



01/2015 • 51. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

wir freuen uns sehr, Ihnen hiermit die neue Ausgabe von MARS mit Neuigkeiten aus der Fachgruppe präsentieren zu können. Sicher erinnern Sie sich, dass unser geschätzter Kollege Erhard Haupt von der Universität Hamburg in der letzten Ausgabe angekündigt hat, sich nach vielen verdienstvollen Jahren von der Redaktion dieses Rundschreibens zurückzuziehen.

Unsere Fachgruppenvorsitzende Christina Thiele hat beherzt nach Nachfolgern gesucht und letztlich uns gefunden. Wir sind beide Leiter von NMR-Service-Einrichtungen in der Organischen Chemie in am Rhein gelegenen Universitätsstädten und arbeiten auch an anderen Projekten schon länger zusammen.

Wir haben das Layout behutsam aktualisiert, inhaltlich werden wir aber die bewährten Bestandteile beibehalten. Derzeit ist ein fester Rhythmus mit jährlich drei Ausgaben im März, Juli und November geplant. Natürlich freuen wir uns sehr über Gastbeiträge, Vorschläge und sonstige Rückmeldungen.

Das Vertrauen, das uns der Fachgruppenvorstand mit dieser Aufgabe entgegenbringt, ehrt uns und wir hoffen, dass wir die großen Fußstapfen, die Erhard Haupt hinterlässt, angemessen ausfüllen können.

In diesem Sinne auf eine gute gemeinsame Zeit,

Johannes Liermann Nils Schlörer

Inhalt

Preisausschreibungen der Fachgruppe 2
Ernst-Preisträger 2014
SpinDrops: NMR zum Anfassen 4
Tagungen 2015
Fortbildungen und Schulen 2015 7
CSEARCH Robot Referee
Ein neuer NMR-Anbieter? 8



Die neue MARS-Redaktion: Johannes Liermann (Universität Mainz), Nils Schlörer (Universität Köln) Foto: Matthias Jank

Aus der Fachgruppe

Preisausschreibungen der Fachgruppe

Felix-Bloch-Vorlesung 2015

Die GDCh-Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie schreibt die Verleihung der Felix-Bloch-Vorlesung aus.

Der Preis wird an Persönlichkeiten verliehen, die sich besondere Verdienste auf dem Gebiet der Magnetischen Resonanzspektroskopie erworben haben. Der Preis soll an Persönlichkeiten, vorzugsweise Nachwuchswissenschaftler verliehen werden, die in den fünf Jahren vor der Kandidatur wissenschaftlich herausragende Leistungen vorweisen können.

Mit der Auszeichnung verbunden sind eine Verleihungsurkunde sowie ein von der Fachgruppe gestiftetes Preisgeld in der Höhe von 1000,- €.

Vorschläge für zu Ehrende können aus allen Teildisziplinen der Magnetischen Resonanzspektroskopie erfolgen. Über die Zuerkennung der Auszeichnung entscheidet eine aus drei Mitgliedern bestehende Auswahlkommission mit einfacher Stimmenmehrheit, die vom Vorstand der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie berufen wird.

Der Geehrte hält in der Regel vier Vorträge. Der erste dieser Vorträge folgt im Anschluss an die Verleihung im Rahmen der Jahrestagung der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie, welche vom 7.-10. September 2015 in Darmstadt stattfindet.

Kandidatenvorschläge mit einer schriftlichen Würdigung, einem Lebenslauf und einer Publikationsliste können bis **spätestens 31. Mai 2015** eingereicht werden an:

GDCh-Geschäftsstelle

Dr. Susanne Kühner Varrentrappstr. 40-42 60486 Frankfurt am Main s.kuehner@gdch.de

Ernst-Preis 2015

Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker zeichnet mit dem Ernst-Preis wissenschaftliche Arbeiten von jungen Wissenschaftlern/innen aus, die das methodische Spektrum der magnetischen Resonanz, ihr theoretisches Verständnis, oder ihre Anwendung bereichern.

Die vorgeschlagene Publikation muss zwischen dem I. Juni 2014 und dem I. Juni 2015 publiziert oder vom Journal akzeptiert worden sein. Der Kandidat/die Kandidatin darf zum Zeitpunkt der Einreichung der Arbeit die Dissertation noch nicht abgeschlossen haben. Über die Auswahl entscheidet ein Gutachter-Gremium.

Die Preisverleihung erfolgt im Rahmen der Fachgruppentagung vom 7. bis 10. September 2015 in Darmstadt. Der Förderpreis ist verbunden mit einer Verleihungsurkunde und einem Preisgeld von 500,- €.

Anträge können formlos mit der wissenschaftlichen Arbeit und einer Begründung der Betreuerin/des Betreuers für den Kandidatenvorschlag, aus dem die Rolle der Kandidatin/des Kandidaten in der Planung, Durchführung und Interpretation der Arbeit hervorgeht, elektronisch bis zum 1. Juni 2015 eingereicht werden an:

Dr. Wolfgang Jahnke

wolfgang.jahnke@novartis.com https://www.gdch.de/index.php?id=93



Aus der Fachgruppe

Ernst-Preisträger 2014

Wie in jedem Jahr stand die Verleihung der Ernst-Preise am Beginn der diesjährigen Fachgruppentagung. Die Ernst-Preise sind die Nachwuchspreise der Fachgruppe für Doktoranden und Frisch-Promovierte. Genau eine wissenschaftliche Publikation wird ausgezeichnet, die vor der Promotion der Preisträger eingereicht worden sein muss. Jedes Jahr werden bis zu drei Ernst-Preise vergeben. Alle gültigen Vorschläge

wurden von einer Auswahlkommission evaluiert. Den Mitgliedern dieser Kommission sei an dieser Stelle nochmals herzlich gedankt für ihre Arbeit in der Ferienzeit.

Wir gratulieren den Preisträgern sehr herzlich, verbunden mit den besten Wünschen für ihre weitere wissenschaftliche Zukunft.

Wolfgang Jahnke (Novartis)



Nanette N. Jarenwattananon erhielt den Ernst-Preis für ihre Arbeit "Thermal maps of gases in heterogeneous reactions". Nanette Jarenwattananon promoviert in der Arbeitsgruppe von Prof. Louis Bouchard an der University of California in Los Angeles. Sie hat eine Methode entwickelt, um mit Hilfe der NMR-Spektroskopie die Temperaturverteilung der beteiligten Stoffe in einer heterogenen Katalyse zu messen. Dies kann für die Optimierung der Reaktionsbedingungen nützlich sein. Ihre Methode beruht auf der Anwendung schwacher Gradienten während der Akquisitionszeit, wodurch eine stärkere Abhängigkeit der Linienbreite von der Temperatur und damit präzisere Messergebnisse erzielt werden.

Thermal maps of gases in heterogeneous reactions.

Nature **2013**, *50*2, 537-540. DOI: 10.1038/nature12568



David Schulze-Sünninghausen promoviert in der Arbeitsgruppe von Prof. Burkhard Luy am Karlsruher Institut für Technologie. Seine Arbeit "Rapid heteronuclear single quantum correlation NMR spectra at natural abundance" wurde vom Ernst-Preis-Kommittee ausgezeichnet. Die Arbeit beschreibt das ASAP-HSQC Experiment, das die Empfindlichkeit heteronuklearer Korrelationsspektren mit nicht-isotopenmarkierten Molekülen steigert, und gleichzeitig eine hohe Auflösung in der indirekten Dimension erlaubt.

Rapid Heteronuclear Single Quantum Correlation NMR Spectra at Natural Abundance. J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 1242-1245.

DOI: 10.1021/ja411588d



Jedes Protein-NMR-Experiment ist nur so gut wie das dafür verwendete Protein. Der dritte Ernst-Preis ging daher an **Moritz Schmidt** für eine verbesserte Methode zur Herstellung von spin-markierten Proteinen ("A genetically encoded spin label for electron paramagnetic resonance distance measurements"). Spin-markierte Proteine wurden in der Vergangenheit meist durch chemische Reaktion von Cystein-Mutanten mit reaktiven Gruppen hergestellt. Mit der neuen Methode ist eine solche separate chemische Kupplung nicht mehr notwendig. Diese Methode könnte für die Anwendung in der Elektronenspinresonanz von Bedeutung sein. Moritz Schmidt arbeitet zur Zeit an seiner Promotion in der Arbeitsgruppe von Prof. Daniel Summerer an der Universität Konstanz.

A Genetically Encoded Spin Label for Electron Paramagnetic Resonance Distance Measurements

J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 1238-1241.

DOI: 10.1021/ja411535q



Software für Lehre und Forschung

SpinDrops: NMR zum Anfassen

SpinDrops bietet einen neuartigen Zugang zum Verständnis von NMR-Experimenten und der ihnen zugrunde liegenden Spin-Dynamik. Die im App-Store (itunes.apple.com) kostenlos zur Verfügung stehende App erlaubt sowohl eine systematische als auch eine spielerische Herangehensweise, um grundlegende Konzepte der modernen NMR-Spektroskopie zu erlernen und zu vertiefen. Die einfache graphische Interaktion mit der App und das unmittelbare Feedback auf Änderungen experimenteller Parameter ermöglichen es, sowohl ein analytisches Verständnis als auch eine fundierte Intuition zur Wirkungsweise und zum Design von Puls-Sequenzen zu entwickeln.

SpinDrops kann komplexe NMR-Experimente mit bis zu drei gekoppelten Spins in Echtzeit simulieren und visualisieren. Die App nutzt die sogenannte **DROPS**-Darstellung (discrete representation of spin operators, Garon et al., 2014), mit der beliebige Zustände eines Spinsystems intuitiv und kompakt abgebildet werden können. Sie ist mit der bekannten Darstellung von Atomorbitalen verwandt und bildet eine natürliche, eindeutige Abbildung von Spin-Zuständen auf sogenannte "Dropletts". Diese Dropletts sind dreidimensionale Darstellungen von Kugelflächenfunktionen mit charakteristischen Formen und Farben. Die einzelnen Dropletts tragen alle Informationen

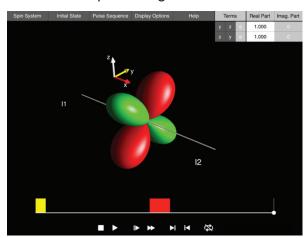


Abb. I: Beispiel eines screenshots der SpinDrops-App.

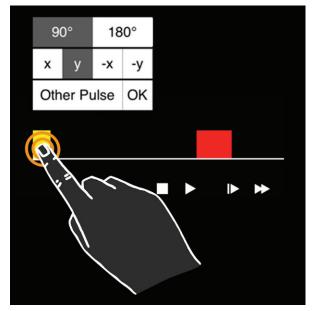


Abb. 2: Durch Antippen eines Pulses erscheint ein Eingabefenster, mit dessen Hilfe der Flipwinkel und die Phase des Pulses einfach geändert werden kann.

über die Produktoperatoren von bestimmten Spins oder Spingruppen. Beispielsweise entspricht das I_1 -Droplett der orientierungsabhängigen Projektion des I_1 -Magnetisierungsvektors auf alle möglichen Raumrichtungen. Das I_1I_2 -Droplett enthält die Informationen über alle Zwei-Spin-Produktoperatoren, die auf den ersten und zweiten Spin wirken $(2I_{1x}I_{2x}, 2I_{1y}I_{2x}, ..., 2I_{1z}I_{2z})$ etc. Die vorteilhaften Eigenschaften der Dropletts werden im integrierten Tutorial der App erläutert und für unterschiedliche Anwendungs-Beispiele illustriert. Optional können zusätzlich zu den Dropletts auch die entsprechenden Produktoperatoren und ihre Vorfaktoren als Liste angezeigt werden.

Das integrierte Tutorial liefert Hinweise zur einfachen Definition eines beliebigen Anfangszustands, zur graphisch unterstützten Erstellung einer neuen Pulssequenz und zur multi-touchbasierten Steuerung der Simulationen und ihrer Darstellungen. Anwendungs-Beispiele wie Spin-Echos, INEPT, DEPT, selektives isotropes



MARS 01/2015

Mischen, Anregung von Multiquanten-Kohärenz etc. werden diskutiert und eine Reihe von "Challenges" (mit Lösungen) regt zum weiterem Experimentieren an.

Die folgenden Abbildungen vermitteln einen Eindruck von SpinDrops. Abb. I zeigt den Spin-Drops-Bildschirm mit den Menus zur Definition des Spinsystems, des Anfangszustands, der Pulssequenz und der Darstellungsoptionen. Im Help-Menu finden sich Tutorials, Beispiele, Challenges und weiterführende Informationen zum mathematischen Hintergrund der DROPS-Darstellung. Unterhalb der graphisch dargestellten Pulssequenz sind die Symbole für die Steuerung der Simulation erkennbar und

rechts oben die in Kurzform dargestellte Liste der aktuell als Droplett dargestelten Produkt-Operatoren. Abb. 2 illustriert, wie durch einfaches Antippen eines Pulses dessen Flipwinkel und Phase geändert werden kann. Abb. 3 zeigt Momentauf-

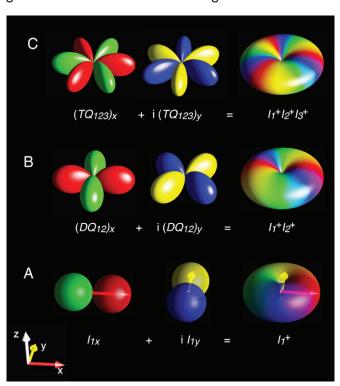


Abb. 4: Charakteristische Dropletts von (A) Einquanten-Kohärenzen, (B) Doppelquanten-Kohärenzen, (C) Tripelquanten-Kohärenz.

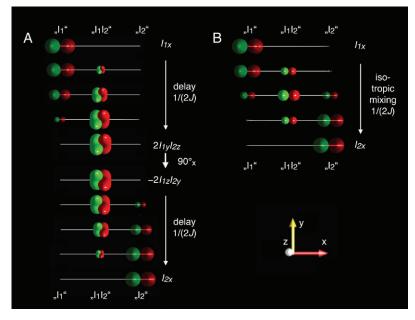


Abb. 3: Momentaufnahmen des Transfers von x-Magnetisierung zwischen zwei gekoppelten Spins I_1 und I_2 in der DROPS-Darstellung (A) für eine Δ -90°- Δ Sequenz und (B) für den doppelt so schnellen Transfer unter einer isotropen Mischsequenz (TOCSY-Experiment).

nahmen des Magnetisierungs-Transfers zwischen zwei gekoppelten Spins für zwei verschiedene experimentelle Grundbausteine, die in vielen NMR-Experimenten genutzt werden. In Abb. 4 sind die charakteristischen Formen von Operatoren mit bestimmten Kohärenzordnungen dargestellt.

Neben der eigenständige Nutzung der App, ist *SpinDrops* auch hervorragend in der Lehre einsetzbar, um in Echtzeit berechnete Animationen zu zeigen. Mögliche Anwendungen reichen von der Demonstration der einfachen Präzession von Spins (Bloch-Gleichungen) bis zur komplexen Dynamik von gekoppelten homonuklearen oder heteronuklearen Spin-Systemen, z.B. in Triple-Resonanz-Experimenten.

Steffen Glaser (TU München)

Referenzen:

N. J. Glaser, S. J. Glaser: Spin Drops (2014, Version 1.1.1). http://itunes.apple.com/de/app/spindrops/id891357240?mt=8

A. Garon, R. Zeier, S. J. Glaser: Visualizing operators of coupled spin systems. Phys. Rev. A, im Druck, arXiv 2014, http://arxiv.org/abs/1409.5417

A. Garon: On a new visualization tool for quantum systems and on a time-optimal control problem for quantum gates, Dissertation TU München (2014). http://mediatum.ub.tum.de/doc/1192392/1192392.pdf

Website mit Tutorials und Galerien: http://www.glasersystems.de/de/spindrop



MARS 01/2015

Termine

Tagungen 2015

■ 56th Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (ENC)

19.-24. April 2015 Pacific Grove, USA

The richness and the intellectual depth of the field are represented by the staggering range of magnetic resonance methods and applications in science, technology, and medicine. The ENC includes hundreds of oral and poster presentations that showcase the hottest topics and highlight the intellectual diversity of NMR. The program features talks, tutorial lectures, hundreds of posters, and an after-dinner lecture.

Link: http://www.enc-conference.org/

■ Gordon Research Conference

Exploring the Frontiers of NMR, Computations and Complementary Biophysical Methods (Computational Aspects, Biomolecular NMR)

7.-12. Juni 2015 Lucca, Italien

Sessions devoted to advances in integrative structural biology, complementary biophysical techniques, frontiers in solid state NMR, signal processing, intrinsically disordered systems and interactions, ligand interactions and metabolomics, conformational variability and challenges in structure determination. The importance of NMR for industry will be highlighted in a dedicated session

Link: http://www.grc.org/programs.aspx?id=14571

■ EUROMAR

5.-10. Juli 2015 Prag, Tschechien

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

Link: http://www.euromar2015.org

37. Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie

Binationale Tagung in Kooperation mit der UK NMR Discussion Group

7.-10. September 2015 Darmstadt

Link: http://www.fgmr2015.de/

■ XeMAT

Xenon/Hyperpolarized Noble Gases in Magnetic Resonance

13.-17. September 2015 Dresden

The conference will cover all aspects of the use of xenon and hyperpolarized gases in magnetic resonance. This includes for example materials science, biosensing, imaging, and molecular bioimaging as well as all aspects of gas hyperpolarization.

Link: http://www.chm.tu-dresden.de/ancl/xemat.shtml

■ Small Molecule NMR Conference (SMASH)

20.-23. September 2015 Braveno, Italien

Vorträge zu Entwicklungen aus unterschiedlichen Bereichen der Kleinmolekül-NMR, zusätzlich Workshops.

Link: http://www.smashnmr.org/

Information zur Fachgruppentagung 2016

Bislang steht noch kein Ort für die Fachgruppentagung 2016 fest. Initiativbewerbungen in dieser Sache werden vom Fachgruppenvorstand ausdrücklich begrüßt. Wenn Sie sich vorstellen können, die Fachgruppentagung 2016 an Ihrer Universität oder Einrichtung zu organisieren, wenden Sie sich bitte direkt an die Vorsitzende der Fachgruppe:

Prof. Dr. Christina Thiele cthiele@thielelab.de



Termine

Fortbildungen und Schulen 2015

■ GDCh-Kurs Prozess-Spektroskopie

Dr. Michael Maiwald

10.-12. März 2015 Berlin

Einführung in die spektroskopischen Methoden der Prozessanalytik (UV/VIS-, Fluoreszenz-, Schwingungs- und NMR-Spektroskopie, Terahertz- und Massenspektrometrie, Röntgenfluoreszenz).

Link: https://www.gdch.de/veranstaltungen/fortbildung/fortbildung/event/39515.html

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung

PD Dr. Reinhard Meusinger

7.-10. April 2015 Frankfurt am Main

Grundlagenkurs: Spektreninterpretation, Struktur-Spektren-Beziehungen, Übungen.

Link: https://www.gdch.de/veranstaltungen/fortbildung/fortbildung/event/50515.html

GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

PD Dr. Reinhard Meusinger

28. September-I. Oktober 2015 Frankfurt am Main

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

Link: https://www.gdch.de/veranstaltungen/fortbildung/fortbildung/event/50615.html

■ Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie

Prof. Dr. Jörg Matysik

8 Kurse im Studienjahr 2015/16
1. Kurs 05.-09. Oktober 2015, 2. Kurs 08.12. Febuar 2016, 3. Kurs 14.-18. März 2016, 4. Kurs 11.-15. Juli 2016, Termine für 5.-8. Kurs werden noch bekannt gegeben Universität 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.

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

■ Gordon Research Seminar

Molecular Simulation for the Interpretation of NMR Data (Computational Aspects, Biomolecular NMR)

6.-7. Juni 2015 Lucca, Italien

This meeting will discuss the balance between experimental and computational modeling in general, with a particular focus on chemical shifts, intrinsically disordered proteins, and ensemble representations, Vorveranstaltung zur Gordon Research Conference (s. Seite 6).

Link: http://www.grc.org/programs.aspx?id=15573

■ EU-COST Summer School on Nuclear Spin Hyperpolarization Techniques

21.-26. Juni 2015 Hampshire, UK

The main purpose of the school is to train the young generation of scientists working in the field of magnetic resonance in novel methodologies for nuclear spin hyperpolarisation.

Link: http://www.ocs.soton.ac.uk/index.php/cost/cost2015UK/

■ EMBO Practical Course

Structure, dynamics and function of biomacromolecules by NMR

31. Juli-7. August 2015 Bayerisches NMR Zentrum TU München, Garching

Practical training course on structure, dynamics and function of biomacromolecules by solution NMR.

Link und Bewerbung: http://www.bnmrz.org/embo2015

■ 7th Summer School of the European Federation of EPR groups on Advanced EPR

24.-31. August 2015 Berlin

Lectures and tutorials provide close coupling between theoretical background and experimental techniques. Methodological aspects are closely linked to different fields of application ranging from biophysics to material sciences.

Link: http://www.helmholtz-berlin.de/events/efepr/index_de.html



MARS 01/2015

Datenqualität

CSEARCH Robot Referee

Aufgrund der positiven Bewertung einiger Vorschläge zur Verbesserung der Qualität publizierter NMR-Daten bei der Mitgliederversammlung der Fachgruppe in Berlin am 30. September 2014 erfolgt hier eine kurze Zusammenfassung:

- Der CSEARCH Robot Referee steht unter http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/cl3robot/robot. php zur Verfügung. Eine Registrierung per E-Mail an wolfgang.robien@univie.ac.at vor der ersten Verwendung ist notwendig.
- Als alternative Eingabemöglichkeit steht http:// www.nmrshiftdb.org zur Verfügung.
- Der Robot-Referee wurde optional in den Publikationsprozess beim European Journal of Organic Chemistry integriert. Details finden Sie unter: http://dx.doi.org/10.1002/ejoc.201403496

Ein detaillierter Bericht über die vorhandenen Möglichkeiten wird im nächsten MARS publiziert.

Wolfgang Robien (Universität Wien)

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 (Universität Mainz, *liermann@uni-mainz.de*), Dr. Nils Schlörer (Universität Köln, *nils.* schloerer@uni-koeln.de).

Die nächste Ausgabe 02/2015 erscheint am 29. Juni 2015 (Redaktionsschluss 12. Juni 2015).

Zu allerletzt

Ein neuer NMR-Anbieter?

ürzlich erreichte uns die Nachricht, dass ein bekanntes, im Bereich der chemischen Analytik freilich bislang weniger in Erscheinung getretenes Unternehmen die Markteinführung eines neuen NMR-Spektrometers in Erwägung zieht.

Diese Nachricht ist sehr erfreulich, ist doch mit der Schließung der NMR-Sparte durch Agilent (vormals Varian) ein wichtiger Mitbewerber auf dem NMR-Markt weggefallen und die Gefahr einer weitreichenden Monopolisierung gegeben.

Die Vorteile dieses neuen NMR-Spektrometers (Abbildung unten) liegen klar auf der Hand: Leichte Bauweise, kein Verbrauch an Strom, Druckluft und kryogenen Gasen, keine störenden Streufelder, ein voraussichtlich geringer Anschaffungspreis und ein unkompliziertes Site Planning (passt auf jeden Schreibtisch). Weiterhin gefällt der im Lieferumfang enthaltene zweite Probenkopf.

Damit dieses schöne Gerät allerdings Wirklichkeit werden kann, müssen 10.000 Unterstützer gefunden werden. Unter folgendem Link können Sie einen Account einrichten und Ihre Stimme abgeben:

https://ideas.lego.com/projects/91495

Die Redaktion befürwortet dieses Projekt und hat schon geschlossen votiert.

jl



