



01/2017 • 57. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

ein Nutzer klopft an und berichtet nervös, das Routinegerät liefere nicht und ob man mal nachsehen könne – diese Situation ist denjenigen, die in NMR-Serviceabteilungen arbeiten, ebenso gut bekannt wie das anschließende Bangen, ob nur jemand die Software zum Absturz gebracht hat oder ein abgebrochenes NMR-Röhrchen im Magneten zu finden sein wird. Die NMR-Spektroskopie ist heute in vielen Bereichen eine etablierte Methode. Tag für Tag gehen unzählige Proben durch die Instrumente in unseren Labors und man erwartet von diesen scheinbar völlig durchorganisierten Abläufen bisweilen mehr Frust als Begeisterung. Gerade in der Routine liegen aber nicht nur viele Möglichkeiten zur interdisziplinären Zusammenarbeit, sondern auch viel Verantwortung für die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses. Dem neu gewählten Vorstand der Fachgruppe ist es daher ein Anliegen, die Sichtbarkeit der NMR innerhalb der GDCh und damit in der ganzen Chemie zu stärken. Auf Initiative der IG Kleine Moleküle sollen darüber hinaus für die im Servicebetrieb arbeitenden Kolleginnen und Kollegen Tutorials in bestehende Tagungen integriert werden. Wir alle wissen, dass auch heute noch viel ungenutztes Potential in der Magnetresonanz liegt – helfen Sie mit, dies anderen Disziplinen und Studentinnen und Studenten zu kommunizieren!

Nils Schlörer und Johannes Liermann

Inhalt

Preisausschreibungen der Fachgruppe	2
Ernst-Preisträger 2016.	3
Neuer Vorstand gewählt.	4
Termine 2017.	4
Zum 70. Geburtstag von Reinhard Neudert .	6
Zum 80. Geburtstag von Wolfgang Dietrich .	7

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).

Die nächste Ausgabe 02/2017 erscheint am 26. Juni 2017 (Redaktionsschluss 9. Juni 2017).

Aus der Fachgruppe

Preisausschreibungen der Fachgruppe

Felix-Bloch-Vorlesung 2017

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 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 oder die 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 25. bis 28. September 2017 in Bayreuth stattfindet.

Kandidatenvorschläge mit einer schriftlichen Würdigung, einem Lebenslauf und einer Publikationsliste können bis spätestens 1. Juni 2017 eingereicht werden an:

GDCh-Geschäftsstelle

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

Ernst-Preis 2017

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 1. Juni 2016 und dem 1. Juni 2017 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 25. bis 28. September 2017 in Bayreuth. 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 2017 eingereicht werden an:

Dr. Wolfgang Jahnke

wolfgang.jahnke@novartis.com
<https://www.gdch.de/index.php?id=3300>

Aus der Fachgruppe

Ernst-Preisträger 2016

Die Ernst-Preise sind die Nachwuchspreise der Fachgruppe und sind für Studenten und Doktoranden bestimmt, die zum Zeitpunkt der Einreichung der vorgeschlagenen Arbeit ihre Doktorprüfung noch nicht absolviert hatten. Ausgezeichnet wird genau eine Publikation, die das methodische Spektrum der magnetischen Resonanz, ihr theoretisches Verständnis, oder ihre Anwendung bereichern. Jeder Ernst-Preis ist mit 500 € dotiert. Auch im vergangenen Jahr wurden die Vorschläge für Ernst-Preise wieder von einer neunköpfigen

Auswahlkommission begutachtet. Wie so oft gestaltete sich die Auswahl der Preisträger auch in diesem Jahr schwierig, weil deutlich mehr als drei der eingereichten Arbeiten preiswürdig waren. Nach intensiver Diskussion hat sich die Kommission auf die untenstehenden Preisträger verständigt. Wir gratulieren den Preisträgern herzlich und wünschen ihnen weiterhin viel Spaß und Erfolg mit der magnetischen Resonanzspektroskopie.

Wolfgang Jahnke (Novartis)

Christian Hintze (Universität Konstanz) bekommt den Ernst-Preis für seine Arbeit über eine neue Methode zur Abstandsmessung mittels ESR-Spektroskopie, genannt Laser-Induced Magnetic Dipole (Laser-IMD). Die Autoren konnten am Beispiel von Cytochrom C zeigen, dass die prosthetische Häm-Gruppe nach Laser-Anregung zusammen mit einem Nitroxid-basierten spin label als Sonde für Abstandsmessungen genutzt werden kann. Bereits in diesen ersten Experimenten erreicht Laser-IMD die Sensitivität von Nitroxid-Nitroxid-DEER-Messungen und besitzt das Potential eines dramatischen Sensitivitätsgewinns bei Optimierung der Triplet-Quantenausbeute.

Laser-Induced Magnetic Dipole Spectroscopy
J. Phys. Chem. Lett. **2016**, *7*, 2204–2209.
DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b00765

Katharina Märker (Universität Grenoble) erhält den Ernst-Preis für ihre Arbeit über Magic Angle Spinning Dynamic Nuclear Polarization (MAS-DNP), um mittels ^{13}C - ^{13}C und ^{13}C - ^{15}N -Korrelationen nanokristalline niedermolekulare Verbindungen zuzuordnen, in diesem Fall ein Guanosin-Derivat mit zwei Molekülen in der asymmetrischen Einheit. In der Vergangenheit waren dazu in der Regel Berechnungen der chemischen Verschiebungen mittels Density Functional Theory (DFT) notwendig, die dann mit den experimentellen Daten verglichen wurden. Die beschriebene Methode hingegen erlaubt die Zuordnung allein auf der Basis von experimentellen Daten, und ist Grundlage für weitere Untersuchungen, z. B. der Messung von intramolekularen Distanzen mittels DNP-NMR.

A New Tool for NMR Crystallography: Complete $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ Assignment of Organic Molecules at Natural Isotopic Abundance Using DNP-Enhanced Solid-State NMR
J. Am. Chem. Soc. **2015**, *137*, 13796–13799.
DOI: 10.1021/jacs.5b09964

Johannes Wittmann (ETH Zürich) hat für seine Arbeit im Detail untersucht, warum Pulstransienten zu nicht reproduzierbaren Resultaten in symmetriebasierten Pulssequenzen führen können und wieso bereits sehr kleine Änderungen in der Konfiguration des Spektrometers zu großen Änderungen in der Effizienz des Polarisationstransfers führen können. Die unterschiedlichen Resultate als Funktion der Konfiguration des Spektrometers können mithilfe der Floquet-Theorie erklärt werden. Dieses Verständnis führt wiederum zu verschiedenen Ansätzen, um die Effizienz des Polarisationstransfer zu verbessern. Das Ergebnis ist eine Pulssequenz, die einen sehr reproduzierbaren Polarisationstransfer erlaubt, der nicht mehr von der genauen Konfiguration des Spektrometers abhängt. Im Unterschied zu anderen Optimierungsmethoden basiert die Implementierung transientenkompensierter Pulse auf der Messung des tatsächlichen Radiofrequenzfeldes und nicht auf der Messung und Optimierung eines NMR Signals und kann damit auch bei Proben mit einem schlechten Signal zu Rausch-Verhältnis angewendet werden.

Quantification and compensation of the influence of pulse transients on symmetry-based recoupling sequences
J. Magn. Reson. **2016**, *263*, 7–18.
DOI: 10.1016/j.jmr.2015.12.011



Aus der Fachgruppe

Neuer Vorstand gewählt

Im Herbst letzten Jahres haben Sie als Mitglieder der Fachgruppe in der Briefwahl die Zusammensetzung des neuen Vorstand festgelegt. Der neue Vorstand hat nun in seiner konstituierenden Sitzung am 12. Januar in Frankfurt am Main den neuen Vorsitzenden der Fachgruppe für die Amtszeit 2017–2020 gewählt. Damit setzt sich der neue Vorstand wie folgt zusammen:

Vorsitzender der Fachgruppe

- Burkhard Luy (KIT)

Stellvertretender Vorsitzender

- Christian Griesinger (MPIBPC Göttingen)

Beisitzer

- Marina Bennati (MPIBPC Göttingen)
- Teresa Carlomagno (HZ Braunschweig / Uni Hannover)
- Steffen Glaser (TU München)
- Henrike Heise (Uni Düsseldorf)
- Johannes Liermann (Uni Mainz)

jl

Vorschau

Termine 2017

Tagungen

■ qNMR Summit 2017

16. bis 17. März 2017
Berlin

Tagung und Workshop zum Thema quantitative NMR.
<http://www.nmrvalidation.org>

■ 58th Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (ENC),

26. bis 31. März 2017
Pacific Grove, CA (USA)

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.

<http://www.enc-conference.org>

■ EUROMAR 2017

2. bis 6. Juli 2017
Warschau (Polen)

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

<http://www.euromar2017.org>

■ 10th Alpine Conference on Solid-State NMR

10. bis 14. September 2017
Chamonix-Mont Blanc (Frankreich)

International forum for high-level discussions to physicists, chemists, biologists and the other scientists with both an academic or industrial background, interested in the latest developments in solid-state NMR.

<http://www.alpine-conference.org>

■ Small Molecule NMR Conference (SMASH) 2017

17. bis 20. September 2017
Baveno (Italien)

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

<http://www.smashnmr.org>

■ 39. Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie

25. bis 28. September 2017
Bayreuth

Gemeinsame Tagung mit dem Groupe Magnétisme et Résonances Magnétiques (Frankreich).

<https://www.gdch.de/index.php?id=87>

Schulen und Workshops

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung

Prof. Dr. Reinhard Meusinger

27. bis 30. März 2017
Frankfurt am Main

Grundlagenkurs: Spektreninterpretation, Struktur-Spektren-Beziehungen, 100 NMR-Übungen, Verifizierung, Konstitutionsbestimmung.

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

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

Dr. Johannes Liermann

4. bis 6. September 2017
Mainz

Grundlegendes Verständnis der Funktion moderner NMR-Spektrometer, Durchführung gängiger NMR-Experimente, einfache Umbau- und Wartungsmaßnahmen.

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

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

Prof. Dr. Reinhard Meusinger

16. bis 19. Oktober 2017
Frankfurt am Main

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

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

■ Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie

Prof. Dr. Jörg Matysik

8 Kurse im Studienjahr 2017/18 ab September 2017
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>

■ G-NMR Workshop „Non-Uniform Sampling in NMR“

Dr. Sam Asami, PD Dr. Gerd Gemmecker,
Prof. Dr. Michael Sattler

31. Mai bis 1. Juni 2017
Garching bei München

Non-uniform sampling plays a central role in state-of-the-art NMR spectroscopy, allowing to significantly accelerate NMR experiments, which in turn enables the acquisition of multidimensional experiments in a fraction of time. Different NUS sampling and processing approaches emerged in the past years, which will be introduced in a "hands-on" fashion by expert scientists, actively developing these techniques.

<http://www.bnmrz.org/index.php?id=66>

■ Ampere NMR School

Prof. Stefan Jurga, PhD, DSc (Chair)

25. Juni bis 1. Juli 2017
Zakopane (Polen)

The School is addressed to young scientists (post graduate students, PhD students and post-doctoral fellows) and is focused on theoretical and experimental aspects of NMR methods, as well as on application of NMR in nanoscience and nanotechnology.

<http://www.staff.amu.edu.pl/~school>

■ 3. G-NMR-Schule

Dr. Peter Schmieder

18. bis 22. September 2017
Berlin-Buch

Die G-NMR-Schule richtet sie sich an Doktoranden und Post-Docs, die mit der NMR-Spektroskopie beginnen wollen, und wird sowohl die theoretischen Grundlagen als auch die wichtigen Experimente behandeln. Dabei werden die drei Bereiche „Kleine Moleküle“, „Biologische NMR“ und „Festkörper-NMR“ behandelt, neben Vorträgen wird es Übungen und praktische Einführungen am Spektrometer geben.

<http://www.leibniz-fmp.de/schmieder>



Diese Tagung haben wir
2016 leider verpasst...
(<http://www.kr.org/NMR>)



Nachgefragt

Zum 70. Geburtstag von Reinhard Neudert



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

An der TU Berlin habe ich Chemie studiert und bin über die Diplomarbeit bei Prof. Ziesow das erste Mal mit NMR in Berührung genommen. Thema der Arbeit

war die Ermittlung von Rotations-Korrelationszeiten ausgewählter Moleküle durch Messung der T_1 -Relaxationszeit.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Das spannendste Experiment fand im Hauptlaboratorium der BASF statt, wo ich viele Jahre Leiter der NMR-Spektroskopie war. Wir haben damals in Zusammenarbeit mit Prozesschemikern eine Durchflusszelle gebaut und in ein 360 MHz Spektrometer eingeführt. Publiziert haben wir die Untersuchung einer Wittig Reaktion durch Messung der ^{31}P -NMR-Resonanz.¹ Später kamen dann ^{31}P -NMR Messungen an Vollblut hinzu (ich musste aus betriebsrechtlichen Gründen mein eigenes Blut zur Verfügung stellen).

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Das geht auch auf die BASF zurück, wo ich mit der Einführung von 2D-NMR Techniken befasst war. Fasziniert hat mich damals NOESY, das ich zur Messung intramolekularer Abstände in Wirkstoffmolekülen angewendet habe.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Das war das erste Supercon zu dem ich Zugang hatte, ein 270 MHz Spektrometer, das im Arbeitskreis von Prof. Bohlmann in der Organischen

Chemie der TU Berlin betrieben wurde. Herr Bohlmann, der selbst an dem Gerät Messungen machte, erlaubte mir nur Zugang am Wochenende. Er hat mich mit großem Misstrauen beobachtet, wenn ich andere Probenköpfe eingebaut habe und mit Breitband-Entkopplern angerückt bin.

Was macht für Sie einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker aus?

Ein typischer NMR Spektroskopiker sollte mit zwei Disziplinen vertraut sein: Physik, um das Messprinzip richtig anwenden zu können, und Chemie, um die Anwendung, z. B. in der Strukturaufklärung, zu verstehen.

In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?

Der nicht-invasive Aspekt der NMR gepaart mit der Unschädlichkeit der angewendeten Strahlung macht die Methode besonders für die Medizin interessant. Dort werden künftig noch viele neue Anwendungsgebiete erschlossen.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten zehn Jahren?

Der erste Einsatz der MRT geht zwar schon etwas weiter zurück, aber diese Methode hat in den letzten 10 Jahren kontinuierlich weitere Einsatzgebiete erschlossen und das wird auch in Zukunft so bleiben. Übrigens habe ich neulich anlässlich einer MRT-Untersuchung des Gehirns das erste Mal ein Gradientenkonzert vernommen, zu meinem Glück mit für mich gutem Resultat.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Ich habe an der TU Berlin Chemie studiert, bin nach Abschluss meiner Dissertation in die zentrale Forschung der BASF gewechselt und habe zum Schluss die Abteilung Spektroskopie geleitet. Von dort wechselte ich zur Firma Chemical Concepts und wurde danach Director New Business Development bei Wiley-VCH. Nach Eintritt in den Ruhestand vor fünf Jahren habe ich eine Position als Consultant bei Wiley angenommen, die ich heute noch ausübe. Mit NMR Spektroskopie bin ich immer noch befasst.

Reinhard Neudert (Weinheim) wird am 10. März dieses Jahres 70 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

¹ DOI: 10.1002/mrc.1260241214

Nachgefragt

Zum 80. Geburtstag von Wolfgang Dietrich



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

1962, nach Abschluß des Vordiploms (Physik) und einiger Vertiefungspraktika, hatte ich entschlossen, mich mit dem Fachgebiet Physikalische Chemie intensiver

zu beschäftigen. Dort war seinerzeit, unter der Leitung von Dr. R. Kosfeld, die NMR-Spektroskopie an der RWTH Aachen angesiedelt. Diese Methode fand mein Interesse und so fertigte ich folglich meine Diplomarbeit über ein Thema der longitudinalen und transversalen Relaxationszeiten in einigen ausgewählten Flüssigkeiten an. Die abschließende Bewertung meiner Ergebnisse veranlasste mich, die Probleme der Temperierung in grundsätzlich anderer Weise zu lösen. Das führte mich zur Konstruktion einer (ggf. weltweit ersten) Messzelle mit direkter Temperierung mittels eines flüssigen Mediums im Rahmen meiner Promotion.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Noch vor Etablierung der 2D-Spektroskopie konnte gezeigt werden, dass mit Hilfe präziser T_1 - ^{13}C -Messungen sowie deren NOE-Anteil z. B. die ^{13}C -Signale einer Reihe 2-substituierter Adamantane richtig zugeordnet werden konnten. Im Falle der Zuordnung der olefinischen ^{13}C -Signale von Dicyclopentadien musste jedoch im Nachhinein festgestellt werden, dass diese Methode hierbei offensichtlich überfordert war. Die später zur Verfügung stehende 2D-INADEQUATE Methode zeigte die wahre Zuordnung eindeutig auf. Allerdings mussten somit die Zuordnungen aller anderen Autoren auch verworfen werden.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Der primäre Effekt der NMR ist die Relaxation. Aus diesem Grund ist es verständlich, z. B. dem T_1 -Experiment, vorzugsweise dem Messen der langen Relaxationszeiten, einige Aufmerksamkeit zu widmen. Vor allem hinsichtlich des Zeitaufwandes, der erzielbaren Präzision und der eliminierbaren systematischen Fehler wurde nach allen Regeln der Mathematik und Physik ein Optimum gesucht. Erwähnen sollte ich hier die Methode, Spektren, deren Signalformen durch Inhomogenitäten des äußeren Feldes asymmetrisch wiedergegeben werden, mathematisch zu optimieren. Im Falle der Untersuchung von dynamischen Austauschprozessen können so Fehlpassungen vermieden werden.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Für die Optimierung von Methodiken war nur selten eine hohe Feldstärke notwendig. Meistens reichte auch ein AM-100, mit dem ich recht gerne experimentiert habe

Was macht für Sie einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker aus?

Ich kann mir kaum erlauben, Ratschläge zu geben. Aber vielleicht ist kritisches Analysieren auch scheinbar abgesicherter Grundlagen ein nützliches Charakteristikum.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten zehn Jahren?

Gefühlsmäßig fallen mir hierbei die nunmehr routinemäßig einsetzbaren Kryo-Probenköpfe mit ihrer hohen Empfindlichkeit ein.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Der nachfolgende Satz ist noch kürzer als gewünscht, aber ein Zitat (von wem?): „Niemand geht man so ganz.“

Wolfgang Dietrich (Bochum) wird am 26. April dieses Jahres 80 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

