahme per Video war wie in der Einladung angekündigt möglich.

1) Begrüßung

Die Vorsitzende Ute Kolb eröffnet die Sitzung um 17:50 Uhr.

2) Feststellung der Beschlussfähigkeit

Die Beschlussfähigkeit wird durch eine Zählung der Teilnehmer festgestellt. Nach §9, Abs. 6 der Satzung ist die Mitgliederversammlung beschlussfähig, wenn mindestens 5 % der persönlichen Mitglieder anwesend sind; dieses Quorum ist bei 48 Anwesenden erreicht. Es sind 52 Mitglieder vor Ort anwesend und weitere acht per Video zugeschaltet.

3) Annahme der Tagesordnung

Die Tagesordnung wird wie versandt angenommen.

4) Genehmigung des Protokolls

Das Protokoll der Mitgliederversammlung vom 11.03.2025 wird wie in Heft 55 der "Mitteilungen der DGK" auf Seite 9 ff. veröffentlicht ohne Änderungen angenommen.

5) Gedenkminute für die verstorbenen Mitglieder der DGK

In Gedenken an die verstorbenen Mitglieder wird eine Schweigeminute eingelegt. Unserem Ehrenmitglied Prof. Dr. Wolfram Saenger, welcher am 16. Februar 2026 kurz vor der Tagung verstarb, wird in einem kurzen Nachruf durch Prof. Dr. Udo Heinemann besonders gedacht.

6) Berichte

1. Bericht der Vorsitzenden

Ute Kolb dankt Lars Redecke und dem lokalen Organisationskomitee für die Vorbereitung der Jahrestagung.

Für 2025 konnte die Erstattung des IUCr-Mitgliedsbeitrags durch die DFG eingeworben werden. Der Antrag zur Übernahme des Beitrags 2026 seitens der DFG wird eingereicht, sobald die notwendigen Unterlagen vorliegen.

Die Überarbeitung der Fächerstruktur der Deutschen Forschungsgemeinschaft hat in den für die Kristallographie relevanten Fächern kaum zu Veränderungen geführt. Die von der DGK vorgeschlagene Wiedereinsetzung der Kristallographie als eigenes Fach wurde nicht umgesetzt.

2. Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

Norbert Sträter berichtet über die Aktivitäten des Nationalkomitees als Vertreter der DGK in der European Crystallographic Association und in der International Union of Crystallography. Ein ausführlicher Bericht ist dem Protokoll angehängt.

3. Bericht des Schriftführers

Daniel Többens berichtet: Die DGK hat derzeit 953 persönliche Mitglieder, davon 220 Frauen. Diese verteilen sich auf 767 Vollmitglieder, 49 Doktoranden, Arbeitslose, 124 Pensionäre, davon 34 Dauermitglieder und 3 Ehrenmitglieder. Hinzu kommen 11 Institute und andere unpersönliche Mitglieder. Die tatsächliche Altersstruktur der Gesellschaft ist allerdings ungünstiger, da von den Vollmitgliedern 177 älter als 67 Jahre sind, aber freiwillig den normalen Beitrag bezahlen. Dementsprechend gleichen die Eintritte seit der letzten Jahrestagung von 6 Doktoranden und 5 Vollmitgliedern auch nur die Austritte (6 aufgrund von Wechsel des Arbeitsfeldes, 4 nach Eintritt in den Ruhestand) aus. Darüber hinaus waren aber 11 Todesfälle zu beklagen, wodurch die Mitgliederzahl sinkt. Diese Situation wird voraussichtlich fortbestehen.

4. Bericht des Schatzmeisters

Christian Lehmann berichtet; die Finanzaufstellung ist dem Protokoll als Anhang beigefügt. Ein außergewöhnlicher Ausgabeposten von 9496,- Euro ist die Beratung durch einen Anwalt, welche für eine möglichst günstige Gestaltung der Verträge zur Organisation der IUCr 2029 notwendig war. Die finanzielle Lage der DGK ist stabil.

5. Bericht der Kassenprüfer

Der Bericht der Kassenprüfer Alexandra Friedrich und Roman Fedorov liegt schriftlich vor:

Die Prüfung der Kassenunterlagen der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) für das Geschäftsjahr 2025 wurde von Alexandra Friedrich (Universität Würzburg) und Roman Fedorov (Medizinische Hochschule Hannover) am 23. Februar 2026 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 2025 verfassten Bilanzen überein. Alle Kontenbewegungen sind nachvollziehbar und stimmig. Die Verwendung der Mittel erfolgte aus Sicht der beiden Kassenprüfer satzungsgemäß.

6. Bericht der Vertreter der DMG im Vorstand

Jürgen Schreuer und Claudia Weidenthaler berichten von den Aktivitäten der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft. Ein ausführlicher Bericht ist dem Protokoll angehängt.

7. Bericht der Vertreterin der DPG im Vorstand

Susan Schorr stellt sich als neue Vertreterin der DGK in der Deutschen Physikalischen Gesellschaft vor. Die Personalunion mit dem Vertreter der DPG im Vorstand der DGK soll beibehalten werden. Ein ausführlicher Bericht ist dem Protokoll angehängt.

8. Bericht des Kontaktes zur GDCh

In der Gesellschaft Deutscher Chemiker ist die Kristallographie in zwei getrennten Gruppen vertreten, zum einen in der Fachgruppe Festkörperchemie, zum anderen in der Arbeitsgemeinschaft Chemische Kristallographie der Fachgruppe Analytik. Zu beiden wird Kontakt gehalten.

9. Bericht des Redakteurs der Mitteilungen der DGK

Dirk Meyer, Tilmann Leisegang, Hartmut Stöcker & Melanie Nentwich übergeben die Redaktion der „Mitteilungen“. Der Vorstand dankt dem ausscheidenden Redaktionsteam für mehr als 20 Jahre aufwendiger Arbeit. Neuer Redakteur ist Alexander Wollbrink. Dieser stellt das neue Konzept der „Mitteilungen“ vor: Als Ergebnis der Kommission zur Übergabe und möglichen Neuausrichtung der Redaktion „Mitteilungen“ wurden folgendende Änderungen erarbeitet:

i.) die reguläre Erscheinungsform wird elektronisch, als pdf, sein. Eine gedruckte Ausgabe wird auf Wunsch in einem Opt-In-Modell angeboten; dies wird mit der

nächsten Ausgabe auch den Mitgliedern bekanntgemacht, die per E-Mail nicht erreicht werden können,

ii.) für die Einreichung von Beiträgen wurde eine neue E-Mail-Adresse „redaktion@dgk-home.de“ als niederschwelliges Angebot eingerichtet,

iii.) für die Mitteilungen wurde als jährlich erscheinende Zeitschrift, eine weltweit gültige ISSN bei der Deutschen Nationalbibliothek (DNB) beantragt,

iv.) es soll eine neue DOI für alle Mitteilungshefte mit Hilfe des öffentlichen Repositoriums der Technischen Informationsbibliothek (TIB) Hannover zugeordnet werden,

v.) ausgewählte Beiträge aus den Mitteilungen sollen als Blog-Artikel erscheinen, die wiederum auf dem neuen LinkedIn Account der DGK gepostet werden können.

Alle diese Maßnahmen sollen den Zugang und die Sichtbarkeit des Fachgebietes „Kristallographie“ im Rahmen der Tätigkeit der DGK verbessern.

Mit dem Ausscheiden des bisherigen Redaktionsteam musste auch eine Nachfolge für die bisherige Druckerei, auch Dank an Herrn Bert Buschmann, gefunden werden. Dies übernimmt nun die Druckerei „DruckTeam“ in Hannover.

Als neuer Redakteur der „Mitteilungen“ möchte ich mich hiermit beim vorherigen Redaktionsteam für ihre jahrelange Arbeit und die hilfsbereite und freundliche Übergabe bedanken.

10. Bericht des Redakteurs der Homepage

Götz Schuck berichtet: Die Webseiten der DGK leben von aktuellen Inhalten. Insbesondere die Arbeitskreise sind aufgefordert, ihre Aktivitäten entweder selbst auf der Website einzupflegen oder zur Veröffentlichung zur Verfügung zu stellen. Berichte der Arbeitskreise können über den DGK-Blog eingebunden werden (z.B. https://dgk-home.de/arbeitskreise/chemische_kristallographie/blog/). Auch die Veröffentlichung weiterer arbeitsgruppenspezifischer Inhalte ist möglich. Die Möglichkeit, Stellenausschreibungen auf den Webseiten der DGK zu veröffentlichen oder auf Veranstaltungen aufmerksam zu machen, wird rege genutzt. Die Webseiten der DGK sind durch die Indexierung der Websuchmaschinen gut auffindbar und werden unter den ersten zehn Treffern angezeigt. Das Potential, für die Kristallographie als wissenschaftlichen Bereich zu werben, könnte durch kreative Inhalte besser ausgeschöpft werden.

Ebenfalls wurde ein Auftritt der DGK bei LinkedIn eingerichtet; dieser wird von Florian Meurer betreut.

7) Entlastung des Vorstands

Der Vorstand wird einstimmig, ohne Enthaltungen entlastet. Die per Video teilnehmenden Mitglieder stimmen dabei mittels der „Reaktion“-Funktion der Videokonferenzsoftware ab. Dies wurde auch bei allen anderen Abstimmungen so gehandhabt, sofern nicht anderweitig erwähnt.

8) Wahl zweier Kassenprüfer für das folgende Geschäftsjahr

Die bisherigen Amtsinhaber Alexandra Friedrich und Roman Fedorov erklären sich bereit, erneut zu kandidieren. Sie werden einstimmig, ohne Enthaltungen, gewählt.

9) Beschluß der Beitragsordnung

Die Beitragsordnung bleibt unverändert:

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

[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,- Euro.

Diese Beitragsordnung wird mit einer Gegenstimme, ohne Enthaltungen angenommen.

10) Wahl des Preiskomitees für die Carl-Hermann-Medaille

Die Wahlen zu den Preiskomitees erfolgen als geheime Wahl. Jedes Mitglied kann maximal für so viele Kandidaten stimmen, wie Plätze im Komitee zu besetzen sind. Mehrere Stimmen für einen Kandidaten sind nicht möglich. Die Stimmabgabe der per Video teilnehmenden Mitglieder erfolgt in gleicher Weise unter Verwendung der von der an der Universität Lübeck für diesen Zweck zur Verfügung stehenden Software. Das Ergebnis der Auszählung wird noch im Verlauf der Mitgliederversammlung verkündet.

Es werden vier Mitglieder des Preiskomitees für die Vergabe der Carl-Hermann-Medaille gewählt; hierzu kandidieren fünf Mitglieder der DGK:

Wulf Blankenfeldt	33 Stimmen
Thomas Doert	47 Stimmen
Melanie Nentwich	46 Stimmen
Ullrich Pietsch	20 Stimmen
Claudia Weidenthaler	46 Stimmen

Damit sind Wulf Blankenfeldt, Thomas Doert, Melanie Nentwich und Claudia Weidenthaler gewählt.

11) Wahl des Preiskomitees für die Will-Kleber-Gedenkmünze

Es werden vier Mitglieder des Preiskomitees für die Vergabe der Will-Kleber-Gedenkmünze gewählt; hierzu kandidieren sechs Mitglieder der DGK:

Matthias Epple	32 Stimmen
Johanna Hakanpää	36 Stimmen
Julia Hübner	31 Stimmen
Reinhard Neder	38 Stimmen
Martin U. Piepenbring	18 Stimmen
Susan Schorr	40 Stimmen

Damit sind Matthias Epple, Johanna Hakanpää, Reinhard Neder und Susan Schorr gewählt.

12) Wahl des Preiskomitees für den Lieselotte-Templeton-Preis

Es werden drei Mitglieder des Preiskomitees für die Vergabe des Lieselotte-Templeton-Preises gewählt; hierzu kandidieren vier Mitglieder der DGK:

Tobias Beck	33 Stimmen
Tilman Leisegang	43 Stimmen
Oliver Oeckler	26 Stimmen
Iris Oppel	43 Stimmen

Damit sind Tobias Beck, Tilman Leisegang und Iris Oppel gewählt.

13) Satzungsänderung: Wahlverfahren zum Vorstand

Christian Lehmann erläutert die vorgeschlagenen Änderungen der Satzung. Das bisherige Verfahren der Vorstandswahl in der Satzung der DGK wird durch ein Online-Verfahren ersetzt. Hierzu wird §12 „Wahlen zum Vorstand“ in der Satzung geändert und eine Wahlordnung erlassen. Von dieser Änderung wird eine höhere Wahlbeteiligung erwartet. Nach einer Diskussion werden die Satzungsänderung und die zugehörige Wahlordnung einstimmig, ohne Enthaltungen beschlossen.

Der neue Text der Satzung ist:

§ 12 Wahlen zum Vorstand

- 1. Die Vorsitzende / der Vorsitzende, die stellvertretende Vorsitzende / der stellvertretende Vorsitzende, die Schriftführerin / der Schriftführer und die Schatzmeisterin / der Schatzmeister werden für eine Periode von 3 Jahren von den Mitgliedern online gewählt. Die Vorsitzende / der Vorsitzende des Nationalkomitees wird von den Mitgliedern des Nationalkomitees gemäß §13 Abs. (4) gewählt.*
- 2. Die Wahlen erfolgen geheim und für die einzelnen Funktionen getrennt.*
- 3. Der Vorschlag des amtierenden Vorstandes für die Wahlen ist spätestens 4 Wochen vor der Wahl bekannt zu geben. Weitere bereits eingegangene Wahlvorschläge aus dem Kreis der Mitglieder werden gleichzeitig bekanntgegeben. Innerhalb von 3 Wochen können weitere Wahlvorschläge schriftlich eingebracht werden. Die Zustimmung der vorgeschlagenen Kandidatinnen / Kandidaten zu ihrer Kandidatur muss vor der Wahlhandlung gesichert sein.*
- 4. Die Wahl selbst findet im Zeitraum von vier Wochen vor der nächsten Mitgliederversammlung statt. Die Wahlordnung regelt die Fristen für eine erforderliche Stichwahl.*
- 5. Eine unmittelbare Wiederwahl der Vorsitzenden / des Vorsitzenden und der stellvertretenden Vorsitzenden / des stellvertretenden Vorsitzenden in ihre bisherige Funktion ist nicht zulässig.*
- 6. Gewählt ist, wer die absolute Mehrheit der abgegebenen Stimmen erhält.*
- 7. Erreicht keine Kandidatin / kein Kandidat die absolute Mehrheit, so findet in einem zweiten Wahlgang eine Stichwahl zwischen den beiden Kandidatinnen / Kandidaten mit der größten Stimmzahl statt. Gewählt ist, wer die größte Anzahl Stimmen erhält. Im Fall nur einer Kandidatin / eines Kandidaten wird dieser in einem zweiten Wahlgang erneut zur Abstimmung gestellt und ist mit der relativen Mehrheit der Ja-Stimmen (gegenüber den Nein- Stimmen) gewählt.*
- 8. Die Amtsperiode der neu gewählten Mitglieder des Vorstandes beginnt mit dem Ende der Mitgliederversammlung, auf der das Ergebnis der Wahl bekanntgegeben wird.*

9. Scheidet ein gewähltes Mitglied des Vorstandes vorzeitig aus, so sind zum frühestmöglichen Zeitpunkt Nachwahlen durchzuführen. Der Vorstand kann durch Beschluss bis zur nächsten Mitgliederversammlung eine kommissarische Vertreterin / einen kommissarischen Vertreter für die Ausgeschiedene / den Ausgeschiedenen benennen. Diese / dieser besitzt die gleichen Rechte wie das ausgeschiedene Vorstandsmitglied. Als kommissarische Vorsitzende / kommissarischer Vorsitzender kann nur ein gewähltes Mitglied des Vorstandes eingesetzt werden. Die Amtszeit der durch Nachwahlen bestimmten Vorstandsmitglieder erstreckt sich auf den Rest der Amtsperiode der Ausgeschiedenen / des Ausgeschiedenen. Für die durch Nachwahlen oder kommissarische Einsetzung neu bestimmten Vorstandsmitglieder ist eine einmalige unmittelbare Wiederwahl in ihre bisherige Funktion zulässig.

10. Der Vorstand bleibt bis zur Wahl eines neuen Vorstandes im Amt.

11. Die Durchführung der Online-Wahl regelt eine Wahlordnung.

Der Text der neuen Wahlordnung ist:

Wahlordnung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e. V.

§ 1 Umfang

Diese Wahlordnung ergänzt die Regelungen der Satzung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie zu den Vorstandswahlen gemäß § 12 Abs. 4 in der Fassung vom 26.02.2026, sowie die Regelungen zu den sonstigen Wahlen und Abstimmungen der DGK.

§ 2 Online-Wahlverfahren

Vorstandswahlen, Echtzeit-Wahlen und –Abstimmungen während der Mitgliederversammlung werden vorzugsweise mit der webbasierten Anwendung *abstimmen.online* durchgeführt. Diese Anwendung wird vom Anbieter *abstimmen.online e.V.*, Vereinsregister Kempten VR 201385, Georg-Guggenmos-Str. 10, 87490 Haldenwang bereitgestellt. Die Einhaltung der Bestimmungen der DSGVO ist im Rahmen einer Vereinbarung zur Auftragsdatenverarbeitung sichergestellt.

§ 3 Geheimhaltung

Die Einhaltung des Wahlgeheimnisses bei geheimen Wahlen gemäß den Regelungen der Satzung der DGK ist sicherzustellen.

§ 4 Wahlbenachrichtigungen

Die wahlberechtigten Mitglieder der DGK werden über personalisierte elektronische Benachrichtigungen zur Teilnahme an Vorstandswahlen, sowie zu Wahlen und Abstimmungen während der Mitgliederversammlungen eingeladen. Hierzu pflegt die DGK auf Basis der Mitgliederdatenbank ein Wählerverzeichnis. Ankündigungen zu bevorstehenden Online-Wahlen werden zusätzlich auf der Webseite der DGK veröffentlicht.

§ 5 Ergänzung zu § 12 Abs. 7 (Stichwahlen) der Satzung

Hat bei der Vorstandswahl für eine Vorstandsposition kein Kandidat die erforderliche absolute Mehrheit der gültigen Stimmen erhalten, wird für die entsprechende Vorstandsposition eine Stichwahl unter den Kandidaten mit den meisten gültigen Stimmen durchgeführt. Hierüber werden die Wahlberechtigten umgehend erneut benachrichtigt. Die Frist für die Stimmabgabe bei der Online-Stichwahl für die betroffenen Vorstandspositionen beträgt eine Woche. Erhalten bei der Stichwahl zwei oder mehr Kandidaten die gleiche Anzahl gültiger Stimmen, entscheidet das Los.

§ 6 Echtzeit-Wahlen und –Abstimmungen

Während der Mitgliederversammlungen werden Wahlen zum Nationalkomitee, den Preiskomitees und Abstimmungen zu Beschlüssen online durchgeführt. Diese Wahlen und Abstimmungen erfolgen sowohl für Mitglieder, die in Präsenz anwesend sind, als auch für Mitglieder, die der Versammlung online zugeschaltet sind, vorzugsweise über die Anwendung abstimmen.online.

§ 7 Technische Voraussetzungen

Die technischen Voraussetzungen für die Online-Wahlen und Abstimmungen werden mit der Wahlbenachrichtigung bzw. der Einladung zur Mitgliederversammlung mitgeteilt. Die Ergebnisse werden elektronisch dokumentiert und gerichtsfest archiviert.

14) IUCr-Konferenz 2029 in Berlin

Der 28. Kongress der IUCr 2029 wird von der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie ausgerichtet. Die Tagung wird in Berlin stattfinden, in der Zeit vom 18. - 25. August 2029. Tagungsort wird das Estrel Hotel and Estrel Congress Center Berlin sein. Manfred Weiss stellt den aktuellen Stand der Planungen, das Planungskomitee und die weiteren Schritte vor. Die Tagung wird online neben der Webseite der DGK auf LinkedIn, Instagram und Bluesky beworben. Informationsstände auf Tagungen gab es auf der DGK-2025, ECM-35, ABCr/LACA-2025, AsCA-2025, DGK-2026. Die Akquirierung von Sponsoren läuft.

15) Aufruf zu Kandidaturen für Wahlen in 2027

Auf der Mitgliederversammlung 2027 werden Wahlen zum Vorstand, zum Nationalkomitee sowie zum Komitee für die Vergabe des Max-von-Laue-Preis stattfinden. Die Mitglieder werden gebeten, sich zu überlegen, ob sie kandidieren wollen.

16) Sonstiges

1. Für die 35. Jahrestagung 2028 werden Ort und Organisator noch gesucht.
2. 2029 wird aufgrund der IUCr in Berlin keine Jahrestagung stattfinden.
3. Auf die Treffen der Arbeitskreise im Laufe der aktuellen Tagung wird hingewiesen.
4. Die DGK schreibt Reisestipendien für Studierende oder Promovierende aus, für die noch Bewerbungen möglich sind. Konkret sind dies ein Stipendium à 400 € zur ECS 11 in Stockholm, Schweden, 28. Juni – 4. Juli 2026, sowie 3 Stipendien à 600 € a zur IUCr in Calgary, Kanada, 11.-18. August 2026. Diese Stipendien wurden auch online und per Rundmail ausgeschrieben und sind nicht auf Mitglieder der DGK beschränkt.

17) Jahrestagung 2027 in Dresden

Die Jahrestagung 2027 wird als 2nd Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2027 in Dresden stattfinden, in der Zeit 15.-18. Februar 2027. Tagungsort ist das Hilton Hotel Dresden. Tagungsleiter von Seiten der DGK ist Prof. Dr. Thomas Doert, Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie der Technischen Universität Dresden.

Die Sitzungsleiterin schließt die Sitzung um 19:40 Uhr.

Protokollführung: Daniel M. Többens

**Anhang:**

- Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees
- Bericht des Schatzmeisters
- Bericht des Vertreters der DMG
- Bericht der Vertreterin der DPG
- Teilnehmerlisten (nur dem Original angehängt)

Anhang zu TOP 6.2 - Bericht des Vorsitzenden des Nationalkomitees

(Norbert Sträter, Leipzig)

European Crystallographic Association (ECA):

Der Vorsitzende des Nationalkomitees hat während der ECM 2025 in Poznan an den zwei Sitzungen des ECA Council Meeting teilgenommen.

Jan Dohnálek hat das neue European Crystallographic Association Scholarship Scheme vorgestellt. Dabei können pro Scholarship bis zu 6.000 EUR für Reisekosten und Aufwendungen für den Aufenthalt und weitere bis zu 3.000 EUR für Ausgaben in der aufnehmenden Einrichtung beantragt werden. Information für die Antragsrunde 2025 wurden an die DGK-Mitglieder verschickt. Die Einrichtung dieses neuen Förderprogramms hängt auch mit dem auf über 200.000 EUR angewachsenem Guthaben der ECA zusammen, was insbesondere auf dem Übertrag eines größeren Betrages aus Darmstadt zurückzuführen ist, wo die Überschüsse vergangener EC-Meetings über mehrere Jahre verwaltet wurden. In der Budgetplanung 2025-2020 sind 9.000 EUR für das Scholarship eingeplant.

Die ECA hat eine neue *special interest group* (SIG-16, Magnetic Crystallography) eingerichtet.

Die ECA hat 155 persönliche, 32 nationale, und 21 Unternehmens-Mitglieder.

IUCr:

Das Nationalkomitee hat 13 Vorschläge für Kandidatinnen und Kandidaten mit Bezug zu Deutschland (Wissenschaftler/innen an Einrichtungen in Deutschland sowie Deutsche im Ausland) für die IUCr commissions eingereicht. Es wurden zwei Vorschläge für das Executive Committee eingereicht. Die Wahlen werden dieses Jahr auf dem IUCr Meeting in Calgary stattfinden. Gedankt sei allen Kandidaten/innen für ihre Bereitschaft zum Engagement in diesen Gremien und Manfred Weiss sowie allen NK-Mitgliedern für ihre aktive Unterstützung bei der Kandidatenfindung.

Das Nationalkomitee hat zwei Vorschläge für den Bragg-Preis eingereicht.

Konferenzen und Schulen der ECA und IUCr:

IUCr 27 in Calgary: 11. - 18.8. 2026

ECS 11 in Stockholm: 28.6. - 4.7. 2026. Schwerpunkte sind Kleinmolekülkristallographie, Elektronendiffraktometrie, Röntgen-Einkristallstrukturanalyse und Pulverdiffraktion.

ECM 36 in Prag: 23.-28.8. 2027

ECS 12 in the United Kingdom 2027: Schwerpunkt Strukturbasierte Wirkstoffentwicklung

ECM 37 in Athen: 27. - 31.8. 2028

Anhang zu TOP 6.4 - Bericht des Schatzmeisters

(Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr)

Einnahmen-Überschussrechnung 2025 der DGK

Einnahmen 2025				Vorjahr 2024
Mitgliedsbeiträge inkl. Laue-/ Liebau- Preisgeld Spenden	Bankeinzug 2025	21.425,00€	22.606,51€	23.554,90€
	Barzahler 2025	855,00€		
	Entnahme Dauerm Mitglieder	221,51€		
	Spenden	0,00€		
	Beiträge rückwirkend	105,00€		
Zinsen	Laue-Kapital	180,65€	238,86€	271,24€
	weitere Sparkonten	58,21€		
DFG-Zuschuss IUCr Beitrag			10.675,00€	10.694,00€
Arbeitskreise	Einnahmen	2.150,00€	2.150,00€	540,00€
	Rückzahlungen	0,00€		
Anzeigen für Mitteilungen			4.100,00€	4.300,00€
Summe Einnahmen			39.770,37€	39.360,14€

Ausgaben 2025				Vorjahr 2024
Mitteilungen			-8.280,26€	-7.875,50€
Mitgliedsbeiträge	Erstattungen	-95,00€	-785,00€	-400,00€
	Rücklastschriften	-690,00€		
Administration	Bankgebühren	-295,90€	-11.229,44€	-3.917,23€
	Stornokosten	-38,54€		
	Kapitalertragssteuer + Soli	-63,00€		
	Büromaterial, Verwaltung	-968,96€		
	Webseite	-366,84€		
	IUCr2029	-9.496,20€		
Verbände, Organisationen	IUCr Beitrag 2025	-10.675,25€	-11.675,25€	-22.388,14€
	ECA	-800,00€		
	BVMatW	-200,00€		
Arbeitskreise	Förderung	-4.544,99€	-7.113,37€	-8.269,94€
	Ausgaben	0,00€		

Reisestipendien	IUCrXXVI, ECM34 & ECS9	-1.600,00€		
Laue-Preisgeld	Umbuchungen	0,00€		
Nicolas Pearce	Auszahlung	0,00€		
Lieselotte-Templeton Preis	L. Brüning, D. Brück, N. Langer	-968,38€		
Summe Ausgaben			-39.083,32€	-42.850,81€
Rücklagenkonto Dauermmitglieder 2025				Vorjahr 2024
Einnahmen	2 neue Dauermmitglieder	240,00€	240,00€	480,00€
	Zinsen Rücklagenkonto 910	0,00€		
Ausgaben	Einzahlung DGK 2025	-221,51€	-221,51€	-219,90€
Überschuss 2025			18,49€	260,10€

Rücklage IUCr 2029		Vorjahr 2024
Rücklage für die Bewerbung um die Ausrichtung der IUCr-Tagung 2029 in Berlin	aufgelöst	aufgelöst

Differenz Einnahmen und Ausgaben der DGK 2025	705,54€	-3.230,57€
--	----------------	-------------------

Kontoführung 2025			
Konto	01.01.	31.12.	Änderung
Giro	1.392,85€	1.027,33€	-365,52€
Rücklage Dauermmitglieder 910	2.528,83€	2.547,32€	18,49€
Sonderkonto AK 1	2.837,73€	4.637,73€	1.800,00€
Rücklage IUCr2029	13.071,26€	3.594,25€	-9.477,01€
DKG - Cash 085	23.040,24€	32.063,90€	9.023,66€
Sparkasse	1.357,83€	930,74€	-427,09€
Laue-Kapital	60.215,91€	60.348,92€	133,01€
Guthaben der DGK	104.444,65€	105.150,19€	705,54€

Anhang zu TOP 6.7 - Bericht des Vertreters der DMG im Vorstand

(Jürgen Schreuer & Claudia Weidenthaler)

Im Berichtszeitraum fand im Rahmen der Gemeinschaftstagung Geo4Göttingen am 15.09.2025 in Göttingen eine Mitgliederversammlung der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) statt. Zusätzlich zu mehreren Online-Sitzungen traf sich der erweiterte Vorstand am 05./06.03.2026 wie üblich in Bad Honnef zur Frühjahrssitzung.

Die Mitgliederdatenbank wurde bereinigt, d.h. Stand März 2026 verfügt die DMG über 1465 Mitglieder, davon rund 240 studentische.

Die kurzfristige Schließung der Angewandten Geowissenschaften an der TU Darmstadt hat in der DMG Besorgnis ausgelöst und eine Diskussion darüber in Gang gebracht, ob und wie in den nächsten ca. 15 Jahren noch eine ausreichende, qualitativ hochwertige Lehre im Bereich Mineralogie / Petrologie / Kristallographie sichergestellt werden kann.

Unter Federführung von Horst Marschall (Frankfurt) arbeitet die DMG weiterhin an der Aufarbeitung der Rolle der Mineralogie im nationalsozialistischen Deutschland.

Zurzeit modernisiert die DMG ihr Corporate Design. Im Laufe des Jahres werden alle Auftritte im Internet bzw. in sozialen Medien entsprechend aktualisiert.

Personalia:

Ende November 2025 fanden turnusmäßig Online-Wahlen zum erweiterten DMG-Vorstand für die Amtsperiode 2026 – 2027 bzw. 2027 – 2028 statt. U.a. wurden gewählt:

- Stellvertretende Vorsitzende für 2026 und damit zugleich designierte Vorsitzende für 2027-2028: Claudia Weidenthaler (Mülheim),
- Schriftführer: Michael Fischer (Bremen),
- Wahlmitglied des Beirates: Elena Sturm (München) für 2026-2027 und Marie Gentzmann (Berlin) für 2027-2028,
- sowie als stellvertretende Vorsitzende der Sektionen für 2026 und designierte Sektionsvorsitzende für 2027-2028:
 - Sektion Geochemie: Jörg Elis Hoffmann (Berlin),
 - Sektion Angewandte Mineralogie: Kerstin Hauke (Höhr-Grenzhausen),
 - Sektion Kristallographie: Susan Schorr (Berlin),
 - Sektion Petrologie und Petrophysik: Oliver Plümper (Bremen).

Ehrungen und Preise in 2025:

- Georg-Agricola-Medaille für hervorragende Leistungen auf dem Gebiet der Angewandten Mineralogie: Daniel Goldmann (Clausthal).
- Doris-Schachner-Medaille für große Verdienste um die Förderung der Mineralogischen Wissenschaft: Friedhelm von Blanckenburg (Potsdam).
- Victor-Moritz-Goldschmidt-Preis für junge Wissenschaftler/innen unter 38 Jahren für besonders wichtige Arbeiten aus den vergangenen 5 Jahren: Martin Kutzschbach (Frankfurt/Main).
- Beate-Mocek-Preis für Nachwuchs-Wissenschaftlerinnen: Iris Arndt (Frankfurt am Main), Patricia Marks (Tübingen), Carina Hanser (Mainz).
- Nachwuchspreis: Max Hellers (Köln), Aleksandr Rakipov (Frankfurt/Main).
- Ehrenmitgliedschaft: Gerhard Franz (Berlin).

Künftige Tagungen:

2026, 20. – 24.08. 24th General Meeting of the International Mineralogical Association (IMA) in Nanjing, China. <https://ima2026.nju.edu.cn/>

2026, 20. – 24.09. GeoMinBochum2026 – Gemeinschaftstagung DMG & DGGV in Bochum. <https://geominbochum2026.de/>

2027, 05. – 10.09. Gemeinschaftstagung DMG, DGGV, DBG und evtl. PalGes in Hannover. 2028, 02. – 07.07. 5th emc2 in Brest, Frankreich.

Anhang zu TOP 6.7 - Bericht des Vertreters der Deutschen Physikalischen Gesellschaft im Vorstand der DGK

(Susan Schorr, Berlin)

Die Kontaktaufnahme mit der DPG war erfolgreich. Als Vertreterin der DGK in der DPG wurde ich zur Teilnahme am 46. Tag der DPG am Physikzentrum Bad Honnef eingeladen (6.11. – 8.11. 2026). Im Rahmen dieser Veranstaltung fand die Sitzung des Vorstandsrates der DPG statt, in dem der Vertreter der DGK in der DPG ein nicht-stimmberechtigtes Mitglied ist. Der DPG-Vorstandsrat setzt sich aus den Sprechern/innen der Sektionen (fachliche Vereinigungen von Fachverbänden) und der Arbeitskreise und Arbeitsgruppen (fachübergreifende Vereinigungen) sowie direkt gewählten Mitgliedern aus den Bereichen Schule, Hochschule, Wirtschaft und Vertretern der Regionalverbände zusammen. Der Vorstandsrat kann als Äquivalent einer Mitgliederversammlung angesehen werden (die DPG hat mehr als 50.000 Mitglieder, die in den Sektionen, Arbeitskreisen und Arbeitsgruppen organisiert sind), es werden alle Punkte einer Mitgliederversammlung bei der Sitzung des Vorstandsrates abgehandelt (Finanzen, Mitgliederentwicklung, etc.). Aus Gesprächen mit Mitgliedern des Vorstandsrates zeigte sich, dass ein Interesse an der DGK besteht, die vielen gar nicht bekannt war.

Der Fachverband Kristalline Festkörper und ihre Mikrostruktur (KFM), der 2017 durch die Zusammenführung der drei langjährig etablierten Fachverbände Dielektrische Festkörper (DF), Mikrosonden (MI) und Kristallographie (KR) gegründet wurde, stellte einen Antrag auf Umbenennung in „Funktionsmaterialien“. Dieser Antrag wurde mit einer Mehrheit in der Abstimmung im Vorstandsrat angenommen. Dieser Fachverband hat ca. 1000 Mitglieder und ist damit in etwa so groß wie die DGK. Der Sprecher des Fachverbandes Funktionsmaterialien ist Dr. Jan Schultheiß (*Norwegian University of Science and Technology Trondheim*). Er ist sehr offen für gemeinsame Aktivitäten mit der DGK. Als Vorschlag für gemeinsame Aktivitäten dieses Fachverbandes und der DGK haben wir gemeinsam angedacht, dass auf einer Jahrestagung der DGK ein Mikrosymposium dem Fachverband Funktionsmaterialien zugeordnet werden könnte mit Herrn Schultheis als Verantwortlichen (so wie die AK-Sprecher Mikrosymposien vorschlagen und verantworten können). Ebenso könnte auf einer Frühjahrstagung der DPG-Sektion Kondensierte Materie, zu der der Fachverband Funktionsmaterialien gehört, eine Session der DGK zugeordnet und von dieser gestaltet werden (z. B. als Fokus-Session). Es ist angedacht, einen derartigen Austausch für 2027 zu initiieren. Ein zweiter Kontakt ergab sich zum DPG-Arbeitskreis Energie (AKE), dessen Vorsitzender Dr. Ziegahn ist. Es ist angedacht, dass ich auf der Frühjahrstagung des AKE zu kristallographischen Aspekten in der photovoltaischen Materialforschung vortrage. Daraus können sich eventuell weitere gemeinsame Aktivitäten des AKE und der DGK ergeben.

Zu den Änderungen bei der DGK-Vorstandswahl und zu Online-Mitgliederversammlungen

(Christian Lehmann, Mühlheim a. d. Ruhr und Daniel Többens, Berlin)

Die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie als eingetragener und als gemeinnützig anerkannter Verein ist auf die aktive Teilnahme aller ihrer Mitglieder angewiesen. Mit mehr als 750 aktiven Mitgliedern, die über ganz Deutschland verteilt leben und arbeiten oder den wohlverdienten Ruhestand genießen, sind Vollversammlungen der Mitglieder zwar denkbar aber in der Praxis wird die jährliche Mitgliederversammlung von weniger als zehn Prozent der Mitglieder besucht. Dies gilt auch für diejenigen Mitgliederversammlungen auf denen alle drei Jahre der Vorstand der DGK neu gewählt wird. Die Erfahrungen aus der Corona-Pandemiezeit und die mittlerweile etablierten und allgemein akzeptierten Möglichkeiten Wahlen und Versammlungen online abzuhalten, haben zu Überlegungen einer weiteren Digitalisierung der DGK geführt.

Der amtierende Vorstand hatte deshalb im Hinblick auf die nächste Vorstandswahl der Mitgliederversammlung in Lübeck eine Änderung der Satzung im Hinblick auf die Vorstandswahlen vorgeschlagen. Wie von der geltenden Satzung vorgesehen wurden die Mitglieder zusammen mit der Einladung zur Mitgliederversammlung über den neuen Wortlaut rechtzeitig informiert. Die Satzungsänderung wurde zusammen mit einer Wahlordnung von der Mitgliederversammlung mit der erforderlichen Mehrheit beschlossen und ist in diesem Heft abgedruckt. Nachstehend sollen die Änderungen näher erläutert und begründet werden.

Der neue § 12 Vorstandswahlen

Die bisherige Satzung hatte als Regelfall Vorstandswahlen in Präsenz vorgesehen, nur in Ausnahmefällen war eine Briefwahl möglich. Mittels der neuen digitalen Kommunikationsmöglichkeiten finden künftig Vorstandswahlen online statt. Die eigentliche Wahl wird zeitlich von der Mitgliederversammlung entkoppelt und bietet allen DGK-Mitgliedern die Gelegenheit sich aktiv und zeitlich unabhängig an der Wahl des Vorstands zu beteiligen. Dies erfordert einige Änderungen des bisherigen Verfahrens. Unverändert bleibt, dass der amtierende Vorstand einen Wahlvorschlag unterbreitet und, ebenfalls wie bisher auch vorgesehen, können weitere Wahlvorschläge von den Mitgliedern eingereicht werden. Dies ist auch ausdrücklich erwünscht. Es mussten für diese Umstellung allerdings einige Fristen angepasst werden; die Online-Wahl erfolgt insgesamt über einen längeren Zeitraum und ist bereits vor der Mitgliederversammlung beendet. Ein *ad hoc* Vorschlag während der Mitgliederversammlung ist nicht mehr möglich. Bei der Wahl wird zwar weiterhin über jede Kandidatur getrennt und einzeln abgestimmt, die bislang vorgeschriebene Abfolge getrennten Wahlgänge für jedes Amt entfällt aber. Ansonsten würde sich die gesamte Wahl in Verbindung mit möglichen Stichwahlen über mehrere Monate erstrecken. Diese in die Länge gezogenen Wahlgänge waren auch schon auf früheren Mitgliederversammlungen problematisch. Eine echte Neuerung ist die Festlegung, dass eine Kandidatur nur für ein einziges Vorstandsamt (Vorsitz, Stellvertretender Vorsitz, Schriftführung, Kassenführung) erfolgen kann.

Die neue Wahlordnung

Werden alle Details der Wahl in der Satzung festgelegt, dann erfordern nachträgliche — Erfahrung macht klug — Änderungen des Prozederes immer eine Satzungsänderung. Diese wird erst mit Eintragung beim Registergericht wirksam, erfordert notarielle Beglaubigung und ist dadurch arbeitsaufwendig und teuer. Die Änderung einer Ordnung kann ebenfalls nur von einer Mitgliederversammlung beschlossen werden, die Hürde für die Wirksamkeit der Änderungen ist allerdings viel niedriger. Die wichtige demokratische Kontrolle durch die Mitglieder bleibt also voll erhalten, mit weniger Aufwand. Deshalb hat der Vorstand der Mitgliederversammlung die Verabschiedung einer Wahlordnung empfohlen und die Mitgliederversammlung in Lübeck ist der Empfehlung gefolgt.

Ergänzend regelt die Wahlordnung wie auf Mitgliederversammlungen, die rechtskonform als Hybrid-Veranstaltungen, das heißt sowohl mit Präsenz- als auch mit online-Teilnahme, durchgeführt werden, Abstimmungen und weitere Wahlen, wie die Wahlen zum Nationalkomitee und den verschiedenen Preiskomitees, erfolgen. Rechtzeitig vor der nächsten Wahl wird es eine ausführliche Anleitung zur Nutzung der Wahlplattform geben — auch dies gemäß der Wahlordnung.

Aufrufe und Ankündigungen

Aufruf zur Mitwirkung in den Preiskomitees

Aufruf zu Nominierungen für den Max-von-Laue-Preis 2027

(Ella M. Schmidt, Bremen)

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 die 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: +49 (0)421 / 218-65161
Email: ella.schmidt@uni-bremen.de

Alle weiteren Modalitäten zum Laue-Preis finden Sie auch auf der Web-Seite der DGK. Die Preisverleihung findet im Rahmen des Joint Polish-German Crystallographic Meeting 2027 in Dresden statt.

Einsendeschluss: **30. November 2026**

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 2027

(Reinhard Neder, Erlangen)

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 **30.11.2026** zuzusenden. Als DGK-Mitglieder sind Sie alle vorschlagsberechtigt.

Vielen Dank!

Prof. Dr. Reinhard Neder
FAU Erlangen
Institut für Kristallographie und Strukturphysik
Staudtstr. 3
91058 Erlangen

E-Mail: reinhard.neder@fau.de

Preiskomitee für die Will-Kleber-Gedenkmünze:

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

Preisordnung:

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

Bisherige Preisträger:

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

Aufruf zu Nominierungen für die Carl-Hermann-Medaille 2027

(Melanie Nentwich, Hamburg)

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

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

Im Namen des Preiskomitees möchte ich Sie daher herzlich dazu einladen, mir Ihre Nominierungen mit allen relevanten Unterlagen (Nominierungsschreiben mit Begründung der Nominierung, CV inkl. Publikationsliste des Nominierten, Unterstützungsschreiben) bis zum **30.11.2026** zuzusenden. Alle Mitglieder der DGK sind vorschlagsberechtigt.

Dr. Melanie Nentwich
Deutsches Elektronensynchrotron DESY
Notkestraße 85
D-22607 Hamburg
Tel.: +49 (0)3731/39-2865
E-Mail: Melanie.Nentwich@desy.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 2027

(Tilman Leisegang, Freiberg)

Mit dem Studierendenpreis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) sollen im Jahr 2027 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 35. Jahrestagung der DGK in Dresden 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 allgemeinverständlichen Zusammenfassung des Studierenden (jeweils maximal eine A4-Seite), der entsprechenden Abschlussarbeit sowie einem Lebenslauf des Studierenden per E-Mail mit dem Betreff „Lieselotte-Templeton-Preis“ an den Vorsitzenden des Preiskomitees:

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

Einsendeschluss: **30. November 2026**

Preiskomitee für den Lieselotte-Templeton-Preis:

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

Preisordnung:

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

Bisherige Preisträger:

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



Polish Crystallographic
Association



JOINT POLISH-GERMAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING 2027

Abstract submission deadline:
1 October 2026

15–18 FEBRUARY 2027
DRESDEN (GERMANY)

www.dgk-conference.de

Mitgliedschaft und Beiträge

Homepages von DGK, DMG und DGKK

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

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

<https://dgk-home.de>

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

WWW-Redakteur:

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

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

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

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

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

WWW-Redakteur:

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

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

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

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

<https://www.dgkk.de>

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

WWW-Administratoren:

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

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 steuer-begünstigte 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 26. Februar 2026 beschlossen.

Datenschutzerklärung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie e.V. bezüglich personenbezogener Mitgliedsdaten

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 den steuerrechtlichen Bestimmungen bis zu zehn Jahre ab der schriftlichen Bestätigung des Austritts durch den Vorstand aufbewahrt.

Einräumung von Nutzungsrechten von Beiträgen und Fotos

Zwischen:

Name des Urhebers/Mitglieds (Vorname, Nachname):

Anschrift:

– nachfolgend „Urheber“ genannt –

Und:

Vereinsname: „**Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e.V.**“

– nachfolgend „DGK“ genannt –

1. Vertragsgegenstand

Der Urheber erstellt für die DGK folgende(n) Beitrag/Beiträge (Text/Fotos):

Titel/Beschreibung:

Datum der Erstellung/Einreichung: _____

2. Nutzungsrechte

Der Urheber gestattet der DGK gemäß Urhebergesetz §38 Absatz 1 die Aufnahme des genannten Beitrags in das jährlich erscheinende Mitteilungsheft der DGK und räumt der DGK ein ausschließliches Nutzungsrecht an dem/den oben genannten Beitrag/Beiträgen ein. Damit entfällt die Jahresfrist zur anderweitigen vervielfältigen, verbreiten und öffentlich zugänglich machen. Zusätzlich gestattet der Urheber, der DGK den Inhalt des/der genannten Beitrags/Beiträge, wie folgt zu nutzen:

- 2.1. in der Vereinszeitschrift „Mitteilungen“ (Print) zu veröffentlichen.
- 2.2. In der Vereinszeitschrift „Mitteilungen“ (Online) zu veröffentlichen.
- 2.3. in den Social-Media-Kanälen der DGK zu teilen, z.B. LinkedIn oder Blogartikel auf der eigenen Homepage.
- 2.4. Die Langzeitarchivierung in der Vereinszeitschrift „Mitteilungen“ (Online) im Repositorium der TIB Hannover (Leibniz-Informationszentrum, Technik und Naturwissenschaften Universitätsbibliothek) zu veröffentlichen unter Berücksichtigung der Open-Access-Lizenzen der TIB (<https://repo.uni-hannover.de/info/depositlicense>).
- 2.5. zum Zwecke der Berichterstattung zu bearbeiten (z.B. Kürzungen, Anpassung der Bildgröße), solange der Sinn des Beitrags nicht entstellt wird.

3. Gewährleistung/Rechte Dritter

Der Urheber versichert, dass er der alleinige Urheber des Beitrags ist und dieser frei von Rechten Dritter ist. Sollten Personen auf Fotos erkennbar sein, versichert der Urheber, dass deren Einwilligung zur Veröffentlichung vorliegt (gemäß DSGVO/KunstUrhG).

4. Namensnennung

Der Verein wird bei der Veröffentlichung den Urheber namentlich nennen (z.B. „Foto: Max Mustermann“), sofern dies technisch und gestalterisch möglich ist.

5. Vergütung

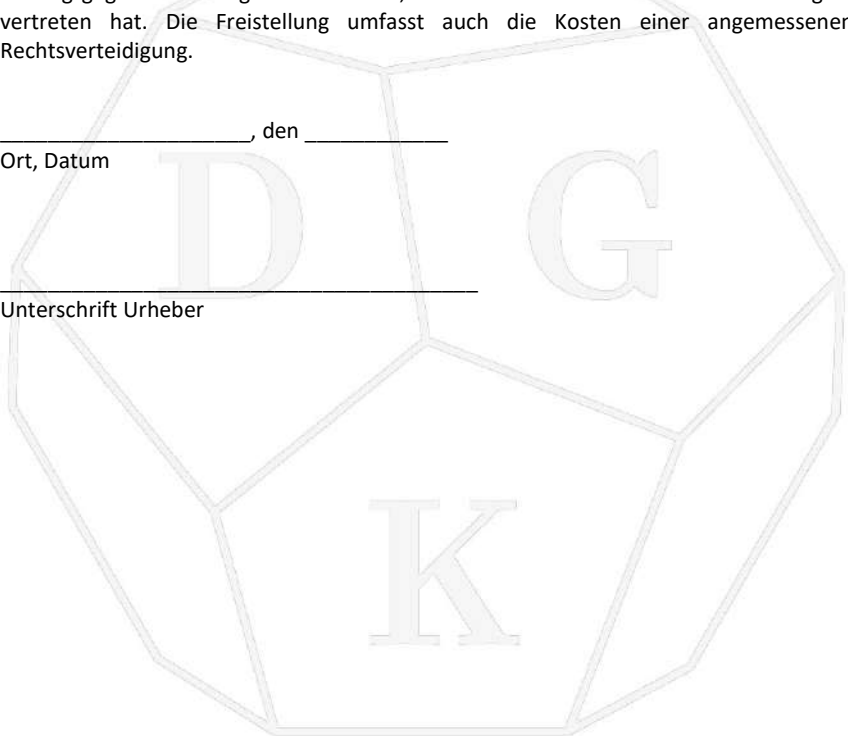
Die Einräumung der Nutzungsrechte erfolgt unentgeltlich (ehrenamtlich).

6. Freistellung

Der Urheber stellt die DGK von sämtlichen Ansprüchen frei, die Dritte aufgrund einer Verletzung ihrer Rechte (insbesondere Urheber-, Persönlichkeits- oder Datenschutzrechte) im Zusammenhang mit der Nutzung des Beitrags gemäß diesem Vertrag gegen die DGK geltend machen, sofern der Urheber die Rechtsverletzung zu vertreten hat. Die Freistellung umfasst auch die Kosten einer angemessenen Rechtsverteidigung.

_____, den _____
Ort, Datum

Unterschrift Urheber





Vorstand

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. Többsen

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

Impressum

Die Mitteilungen werden im Auftrag der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie herausgegeben. Verantwortlicher Redakteur ist Dr. Alexander Wollbrink. Die DGK Mitteilungen erscheinen zurzeit 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., Hilgenberg GmbH, Rigaku Europe SE, Malvern Panalytical GmbH, Huber Diffraktionstechnik GmbH & Co. KG.

Copyright © 2026 Deutsche Gesellschaft für Kristallographie e. V.

Die DGK ist Inhaberin der ausschließlichen Nutzungsrechte an den in diesem Heft veröffentlichten Beiträgen. Eine Nutzung über die gesetzlich zulässigen Schranken des Urheberrechts hinaus bedarf der vorherigen Zustimmung der DGK. Die Beiträge werden zusätzlich im Repositorium der TIB Hannover unter einer Creative-Commons-Lizenz zur Verfügung gestellt; die jeweilige Lizenz ist dort angegeben.

Mitteilungen // Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, **ISSN (print) 3054-4262**

Mitteilungen // Deutsche Gesellschaft für Kristallographie, **ISSN (online) 3054-4254**

Beiträge, Anregungen und Kritik können gerichtet werden an:

Dr. Alexander Wollbrink (redaktion@dgk-home.de)

Begleitende Redaktion zur Übergabe der DGK Mitteilungen:

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 und Prof. Dr. Dirk C. Meyer, dirk-carl.meyer@physik.tu-freiberg.de

Co-Autoren

Lars Redecke, Lübeck; Elisabeth Fetter, Hannover; Michael Fischer, Bremen; Ute Kolb, Mainz; Tilmann Leisegang, Freiberg; Florian Meurer, Regensburg; Hartmut Stöcker, Freiberg; Alexander Wollbrink, Duisburg-Essen; Ben Ebel, Aachen; Fernando Jardim, Regensburg; Anushka Ghosh, Berlin; Tatiana Gorelik, Jülich; Genevieve Wilbs, Jülich; Michael Fechtelkord, Bochum; Isabelle Hartleib, Tübingen; Felix Reinhard, Tübingen; Nimo Radtke, Potsdam; Florian Kleemiss, Aachen; Eteri Svanidze und Thomas Doert,

Dresden; Alexander Pöthig, München; Eiken Haussühl, Frankfurt; Claudia Weidenthaler, Mülheim an der Ruhr; Andrea Kirsch, Bochum; Juliane Kamlah, Göttingen; Christin Wiggers, Bremen; Giovanni Valenti, Angelo Galavotti, Lorenzo Galfano, Italien; Tobias Beck, Hamburg; Holger Kohlmann, Leipzig; Robert Haberkorn, Saarbrücken; Daniel Többens, Berlin; Yves A. Muller, Erlangen-Nürnberg; Thilo Stehle, Tübingen; Manfred S. Weiss, Berlin; Martin U. Piepenbring, Frankfurt am Main; Michael Göbel, Frankfurt am Main; Christian Lehmann, Mülheim an der Ruhr; Jürgen Schreuer, Bochum; Susan Schorr, Berlin; Norbert Sträter, Leipzig; Simon Grabowsky, Bern; Ella M. Schmidt, Bremen; Melanie Nentwich, Hamburg; Reinhard Neder, Erlangen.

Druck und Bindung:

DruckTeam Druckgesellschaft mbH
Callinstraße 4
30167 Hannover
Telefon: 0511 9111222
Mail: info@druckteam.de
Web: www.druckteam.de
Geschäftsführer: Gerhard Schmitz
Amtsgericht Hannover: HRB 2306
Steuernummer: 25/209/03699

