



01/2021 • 63. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanz
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

schon bald schließt ein Jahr, in dem in unserer Fachgruppe einiges passiert ist. Seit Anfang des Jahres gibt es unter dem Vorsitz von Jörg Matysik einen neuen Vorstand (der sich noch persönlich treffen muss) und die Fachgruppe hat sich mit der Umbenennung in „Magnetische Resonanz“ einen neuen Namen gegeben, der dem Umstand Rechnung trägt, dass Magnetresonanz schon lange nicht mehr auf Spektroskopie beschränkt sein muss.

Die digitale Fachgruppentagung im September hat auch gezeigt, dass der wissenschaftliche Austausch den erschwerten Bedingungen der Pandemie trotzen kann, wenngleich uns allen sicher auch der persönliche Kontakt untereinander fehlt.

Passend zum Jahresende hat diese Ausgabe resümierenden Charakter – wir berichten über die Geburtstage von Klaus Roth und Stefan Berger und müssen den Tod von Richard Ernst und Shimon Vega zur Kenntnis nehmen. Ein erfreulicher Höhepunkt des Jahres war die Verleihung des ersten Otto-Stern-Preises an Tony Keller.

Sicher ist Ihnen nicht entgangen, dass der MARS zuletzt seltener erschienen ist. Daran können Sie selber etwas ändern: Wir suchen jederzeit Kolleginnen und Kollegen, die am MARS mitwirken möchten, sei es schreibend oder redaktionell. Melden Sie sich bei uns!

Gesegnete Weihnachten und die besten Wünsche für das neue Jahr,

Johannes Liermann und Nils Schlörer

Inhalt

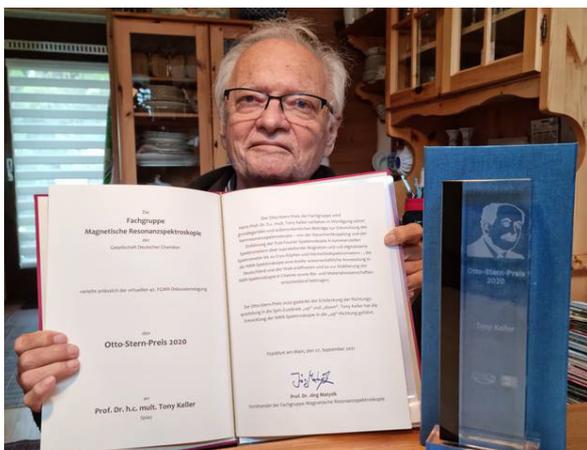
Otto-Stern-Preis für Tony Keller	2
Autobiographie von Richard Ernst	2
Nachruf auf Shimon Vega	3
Zum 75. Geburtstag von Klaus Roth	4
Zum 75. Geburtstag von Stefan Berger	6

Impressum

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

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 Otto-Stern-Preis für Tony Keller



Die Fachgruppe hat den Otto-Stern-Preis 2021 an Tony Keller als ersten Preisträger überhaupt verliehen. Mit diesem Preis wird Tony Kellers Lebenswerk um die Entwicklung der modernen Magnetresonanz-Spektroskopie gewürdigt:

Der Otto-Stern-Preis der Fachgruppe wird Herrn **Prof. Dr. h.c. mult. Tony Keller** verliehen in Würdigung seiner grundlegenden und außerordentlichen Beiträge zur Entwicklung der Kernresonanzspektroskopie von der Rauschentkopplung und der Einführung der Puls-Fourier-Spektroskopie in kommerzielle Spektrometer über supraleitende Magneten und voll digitalisierte Spektrometer bis zu Cryo-Köpfen und Höchstfeldspektrometern, die der NMR-Spektroskopie eine breite wissenschaftliche Anwendung in Deutschland und der Welt eröffnete und so zur Etablierung der NMR-Spektroskopie in Chemie sowie Bio- und Materialwissenschaften entscheidend beitrug.

Der Otto-Stern-Preis gedenkt der Entdeckung der Richtungsquantelung in die Spin-Zustände „up“ und „down“. Tony Keller hat die Entwicklung der NMR-Spektroskopie in die „up“-Richtung geführt.

Der Preis wurde 2021 neu gestiftet, um Persönlichkeiten im Bereich der Magnetresonanz für Ihr Lebenswerk auszuzeichnen. Nominierungen für den Preis können jederzeit an den FG-Vorstand gerichtet werden. Weitere Informationen sind auf der [Homepage](#) zu finden.

jl

Buchtipp Autobiographie von Richard Ernst

„Richard R. Ernst, Professor für Chemie an der ETH Zürich, befindet sich auf dem Flug nach New York. Plötzlich kommt der Pilot auf ihn zu und bittet ihn ins Cockpit: ein Anruf aus Stockholm! So beginnt die Autobiografie des Schweizer Nobelpreisträgers...“



Diese Anekdote über Richard Ernst, der am 4. Juni 2021 gestorben ist, ist wohl fast jeder Wissenschaftlerin und jedem Wissenschaftler aus der Magnetresonanz bekannt. Sie eröffnet auch den Klappentext des Buchs, in dem er noch im Jahr 2020 seine Erinnerungen unter dem Titel *Nobelpreisträger aus Winterthur* veröffentlicht hat.

In dieser Autobiographie offenbart sich Richard Ernst jenseits seiner herausragenden Position als Pionier der Magnetresonanz als sensibler, kunstsinziger und auch überaus skeptischer Geist. Das Buch ist in der Schweiz in mehreren Zeitungen besprochen worden, so schreibt die NZZ am Sonntag: „Mit seiner Autobiografie wollte er vor allem auch jungen Menschen zeigen, wie toll und trotzdem wie schwierig es ist, sein Leben der Forschung zum widmen.“

Das 288 Seiten starke Buch hat 70 Abbildungen und ist für 39 Euro über den Buchhandel erhältlich.

jl

■ Nobelpreisträger aus Winterthur. Autobiografie

Richard R. Ernst
(in Zusammenarbeit mit Matthias Meili)

Verlag Hier und Jetzt, Baden, 2020
ISBN 978-3-03919-501-5

Israel Chemical Society

Nachruf auf Shimon Vega

Mit freundlicher Erlaubnis geben wir hier den Nachruf von Prof. Ehud Keinan, Präsident der Israel Chemical Society, wieder:

With deep sorrow, we announce the passing of Professor Emeritus Prof. Shimon Vega of the Weizmann Institute of Science, who died on November 16, 2021 in Rehovot.



Shimon Vega was born in Amsterdam on November 14, 1943. At the age of 6 weeks, he was sent to a hideout with a Dutch family until the end of the war. He grew up in Ouderkerk aan

de Amstel, a small village south of Amsterdam where they were the only Jewish family in the village. After the war, Shimon, his elder brother Lex (also a bright NMR scientist), and sister Bea returned from their hideout and reunited with their parents at Ouderkerk. Shimon obtained both his B.Sc. and M.Sc. in Physics in Holland. Following the Six-Day War, he made aliyah and completed his Ph.D. with Prof. Zeev Luz on Nuclear Quadrupole Resonance. As a Berkeley postdoc with Alex Pines, Shimon made pioneering discoveries in the new field of multiple-quantum NMR while developing the basis for the fictitious-spin- $1/2$ formalism that is now the primary tool for understanding NMR in solids and liquids. Upon returning to the Weizmann Institute as junior faculty, Shimon furthered these studies to half-integer quadrupolar nuclei. These species conform the majority of nuclei in the Periodic Table and made propositions that enabled a wide variety of materials-oriented NMR research. In the early 1980s, Shimon launched into magic angle spinning (MAS) investigations when MAS was largely viewed from a continuous-wave perspective. Shimon departed from this limited perspective, recognized the complex timedependencies that underlie this

coherent process, and analyzed it with Floquet theory tools to lay the foundations of many contemporary spin- $1/2$ experiments. This insight was extended to deal with multiple, non-commensurate timedependent processes in efforts that lead to ^1H solids NMR experiments of everyday use worldwide. During the last decade, Shimon embarked on understanding the electron to nuclear magnetization transfer mechanism underlying dynamic nuclear polarization, delivering the insights that are again molding experiments in this area. He performed all these studies while taking leadership positions at the Weizmann and MIT, Washington University, and Leiden, mentoring coworkers who are nowadays leaders at the forefront of magnetic resonance.

Shimon had influenced professionally and personally many graduate students, postdoctoral fellows, colleagues, course students, and listeners to his great science talks. He represented a rare combination of openness to new ideas with deep-rooted understanding and contagious enthusiasm, always willing to pass on his knowledge with great openness and modesty. His achievements have been recognized by many prizes, including the Kolthoff, ISMAR, the 2003 ICS Prize for the Outstanding Scientist, and the 2018 ICS Gold Medal. On February 12, 2019, during the Medal award ceremony at the 84th ICS Meeting, Shimon responded in a way that reflected his warm and modest personality: "I wish to share with you, my love. Above all my love for my wife Margriet, who in addition to all the rest, made it possible for me to dedicate much of my time to science. And for our children who knew what it meant to have a dad in the lab or abroad or in miluim. Let me tell you about my other love... Magnetic Resonance... I wish to thank the ICS Prize Committee. I assume that if I had been a member of that committee, I would not have voted in favor of myself. Why? Because I know what I know and I also know what I don't know, but they don't realize how much I don't know. It is a great honor for me to join the incredible list of ICS Gold Medalists."

The ICS and the global chemistry community mourn the loss of a great scientist.

Ehud Keinan (Haifa)



Nachgefragt

Zum 75. Geburtstag von Klaus Roth



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Das war 1968 während meiner OC-Diplomarbeit. Ich sollte eine bis dato unbekannte Verbindung durch eine Isomerisierung präparativ herstellen.

Das konnte ich nur mit dem damals noch neuen 60 MHz Varian A60 A NMR-Spektrometer nachweisen. Ich durfte bei der Messung zugucken und als die Tintenfeder des Plotters im Bereich der acetylenischen Protonen nach oben ging und ein Singulett anzeigte, wusste ich, dass mein Diplom in Reichweite war. Ein großer Moment für mich und meine Begeisterung für diese Methode war geweckt!

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Das war die Aufnahme eines NMR-Tomogramms von meinem Kopf in dem ersten ausgelieferten kommerziellen Tomographen auf dem europäischen Festland. Das war 1983 im belgischen Mons und ich war ziemlich aufgeregt, denn man ist sich ja nicht sicher, ob alles gesund ist. Das Gerät war ein Elektromagnet und ich musste 45 Minuten darin still liegen. Die Bilder bekam ich erst zwei Wochen später und erst dann wusste ich, dass in meinem Kopf alles ok war.

Die mediosagittalen Tomogramme meines Kopfes zeigen eine mit den Jahren eine zunehmende Gewebedifferenzierung. Man kann dies als Ergebnis des technologischen Fortschritts sehen, aber ich führe das allein auf eine Weiterentwicklung meine geistigen Fähigkeiten zurück.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Sie erwarten jetzt wahrscheinlich eine Pulssequenz, aber da muss ich Sie enttäuschen. Ich bin seit über 20 Jahren aus der NMR-Spektroskopie raus und hatte früher auch nie rein methodisch gearbeitet, sondern in dieser Technik immer ein fantastisch leistungsfähiges Handwerkszeug zur Lösung chemischer Probleme gesehen.

Als ich später für zwei Jahre als Visiting Professor an der University of California San Francisco in einer der führenden Medical Schools arbeiten durfte, fand ich es toll in einem Ganzkörper-Tomographen (2 Tesla) durch Auflegen einer Oberflächenspule das ^{31}P -NMR-Spektrum meines eigenen Beinmuskelfewebes zu messen, mit den Kopplungen zwischen den drei P-Atomen im ATP.

Da schließt sich ein zweites, für mich noch mehr beeindruckendes Experiment an. Als gelernter Hochauflösungs-NMR-Spektroskopiker mit tausenden Stunden Shim-Erfahrung kam ich eines Tages vor dem 2 T Ganzkörper-Tomographen stehend auf die Idee, anstelle von Patienten oder Freiwilligen mal zu testen, wie gut die spektrale Auflösung in so einem Riesenmagneten sein kann. Ich positionierte zu später Stunde einen 1,5 Liter Glasrundkolben gefüllt mit 1-Propanol als Gehirn-

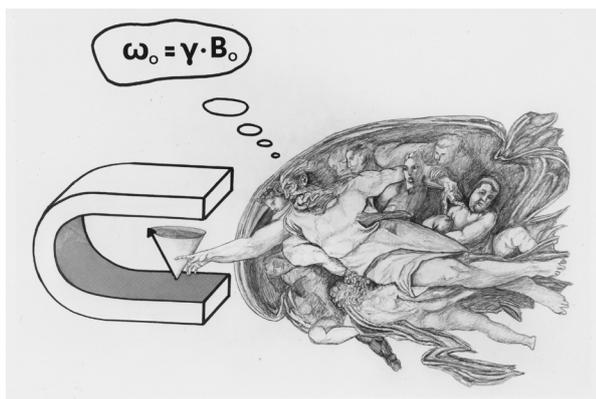
Dummy ins Zentrum. Und siehe da, ich schaffte es, die Signale in meinem Gehirndummy auf eine Linienbreite von etwa 2 Hz zu shimmen. Die Physiker konnten nicht glauben, was man mit geduldigem Shimmen für eine tolle Homogenität des Magnetfeldes erreichen kann, die Me-



1983

1988

2005



Übrigens: Klaus Roth war zusammen mit Dieter Ziessow der Gründer von MARS. Das damalige Logo nach Michelangelo ist sein Entwurf.

diziner verstanden es überhaupt nicht, aber ich war glücklich.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Klar, meine erste Liebe, das Varian A 60 A. Heute kaum vorstellbar, nix Puls, mittelalterliche cw-Technik mit Elektromagnet. Man sollte die Erinnerungen nicht verklären, aber für mich als Wald- und Wiesen-Organiker war es ein toller Triumph, dass ich die Kiste reparieren konnte. Das war allerdings (manchmal) auch nicht kompliziert, da das Spektrometer noch Röhren hatte und man mit einem Drehschalter die Anodenstromstärken von ca. 10 Röhren messen konnte. Dann brauchte man nur die durchgebrannte Röhre auszutauschen. Das war aber auch das Einzige, was ich später vermisst habe. Ansonsten bin ich mit dem Varian XL-100 und später Bruker WH270 groß geworden.

Was macht für Sie einen typischen NMR-Spektroskopiker aus?

Nix besonderes, begeisterungsfähig und geduldig sein zu können, wäre hilfreich.

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?

Da die Zeit für Universalgenies seit 300 Jahren vorbei ist, würde ich keinen Rat geben wollen! Die NMR-Spektroskopie ist so umfassend, dass man aus verschiedenen Disziplinen hineinwachsen kann: Biologie, Medizin, Physik, Chemie, Materialwissenschaften etc. Unabhängig vom Fach würde ich immer eine einführende Lehrveranstal-

tung mit praktischen Übungen am Spektrometer empfehlen. Ein selbst durchgeführtes Experiment ist immer der beste Einstieg in jede instrumentelle Forschung. Wer dabei kein Lust aufs Weitermachen bekommt, sollte etwas Anderes machen.

Was ist in ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten 10 Jahren?

Die Beantwortung überlasse ich denen, die in den letzten zehn Jahren in der NMR geforscht haben.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen.

Nach dem Chemiestudium und der Promotion war ich bis 1991 Leiter der Abteilung NMR-Spektroskopie am Institut für Organische Chemie der FU Berlin, unterbrochen von Forschungsaufenthalten (1979–80) am Institute for Medical Research in Mill Hill, London bei J. Feeney und als Visiting Associate Professor bei M.W. Weiner am Department of Radiology, University of California San Francisco (1986–88). Von 1991–2000 war ich Direktor der Dahlem Konferenzen der Freien Universität Berlin und ab 2000 Professor am Institut für Chemie der Freien Universität Berlin und habe dort, in Kooperation mit Schering, an paramagnetischen Kontrastmitteln für die Kernspintomographie gearbeitet.

Seit meinem Ruhestand versuche ich durch viele Vorträge und Beiträge in der GDCh-Zeitschrift „Chemie in Unserer Zeit“ junge Leute für die Chemie zu begeistern. Für Mitglieder unserer Fachgruppe wäre vielleicht mein Artikel „Nobelpreise 2004 - Same procedure as every year?“¹ eine amüsante Lektüre. Darin wird das kuriose Hickhack um die Nobelpreise 2003 für Medizin an Paul Lauterbur (Chemiker) und Peter Mansfield (Physiker) beleuchtet. Voller NMR, Glut und Leidenschaft!

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns.

Typischer fid in der Kernspin-Tomographie bei angelegtem linearen Gradienten: bis auf wenige Datenpunkte am Anfang, nur Rauschen.

Klaus Roth (Berlin) wurde am 30. Januar 2020 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

¹ Chem. Unserer Zeit, 2004, 38, 348–356
DOI: 10.1002/ciuz.200490076



Aus der Fachgruppe

Zum 75. Geburtstag von Stefan Berger

Den meisten von uns ist zumindest eine der drei Auflagen von „100/150/200 and more experiments“ wohlbekannt, nicht wenigen auch noch der aktive Wissenschaftler und Fachgruppenvorsitzende (2005–2008). Aus Anlaß seines 75. Geburtstags bringen wir hier eine persönliche Würdigung.



Prof. Dr. Stefan Berger studierte von 1966 bis 1970 in Tübingen Chemie (Dissertation bei Prof. Dr. A. Rieker). Nach einem Postdoc-Aufenthalt am California Institute of Technology (Prof. Dr. J.

D. Roberts), bei dem er erste intensive Erfahrungen in der damals noch jungen Disziplin der NMR-Spektroskopie sammelte, wurde er Leiter der NMR-Abteilung am Fachbereich Chemie der Philipps-Universität Marburg. Seit 1997 hatte er bis zu seiner Emeritierung 2013 den Lehrstuhl für Strukturanalytik am Institut für Analytische Chemie der Universität Leipzig inne.

In seinem wissenschaftlichen Werk treten als Besonderheit die ungewöhnliche Breite und hohe Relevanz der bearbeiteten wissenschaftlichen Themen hervor: Diese reichen von der Entwicklung neuer Pulssequenzen für die Programmierung von NMR-Spektrometern über mechanistische Untersuchungen organischer und metallorganischer Reaktionen sowie die klassische Strukturanalytik (spektroskopische Parameter zur Klassifizierung von Substanzeigenschaften etc.) bis hin zur biomolekularen Anwendung der NMR-Spektroskopie bei Peptid- und Proteinstrukturen. Gleiches gilt auch für den Einfluss, den er über seine Lehrtätigkeit und durch Aktivitäten auf verschiedensten Ebenen im wissenschaftlichen und nichtwissenschaftlichen Bereich genommen hat.

Auf dem Gebiet der Entwicklung neuer Pulssequenzen hat sich Stefan Berger insbesondere durch die Vorstellung selektiver ein- und zweidimensionaler Versionen hervorgetan, nach dem Aufkommen der feldgradienten-editierten Experimente lieferte er auch dort wesentliche Beiträge. In den beiden letzten Jahrzehnten seiner aktiven Laufbahn kamen darüber hinaus wichtige Arbeiten zur diffusions-editierten NMR-Spektroskopie hinzu. Seine „Freude am Experimentieren“ ist auch immer wieder belegt durch unkonventionelle neue Sequenzen, u. a. C–C coupling 2QHMBC für symm. Moleküle, folded-HSQC, Phosphorylation-HSQC, ^{13}C -STD. Ein weiteres Betätigungsfeld des Jubilars ist die Analyse von Struktur und Reaktionsmechanismus: Beiträge zu skalarer Kopplung, chemischer Verschiebung und Isotopeneffekt schufen in den 70er und 80er Jahren den Grundstock zu seiner Expertise, die sich später in der Veröffentlichung von Standardwerken wie „NMR of Non-metallic Elements“ und „C-13 NMR“ niederschlug. Es folgte eine Phase der intensiven Auseinandersetzung mit der metallorganischen Chemie während der 80er und 90er Jahre, wozu eine Vielzahl mehrdimensionaler, heteronuklearer NMR-Experimente implementiert oder entwickelt wurde. Besonderen Raum nehmen dabei Arbeiten zu Wittig- und Metallierungsreagenzien ein, aber es blieb auch Zeit für „Ausflüge quer durch das (NMR-zugängliche) Periodensystem“. Nicht zuletzt war Prof. Berger als einer der Ersten an der Wiederentdeckung der dipolaren Restkopplung für organische Moleküle beteiligt, und seit 2000 kam eine intensive Beschäftigung mit unterschiedlichsten Aspekten der diffusions-editierten NMR-Spektroskopie für die Strukturanalyse hinzu.

Last but not least hat er sich außerdem auf vielfache Art um die Lehre und die Förderung der Analytischen Chemie verdient gemacht – sowohl auf dem rein wissenschaftlichen Gebiet durch die Veröffentlichung von der bis heute als Standardwerken geltenden., o.g. Referenzbücher, als auch

durch die Verquickung chemischer, literarischer und spektroskopischer Ansätze in dem preisgekrönten Buch zu den Naturstoffen und eine nachfolgende Serie von Artikeln in der ChiuZ. Im praxisbezogenen Bereich hat Prof. Berger darüber hinaus neben seiner universitären Lehrtätigkeit durch das sehr erfolgreiche, jahrzehntelange Angebot von GDCh-Kursen zur NMR-Spektroskopie für nichtwissenschaftliche Mitarbeiter zu einem breiten Themenspektrum (fünf verschiedene Bereiche) der NMR-spektroskopischen Ausbildung in industriellen und akademischen Labors im deutschsprachigen Raum durch die fundierte Fortbildung unzähliger Operateure zu einem soliden Fundament verholfen. Auch strukturell gelang es ihm durch sein Engagement zur Erhaltung des Instituts für Analytische Chemie an der Universität Leipzig eine der wenigen derartigen Einrichtungen, die an deutschen Universitäten nicht nur dem Namen nach noch existieren, inhaltlich und funktionell mit neuem Leben zu erfüllen und zukunftstauglich zu machen. Sein in Bezug auf die Lehre vielleicht wichtigster Beitrag für im Bereich der NMR-Spektroskopie wissenschaftlich arbeitende Forscher weltweit sind jedoch seine (eingangs erwähnten, in Koautorschaft mit H.-O. Kalinowski und S. Braun veröffentlichten) Lehrbücher zur praktischen NMR-Spektroskopie (100...150...200 and More Basic NMR experiments), die enorm erfolgreich wurden und weltweite Verbreitung gefunden haben. In kaum einem akademischen oder forschend tätigen NMR-Labor fehlt diese „Bibel der praktischen NMR-Spektroskopie“.

In der Praxis universitärer NMR-Labors setzte Stefan Berger bereits in seiner Marburger Zeit Maßstäbe für die Automation im Open-Access-Betrieb. Dabei wurden hohe Standards für wissenschaftliche und Service-Qualität definiert als Vorbild für eine optimale Nutzung der Möglichkeiten, die zentrale, strukturanalytische Service-Einheiten im akademischen Betrieb leisten können. Aus seiner Arbeitsgruppe gingen eine Vielzahl

von NMR-Spektroskopikern in Industrie und Universität hervor, die sein Credo weitergaben: Prof. Berger hat sich auch dadurch in hohem Maße um die NMR-Spektroskopie in der Strukturanalytik verdient gemacht, dass er das NMR-Labor im akademischen Umfeld von der Nutzung als einer reinen „Hilfswissenschaft“ zu einer anerkannten, eigenständigen Forschungsdisziplin mitgeformt und dieses Selbstverständnis an seine wissenschaftlichen Mitarbeiter weitergegeben hat. Der Familienmensch und um seine Arbeitsgruppenmitglieder persönlich bemühte Chef hebt sich im Umgang als ungemein breit interessierte und gebildete Persönlichkeit ab – unvergessen seine jährlich wechselnden, von durchaus olympischem Geist getragenen Wettstreite der Arbeitsgruppe zu Weihnachten oder die Exkursionen unter verschiedenster Zielsetzung. Stets für ein beratendes Gespräch oder zu einer Diskussion bereit, seine durchaus auch streitbar intendierten Thesen stets humorvoll einbringend, ist er sowohl im privaten Umgang als auch im akademischen Betrieb ein Vorbild für eine integre Persönlichkeit und einen humanistischen Akademiker im besten Sinne.

Stefan Berger wurde am 9. September 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

nes

