



GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

01/2019 • 60. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

nach längerer Zeit wollen wir uns wieder mit einer neuen Ausgabe von MARS an Sie wenden, und wir haben einen sehr traurigen Anlass dafür. Im April ist Erhard Haupt nur wenige Jahre nach seinem Eintritt in den Ruhestand verstorben. Der MARS wurde über viele Jahre von ihm herausgegeben und auch darüber hinaus war Erhard Haupt ein hoch geschätzter, engagierter und streitbarer Kollege. Aus diesem Anlass hat sich Dieter Leibfritz der undankbaren Aufgabe angenommen, einen Nachruf auf seinen eigenen Doktoranden zu verfassen (Seite 2).

Schon seit Beginn der 90er Jahre hat Erhard Haupt immer wieder mit Nachdruck gefordert, dass NMR-Daten digital aufbereitet und gespeichert werden müssen, um später sinnvoll nachnutzbar zu sein. Von ihm stammen grundlegende konzeptionelle Arbeiten zu NMR-Datenbanken. Leider war ihm nicht vergönnt zu erleben, wie sein Einsatz inzwischen langsam Früchte trägt: Das Konsortium NFDI4Chem (www.nfdi4chem.de) hat der DFG die Absicht erklärt, 2019 einen Antrag einzureichen. In diesem Projekt werden auch NMR-Daten eine Schlüsselrolle spielen. Wer nähere Informationen möchte oder Interesse an der Mitarbeit hat, kann sich gerne bei uns melden.

Ihnen allen noch einen angenehmen Sommer wünschen

Johannes Liermann und Nils Schlörer

Inhalt

Nachruf auf Erhard Haupt.....	2
Felix-Bloch-Vorlesungspreis für Manuel Etkorn.....	4
Ernst-Preise 2018.....	5
Termine 2019.....	6

Impressum

Herausgegeben vom Vorstand der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie in der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Varrentrappstr. 40-42, 60486 Frankfurt am Main, www.gdch.de/nmr.

Redaktion: Dr. Johannes Liermann (*jl*, Universität Mainz, liermann@uni-mainz.de), Dr. Nils Schlörer (*nes*, Universität Köln, nils.schloerer@uni-koeln.de).

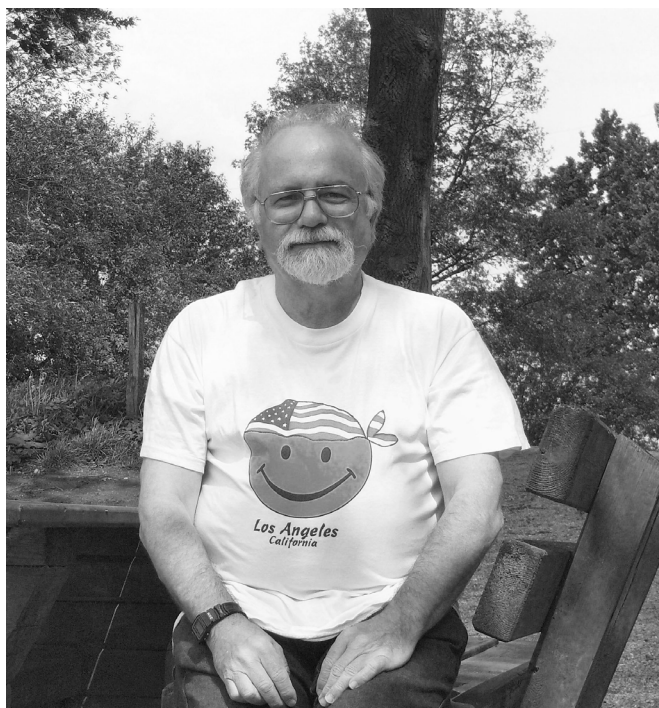
Aus der Fachgruppe

Nachruf auf Erhard Haupt

Mit großer Bestürzung haben wir die Nachricht vom Tod von Erhard Haupt vernommen. Sein Nierenleiden hat ihm nur drei Jahre im wohlverdienten Ruhestand gelassen.

Man kann ihn als Urgestein der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie bezeichnen. Als sich 1974 ein interessierter Kreis von NMR-Spektroskopikern in Frankfurt getroffen hat, um eine Fachgruppe zu gründen, war Erhard Haupt als

fortgeschrittener Student schon nachhaltig beteiligt, indem er mitgeholfen hat, wenn die hungrigen Mitglieder in der Mittagspause vom institutseigenen Grill versorgt werden mussten. Fortan haben die NMR-Spektroskopie und die junge Fachgruppe für die folgenden vier Jahrzehnte seinen beruflichen Werdegang nachhaltig geprägt. In jenen Anfangsjahren wurden in chemischen Laboren noch CW-(continuous wave) NMR-Geräte neben der noch jungen Puls-Fourier-Technik verwendet. Erhard Haupt hat an der Universität Frankfurt in seiner Diplomarbeit (1975) über aromatische Nitrile gearbeitet und in sich in seiner Dissertation der ^{13}C -NMR-spektroskopischen Strukturaufklärung von Peptidsequenzen des adrenocorticotropen Hormons (ACTH) und synthetischer Östrogone gewidmet. Nach der Promotion (1979) ist er als wissenschaftlicher Mitarbeiter seinem Doktorvater Dieter Leibfritz an die Universität Bremen gefolgt. Kurz danach hat er erst einmal die NMR-Spektroskopie aus der Sicht der forschenden Hochschule verlassen und ist auf die Seite zur



Sicht der Gerätehersteller gewechselt, als er sich der Firma Varian angeschlossen hat. Dieses Intermezzo währte jedoch nur zwei Jahre und er kehrte an die Hochschule zurück, als ihm die Leitung des anorganischen NMR-Labors der Universität Hamburg angeboten wurde. Dieser Position belieh er auch treu bis ans Ende seiner aktiven Dienstzeit 2016.

In all den Jahren hat er regelmäßig an internationalen

Konferenzen und den nationalen Fachgruppentagungen teilgenommen und sich auf dem aktuellen Stand der NMR-Methoden gehalten. Schon frühzeitig hat er die Geschicke der Fachgruppe nachhaltig mitgeprägt, in der er fortan unter dem bekannten Namens Kürzel ETKH erschienen ist. Die Fachgruppennachrichten (MARS) lebten von ihrem Hauptinitiator und dessen beharrlicher Mitarbeit. Sie war der Garant für das regelmäßige Erscheinen und des aktuellen und kurzweiligen Inhalts von MARS. Aufgrund seiner profunden IT-Kenntnisse hat er auch die Organisation der Fachgruppe auf eine fundierte und reibungsarme Basis gebracht.

Von 2009–2012 war ETKH schließlich Vorsitzender der Fachgruppe und darüber hinaus der gewählte Sprecher aller Fachgruppen in der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh). In dieser Eigenschaft war er auch qua Amtes Mitglied des GDCh-Vorstands. Erhard Haupt war der ideale „Kümmerer“, der die anfallenden Aufgaben, auch die die lästig und zeitaufwendig waren, verlässlich

und bestens gelöst hat. Seine gute EDV-Erfahrung sorgten für den effizienten Ablauf der Fachgruppentagung und eine wirkungsvolle Außendarstellung der Fachgruppe. Der Internet-Auftritt der Fachgruppe war stets up to date. Es wird nicht einfach sein, diesen Standard in der Zukunft zu halten.

Wissenschaftlich hat sich ETKH in all den Jahren zwischen organischen und anorganischen Themengebieten bewegt, wo immer seine spektroskopische Expertise gefragt war. Aufbauend auf seinen soliden Kenntnissen der ein- und zweidimensionalen homo- und heteronuklearen NMR-Spektroskopie war er der ideale Partner seiner Kollegen von der chemischen Synthese, deren Syntheseprodukte aufgeklärt und abgesichert werden mussten. Es überrascht daher nicht, dass die Einsatzgebiete von organischen Naturstoffen und Syntheseprodukten bis zu anorganischen Metallkomplexen reichten, inklusive anorganische und organische Festkörper-NMR-Spektroskopie. Seine Publikationen umfassen neben den klassischen Isotopen ^1H , ^{13}C , ^{14}N , ^{15}N , ^{19}F und ^{31}P auch Arbeiten zu exotischeren Kernen wie ^6Li , ^7Li , ^{23}Na , ^{111}Cd , ^{113}Cd und ^{139}La .

Bemerkenswert ist auch seine Beteiligung an Kryptanden-ähnlichen Molybdat-Komplexen mit katalytischen und membrankanalartigen Eigenschaften. Vorbildlich war auch seine aufgeschlossene Zusammenarbeit mit verschiedenen osteuropäischen Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Ländern bei der Nutzung seiner NMR-Expertise zur Strukturanalyse anorganischer Komplexverbindungen.

Diese Aufgeschlossenheit und das großzügige Engagement beschränkte sich nicht auf wissenschaftliche Kooperationen, sondern galt gleichermaßen seinem Einsatz in vielen sozialen Projekten in seiner familiären und beruflichen Umgebung - seine sozialkritischen Ansichten fanden nicht immer Gegenliebe.

Wir haben einen umsichtigen, verlässlichen Freund und wissenschaftlichen Partner verloren, an den wir uns immer gerne und dankbar erinnern werden.

Dieter Leibfritz



Aus der Fachgruppe

Felix-Bloch-Vorlesungspreis für Manuel Etzkorn

Am 10. September 2018 hat die Fachgruppe den Felix-Bloch-Vorlesungspreis an Manuel Etzkorn (Uni Düsseldorf / FZ Jülich) vergeben. Wir geben an dieser Stelle die Laudatio von Henrike Heise wieder.

It is a great pleasure to award the fourth Bloch lecture to Dr. Manuel Etzkorn, Emmy-Noether group leader at Heinrich Heine Universität Düsseldorf. Dr. Manuel Etzkorn is a Biophysicist, the central themes of his research are Membrane Proteins – and their investigation with NMR spectroscopy in all kinds of variations.

Manuel Etzkorn studied physics at the Georg-August Universität in Göttingen. During his studies, he spent a semester abroad at the University of La Laguna in Tenerife/Spain with an Erasmus fellowship. For his Diploma and PhD thesis he chose the NMR-department of the Max-Planck-Institute of Biophysical Chemistry, headed by Christian Griesinger, where he joined the solid-state NMR group of Marc Baldus. During this time, he investigated large integral membrane proteins like Rhodopsin and the histidine kinase DcuS in lipid bilayers with magic-angle spinning solid-state NMR-spectroscopy.

After obtaining his PhD he decided to extend his repertoire and joined the group of Gerhard Wagner at MIT/Harvard University in Boston. During his postdoc he still worked with integral membrane proteins, but this time reconstituted in small nanodiscs or membrane-mimetics like amphipols. This way he got familiar with high-end solution NMR-spectroscopy and also with protein biochemistry.

In 2012 he returned to Germany and established an Emmy-Noether research group at



Manuel Etzkorn

the Heinrich-Heine University Düsseldorf. He is still interested in membrane proteins and NMR-spectroscopy, which his group now applies to its full range. Together with his research group, Manuel Etzkorn has since made some important contributions to the field:

Measurement time is always precious, and sometimes you have the wish to record not only one, but two spectra at one time. Does that sound utopic? Actually, with UTOPIA-NMR, a suite of parallel acquisition pulse sequences which apply direct excitation of ^{13}C while running a proton-polarized spectrum it is possible to do that.

Sample purification can be tedious, work intense and lead to large losses. Furthermore, by protein purification the protein will be separated from its natural environment. Thus, it would be perfect to just detect the NMR signals of the desired substance within a cell lysate without the need to care for selective isotope labeling beforehand or about purification afterwards. The solution: Selective polarization enhancement by localized DNP: If the polarizing agent, for example a biradical, is covalently attached to a ligand which binds selectively to the protein of interest, this protein can selectively be hyperpolarized while the signals of the background are not enhanced.

Recently, he has also quantified the mechanism of membrane binding of the disordered protein α -synuclein using nanodiscs as a membrane mimetic with defined surface area, and very recently, he started to turn his attention also to enzymes purely made of DNA.

Aus der Fachgruppe Ernst-Preise 2018

Wie jedes Jahr hat die Fachgruppe auch 2018 im Rahmen der FGMR-Tagung in Leipzig drei Nachwuchswissenschaftler für eine Publikation mit dem Ernst-Preis ausgezeichnet. Dem Fachgruppenvorstand lagen acht Nominierungen vor, deren hohe Qualität die Entscheidung auch in diesem Jahr nicht leicht gemacht hat. Auf der

Grundlage externer Gutachten von international renommierten Experten konnten jedoch drei preiswürdige Arbeiten ausgewählt werden. Als Besonderheit wurde dieses Jahr erstmals ein Preis an zwei gleichberechtigte Erstautoren geteilt vergeben. Wir gratulieren sehr herzlich!

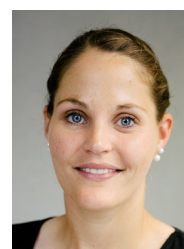
jl



Die ATP-binding-cassette- oder ABC-Transporterproteine spielen eine wichtige Rolle im Substrattransport durch biologische Membranen. Viele ABC Exporter besitzen asymmetrische Nucleotidbindungsdomänen, deren funktionelle Rolle bislang nicht gut mechanistisch charakterisiert und verstanden werden konnte. In ihrer Arbeit *Conformational Coupling and trans-Inhibition in the Human Antigen Transporter Ortholog TmrAB Resolved with Dipolar EPR Spectroscopy* unter der Betreuung von Thomas Prisner gelingt **Katja Barth** (Universität Frankfurt) diesbezüglich ein Durchbruch. Mit Hilfe von PELDOR/DEER Messungen gelangt sie zu neuen mechanistischen Erkenntnissen über den Transportzyklus und die Trans-Inhibition, so dass diese Arbeit einen wichtigen Beitrag zum Verständnis einer wichtigen Transporterproteinklasse darstellt.

Conformational Coupling and trans-Inhibition in the Human Antigen Transporter Ortholog TmrAB Resolved with Dipolar EPR Spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 4527–4533, DOI: [10.1021/jacs.7b12409](https://doi.org/10.1021/jacs.7b12409)

Obwohl die Messung dipolarer Restkopplungen (RDC) bereits zahlreiche wichtige Beiträge zur stereochemischen Charakterisierung von Molekülen geleistet hat, bleibt die Enantiodiskriminierung mit chiralen Alignment-Medien eine Herausforderung. **Mira Schwab** (TU Darmstadt) hat nun in ihrer Arbeit *Polyaspartates as Thermoresponsive Enantiodifferentiating Helically Chiral Alignment Media for Anisotropic NMR Spectroscopy* unter der Betreuung von Christina Thiele demonstriert, dass beide enantiomere Polypeptide von β -Phenethylaspartat hervorragende enantiodifferenzierende Alignment Medien darstellen. Hinzu kommt, daß diese Medien eine niedrige Helixinversionstemperatur haben, so dass ein Molekül in einer einzigen Probe lediglich durch Änderung der Temperatur in verschiedenen Helixkonformationen analysiert werden kann.



Polyaspartates as Thermoresponsive Enantiodifferentiating Helically Chiral Alignment Media for Anisotropic NMR Spectroscopy, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 14576–14584, DOI: [10.1002/chem.201702884](https://doi.org/10.1002/chem.201702884)



Den dritten Ernst-Preis im 2018 erhielten **Andreas Seegerer und Philipp Nitschke** für ihre gemeinsame Publikation *Combined In Situ Illumination-NMR-UV/Vis Spectroscopy: A New Mechanistic Tool in Photochemistry* unter der Betreuung von Ruth Gschwind. Während Photochemie im NMR-Röhrchen durch die in-situ-Bestrahlung mit Glasfaser-Lichtleitern schon länger genutzt wird, kombinieren die Autoren den Ansatz mit einem UV/Vis-Spektrometer, das ebenfalls über Lichtleiter eine in-situ-Messung im NMR-Röhrchen erlaubt. Am Beispiel von photochemischen Reaktionen und Photoswitches demonstrieren sie auch, welche neuen Daten durch diese

Technik zugänglich sind.

Combined In Situ Illumination-NMR-UV/Vis Spectroscopy: A New Mechanistic Tool in Photochemistry, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 7493–7497, DOI: [10.1002/anie.201801250](https://doi.org/10.1002/anie.201801250)



Vorschau

Termine 2019

Tagungen

■ EUROISMAR 2019

(41. Fachgruppentagung)

25. bis 30. August 2019

Berlin

Latest scientific breakthroughs in magnetic resonance in broad range of scientific fields, ranging from physics and chemistry to biology and medicine.

<https://www.euroismar2019.org/>

■ 20th Small Molecule NMR Conference (SMASH) 2019

22. bis 25. September 2019

Porto (Portugal)

Vorträge zu Entwicklungen aus unterschiedlichen Bereichen der Kleinmolekül-NMR.

<http://www.smashnmr.org/>

Fortbildung

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

Prof. Dr. Reinhard Meusinger

23. bis 26. September 2019

Frankfurt am Main

Fortgeschrittenenkurs: Strukturaufklärung, 2D-NMR, Datenbanken, Gemischanalytik.

<http://www.gdch.de/fortbildung>

■ GDCh-Kurs Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter

Dr. Johannes Liermann

24. bis 26. September 2019

Mainz

Grundlegendes Verständnis der Funktion moderner NMR-Spektrometer, Durchführung gängiger NMR-Experimente, typische Fehler und Probleme.

<http://www.gdch.de/fortbildung>

■ Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie

Prof. Dr. Jörg Matysik

8 Kurse im Studienjahr 2019/20 ab Oktober 2019

Leipzig

Zusatzqualifikation zum Fachchemiker (Fachingenieur) für Analytik und Spektroskopie. Das Aufbaustudium ist für Teilnehmer mit Hoch- oder Fachhochschulabschluss in Chemie konzipiert, Absolventen einer anderen naturwissenschaftlich-technischen Fachrichtung können jedoch ebenfalls teilnehmen.

<http://analytik.chemie.uni-leipzig.de/aufbau-studium>