

## Arbeitskreis Chemische Kristallographie (ChemKrist) – Jahresbericht 2025

Der Arbeitskreis Chemische Kristallographie (AK ChemKrist) blickt auf ein inhaltlich dichtes und erfolgreiches Jahr 2025 zurück, das sowohl von fachlichem Austausch auf internationaler Ebene als auch von wichtigen strukturellen Weiterentwicklungen innerhalb des Arbeitskreises geprägt war.

Am 20. Februar 2025 verstarb Prof. George M. Sheldrick, eine der großen Persönlichkeiten der modernen Kristallographie. Mit der Entwicklung des SHELX Programmpakets hat er die Einkristallstrukturanalyse über Jahrzehnte entscheidend beeinflusst und Generationen von Kristallographinnen und Kristallographen weltweit geprägt. Seine Arbeiten setzten Maßstäbe in der Methodik der Strukturlösung und -verfeinerung und sind bis heute unverzichtbarer Bestandteil der kristallographischen Praxis. Der AK ChemKrist gedenkt Prof. Sheldrick als herausragendem Wissenschaftler, engagiertem Lehrer und zentralem Wegbereiter der chemischen Kristallographie.

Die 33. Jahresversammlung der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie (DGK) fand vom 10.–13. März 2025 an der Leibniz-Universität Hannover und versammelte rund 300 nationale und internationale Teilnehmende. Das Programm spiegelte die interdisziplinäre Breite der Kristallographie in Chemie, Physik, Biologie sowie Geo- und Materialwissenschaften wider. Schwerpunkte lagen auf Elektronenbeugung und Quantenkristallographie sowie auf funktionellen Materialien, untersucht mittels Paarverteilungsfunktionen (PDF) und beschleunigerbasierten Strahlungsquellen. Beiträge aus der Strukturbiochemie, der kristallographischen Lehre und breit angelegte Plenarvorträge ergänzten das Programm und die Lightning Talks der Young Crystallographers waren erneut sehr gut besucht. Neben der wissenschaftlichen Agenda fanden die DGK-Mitgliederversammlung und ein Social Evening zum fachlichen Austausch und zur Netzwerkpflge statt. Die nächste DGK-Tagung findet vom 25.–28. Februar 2026 in Lübeck statt.

Im Juli 2025 fand das 10th International Charge Density Meeting (ICDM) unter dem Motto „Data Quality Matters“ in Durham statt. Die Konferenz bot ein breites Spektrum aktueller Entwicklungen in der Beugungsmethodik und deckte Röntgen-, Neutronen- und Elektronenbeugung gleichermaßen ab. Neben der Bedeutung der Datenqualität wurde auch die immer wichtiger werdende Rolle der Elektronendiffraktion bei der Strukturaufklärung komplexer und nanoskaliger Materialien deutlich. Gleichzeitig wurde in einigen Vorträgen der Nutzen der Quantenkristallografie in Kombination mit anderen Analysemethoden wie der NMR-Spektroskopie hervorgehoben. Der Einzug dieser Methoden in die Routinekristallografie wurde durch spezielle Reisestipendien für Servicekristallographen gefördert. Einmal mehr unterstrich die ICDM damit die enge Verzahnung methodischer Innovationen mit chemischen und materialwissenschaftlichen Fragestellungen und bot eine wertvolle Plattform für den internationalen Austausch. Ein Höhepunkt der Veranstaltung war das Konferenzdinner im Durham Castle, bei dem Prof. Judith A. K. Howard dem staunenden Publikum einen spontanen Vortrag mit Anschauungsobjekten aus den Anfängen ihrer Karriere hielt.



Bildquelle: Jan Panke

Der zweite Munich Crystallography Workshop (MCW) fand Anfang August 2025 erneut am TUM Catalysis Research Center in Garching statt und knüpfte erfolgreich an das Format der ersten Veranstaltung an. Der Workshop richtete sich an fortgeschrittene Studierende, Promovierende und Postdocs und kombinierte Vorträge, praktische Übungen sowie intensive Diskussionsformate. Im Mittelpunkt standen anspruchsvolle Fragestellungen der Einkristallstrukturanalyse, darunter Strukturen mit Fehlordnung, Verzwillingung sowie moderne Verfeinerungsstrategien. Die internationale Zusammensetzung der Teilnehmenden und Referierenden ermöglichte einen intensiven fachlichen Austausch und trug maßgeblich zum Erfolg der Veranstaltung bei.



Das 35th European Crystallographic Meeting (ECM35) fand im August in Poznań statt und war in mehrfacher Hinsicht eine besondere Veranstaltung. Ursprünglich war die Konferenz in Lviv (Ukraine) geplant, musste jedoch aufgrund des anhaltenden russischen Angriffskrieges gegen die Ukraine kurzfristig nach Polen verlegt werden. Die polnischen Gastgeber ermöglichten unter schwierigen Rahmenbedingungen eine eindrucksvolle und würdige Durchführung der Konferenz und setzten zugleich ein starkes Zeichen der Solidarität mit der ukrainischen Kristallographie-Community. Das wissenschaftliche Programm wurde von einem bewusst ukrainisch geprägten Rahmenprogramm begleitet. In Ansprachen des ukrainischen Botschafters in Polen sowie des Bürgermeisters der Stadt Poznań wurde die Bedeutung internationaler wissenschaftlicher Zusammenarbeit und Unterstützung betont. Besonders eindrucksvoll war der Auftritt des Frauenchors „Lira“ der Universität Lviv, der dem Eröffnungsabend einen emotionalen und nachdenklichen Rahmen verlieh. Ein gemeinsames Konferenzdinner mit musikalischer Begleitung durch eine Jazzband rundete das vielfältige Rahmenprogramm ab und bot Raum für persönlichen Austausch. Zum zweiten Mal wurde der George Sheldrick Prize an Dr. Lauren E. Hatcher von der Universität Cardiff vergeben. Außerdem wurde dem Verstorbenen in einem eigenen Gedenksymposium gedacht, in dem Wegbegleiter:innen von ihren Erinnerungen berichteten. Auf ihrer Website hat die European Crystallographic Association einen Blogeintrag mit dem Titel „Remembering George Sheldrick“ veröffentlicht. In diesem sind neben diesen auch weitere Nachrufe als Videos zu sehen.



Für den Zeitraum vom 14. bis 17. September 2026 ist das nächste ChemKrist-Doktorandenseminar an der RWTH Aachen geplant. Die Veranstaltung richtet sich an Promovierende der chemischen Kristallographie und bietet Raum für wissenschaftliche Vorträge, Diskussionen sowie den persönlichen Austausch innerhalb der Community. Das Seminar soll erneut von einem ausgewogenen Verhältnis aus Fachvorträgen, methodischen Workshops und informellen Formaten geprägt sein. Weitere Informationen zur Anmeldung und zum Programm werden rechtzeitig bekannt gegeben.

Im Jahr 2025 wurde vom Vorstand des AK ChemKrist eine überarbeitete Satzung erarbeitet. Ziel war es, die Strukturen und Abläufe des Arbeitskreises klarer zu fassen und an aktuelle Anforderungen anzupassen. Die neue Satzung soll im Rahmen der Mitgliederversammlung am 03. Februar 2026 zur Abstimmung gestellt und beschlossen werden.