

I/2025 • 69. Ausgabe



GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanz
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

besonders bei Chemikerinnen und Chemikern im Syntheselabor kann man eine zunehmende Vorliebe für die Benchtop-NMR-Geräte bemerken. Nach dem Motto: Wenn ich das Handy mit allem Wissen sowieso überall zur Hand habe, warum sollte ich dann noch für eine analytische Methode ins Servicelabor gehen müssen? Die neuen Geräte sind platzsparend, einigermaßen mobil und können etliche 1D- und 2D-Standard-Experimente. Ist demnach also die traditionelle NMR-Abteilung überflüssig und jedes Syntheselabor stellt sich einfach so ein praktisches Vehikel ins Labor? Hier stellt sich die Frage, welches die prinzipiellen Aufgaben eines NMR-Spektrometers sind – also eindeutige Validierung einer Struktur oder rasche Analyse bei bestmöglicher Empfindlichkeit. So gesehen kann die Benchtop-NMR also bereits ziemlich viel für die Tagesroutine leisten und die etablierten NMR-Labore können letztlich nur noch mit Empfindlichkeit und Hochauflösung aufwarten.

Wird die klassische NMR-Abteilung damit aussterben? In der täglichen Praxis macht einem manchmal dann doch die Physik einen Strich durch die Rechnung und man bekommt Aufspaltung höherer Ordnung, wo man sie nie erwartet hätte. Chemikerinnen und Chemiker möchten die Synthese-Erfolge letztlich vielleicht dann doch lieber mit „schöneren“ Spektren bei hohem Feld beweisen. Es bleibt also abzuwarten, ob sich diesbezüglich ein Kulturwandel vollziehen wird.

In diesem Sinne wünscht einen erholsamen Sommer:

Ihre MARS-Redaktion

Inhalt

Andrea Porzel zum 70. Geburtstag	2
Zum 75. Geburtstag von Angela Gronenborn	3
Erkenntnisse aus dem R-NMR-Projekt.	4

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. Maik Icker (*mi*, Universität Leipzig, maik.icker@uni-leipzig.de), Dr. Johannes Liermann (*jl*, Universität Mainz, liermann@uni-mainz.de), Dr. Nils Schlörer (*nes*, Universität Jena, nils.schloerer@uni-jena.de).

Aus der Fachgruppe

Andrea Porzel zum 70. Geburtstag

Als Doktorand habe ich Anfang der 1980er Jahre Andrea Porzel auf Meetings der Magnetischen Resonanzgruppe der DDR kennengelernt, die damals noch unter Fittichen deren Physikalischen Gesellschaft organisiert wurden. Andrea fiel nicht nur als eine der wenigen Frauen in der Männerdomäne NMR auf, sondern auch weil sie sich in den Runden selbstbewusst äußerte und Fragen stellte, und gelegentlich auch mit Nachdruck.

Nach der Promotion hatte ich das Glück, an einem der damals wenigen Spektrometer mit supraleitenden Magnet arbeiten zu können. Das wurde damals an der Akademie der Wissenschaften der DDR in einem Leipziger Institut installiert mit dem Hintergrund der kommerziellen Exportproduktion von deuterierten Lösemitteln. Es dauerte nicht lange und Andrea war am Telefon mit der Frage, ob nicht etwas Messzeit übrig wäre?

Aufgewachsen in Sachsen-Anhalt, hatte sie inzwischen in der Gruppe von Prof. Großmann an der TU Dresden, die sich mit Phosphor-Chemie beschäftigten, promoviert.

Meinen Hinweis, dass das Spektrometer fast ausgebucht sei, wiegelte sie mit der Bemerkung ab, dass es ja auch noch Nächte und Wochenenden gäbe. Und Weihnachten und Ostern sowieso. Und so war Andrea häufig unser Messgast in der Leipziger Permoserstraße.

Unvergessen die Episode, als es bei mir zu Hause nachts gegen halb 12 klingelte (ich wohnte nur einige Häuserblocks entfernt): am Spektrometer wäre etwas nicht in Ordnung, und ob ich mal kommen könnte... Wir haben den Fehler gemeinsam gefunden.

Andrea ist über den Umweg über das Arzneimittelwerk Dresden dann auf eine Ende der 1980iger Jahre freigewordene NMR-Stelle an dem Akademie-Institut für Pflanzenbiochemie in Hal-



le/Saale gelangt und konnte sich damit selbst vor Ort mit NMR und deren Technik beschäftigen. Dort (jetzt: Leibniz-Institut für Pflanzen-Biochemie) wirkte sie als Laborleiterin weit über 30 Jahre lang und trug zu zahllosen Publikationen der Naturstoff- und Wirkstoff-Forschung bei.

Trotz der Nähe zur benachbarten Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg war sie im NMR-Laborleben aber mehr oder

weniger als Einzelkämpferin aufgestellt. Trotz dessen (oder: gerade deshalb?) sucht sie immer wieder Kontakt zu Fachkollegen im näheren oder weiteren Umfeld. Gegenseitige Laborbesuche gehörten bei uns regelmäßig zum Programm, auch gelegentliche gemeinsame Besuche in anderen NMR-Laboren, um die Spektrometer der Gastgeber in der Messpraxis zu erkunden.

Sie organisierte zu DDR-Zeiten als Impulsgeberin auf privater Basis NMR-Fachseminare, z.B. in Berlin-Adlershof und natürlich auch im eigenen Institut.

Nach der deutschen Wiedervereinigung war sie auf fast allen jährlichen GDCh-FGMR-Diskussionstagungen zu Gast. Auch die „Buddrus“-Diskussionstagungen zu „Praktischen NMR-Problemen“ in Bochum und Erlangen bereicherte sie aktiv. Schließlich übernahm sie sogar die Organisation von Folgeveranstaltungen in ihrem Institut in Halle selbst mit großen Engagement.

Nun erfährt man mit Erstaunen: Andrea Porzel ist 70 Jahre „jung“ geworden und man kann sich nicht vorstellen, dass sie bereits aus dem aktiven Berufsleben ausgeschieden ist.

Egal, welchen Unruhestand sie angetreten hat: Danke, Andrea Porzel, für dein Wirken in der NMR-Gemeinde!

Matthias Findeisen

Nachgefragt

Zum 75. Geburtstag von Angela Gronenborn



Wie und wann sind Sie zur Magnetresonanz gekommen?

In den siebziger Jahren durch meine Diplom- und Doktorarbeit bei Harald Günter an der Universität zu Köln.

Was bedeutet Mag-

netresonanz für Sie in einem Satz?

Es ist die beste Methode, die atomaren Eigenschaften von Molekülen zu bestimmen.

Was sind Ihre Lieblingsbeschäftigungen außerhalb der Magnetresonanz?

Klassische Musik hören und ein Museum für moderne Kunst besuchen.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment oder Lieblingsspektrometer?

Nein, das ist so, als würde man gefragt, ob man ein Lieblingskind hat!

Was hat Ihnen an Ihrer Arbeit am meisten Spaß gemacht?

Meine Arbeit ist nicht Arbeit – ich habe das Privileg, bis zum heutigen Tag meiner Leidenschaft nachgehen zu können.

Was würden Sie heutigen Studierenden besonders ans Herz legen

Für alle Studierenden ist es wichtig, dass sie ein Gebiet in der Forschung finden, welches sie total in den Bann zieht. Jede Antwort auf eine wissenschaftliche Frage beinhaltet hundert neue Fragen. Ich hoffe sehr, dass Neugier und ständiges Hinterfragen das Herzblut aller Studierenden sind und bleiben und sie niemals aufhören, Fragen zu stellen.

Kurzbiographie in Stichpunkten:

In Köln Chemie und Physik studiert und promoviert; in London (MRC) die schönste und aufregendste wissenschaftliche Zeit verbracht; in München (Martinsried) meine Liebe zu Bergen und Seen vertieft; fast zwei Jahrzehnte eine enorm produktive Zeit mit phantastischen Kollegen am NIH erlebt; ein neues Institut in Pittsburgh aufgebaut; voller Dankbarkeit für alle Studierenden und Mitarbeiter, die über die Jahre in meinem Arbeitskreis geforscht haben; und immer noch begeistert davon, dass ich bis heute als Wissenschaftler arbeiten darf.

Angela Gronenborn (Bethesda, MD) ist am 11. Mai 75 Jahre alt geworden. Wir gratulieren sehr herzlich!



NMR@home und NMR-CO₂ Erkenntnisse aus dem R-NMR-Projekt



Vor der COVID-19-Pandemie wurde der Großteil der NMR-Experimente direkt in den Forschungsinstituten vor Ort angesetzt. Durch die pandemiebedingten Reise- und Zugangsbeschränkungen in den Jahren 2020–2021 änderte sich dieses Bild grundlegend. Unsere Erfahrungen

in dieser Zeit haben gezeigt: Fernzugriff (remote-access) auf NMR-Instrumente ist technisch möglich – allerdings besteht Optimierungsbedarf bei den Zugangsprotokollen.

Die Weiterentwicklung von Fernzugriffsmöglichkeiten bietet zahlreiche Chancen. NMR-Analytik kann auch dann betrieben werden, wenn Nutzer:innen keinen direkten Zugang besitzt. Solche Möglichkeiten des remote-access reduziert Reisetätigkeit. Letztlich entwickelt sich die Vision eines NMR@home, die besseren Zugang für Forschende aus Ländern mit geringerem Einkommen und insbesondere auch eine verbesserte Vereinbarkeit von Familie, Pflegeverantwortung und wissenschaftlicher Tätigkeit ermöglicht.

Im Rahmen des R-NMR-Projekts kooperiert ein europaweites Netzwerk aus 26 NMR-Infra-

Country:

CO₂ equivalents: 80 g/kWh

Site setup			CO ₂ equivalents	Boil off		Power consumption		
Magnet	Console	Helium supply		Helium	Nitrogen	Spectrometer	He liq	N liq
800 (4K)	Solid state	Remote (USA)	15462 kg/year	7.9 L/week	100 L/week	3.8 kW	0.66 kW	0.30 kW
600 (4K)	Liquid state	Remote (Qatar/Algeria)	8479 kg/year	2.7 L/week	50 L/week	2.1 kW	0.23 kW	0.15 kW
600 (4K)	Liquid w/cryo	Remote (Qatar/Algeria)	45899 kg/year	2.7 L/week	50 L/week	13.7 kW	0.23 kW	0.15 kW
1000 (4K)	Solids & liquids	Local coldhead/pulsed tube	13337 kg/year	13.4 L/week	67 L/week	3 kW	0.93 kW	0.20 kW
1200 (2K)	Solids & liquids w/cryo	Local turbine	38072 kg/year	42.0 L/week	150 L/week	9.3 kW	1.56 kW	0.45 kW
Total					3584 L/year	21758 L/year		

Calculation details

Item	Consumption	Conversion	Energy	CO ₂ equiv
He boil off (1200 MHz)	42.0 L/week	6.22 kWh/L 368 gCO ₂ /kWh (Germany)	13636 kWh/year	5018 kg/year
N boil off (1200 MHz)	150.0 L/week	500 Wh/L 368 gCO ₂ /kWh (Germany)	3913 kWh/year	1440 kg/year
Console (Solids & liquids w/cryo)	8.8 kW	368 gCO ₂ /kWh (Germany)	81524 kWh/year	30001 kg/year
Magnet pumping	500 W	368 gCO ₂ /kWh (Germany)	4383 kWh/year	1613 kg/year
Total			103456 kWh/year	38072 kg/year

Abb. 1: Beispiel des Online-Rechners zur Bestimmung des CO₂-Fußabdrucks

strukturen unter der Leitung von Prof. Dr. Harald Schwalbe vom Zentrum für biomolekulare magnetische Resonanz (BMRZ) der Goethe-Universität Frankfurt, um den Fernzugriff systematisch zu entwickeln, standardisieren und nachhaltig zu etablieren.

Zu Projektbeginn wurde ein umfassender Überblick über die NMR-Landschaft in Europa erstellt – basierend auf Umfragen unter NMR-Facility-Manager:innen und Nutzer:innen. Bereits mehr als die Hälfte der Einrichtungen verfügte über Fernzugriffsmöglichkeiten. Die häufigsten Hindernisse bei der Implementierung waren technische Komplexität und IT-Sicherheitsbedenken.

In den anschließenden Arbeitspaketen entwickelten wir standardisierte Prozesse für den Fernzugriff auf NMR-Infrastrukturen, vom Versand der Probe über die Vorbereitung der Messung, die Durchführung der Messung und der Datenarchivierung – sowohl für Flüssig- als auch für Festkörper-NMR.

Im Rahmen unserer Arbeit haben wir zahlreiche Aspekte rund um Fernzugriffs-NMR-Messungen untersucht und diskutiert, wie zum Beispiel: Probenversand, Softwareprogramme für Fernzugriff, Standardisierung von Messprotokollen, Datenschutzaspekte, Standardisierung von Experimenten und ihren Metadaten und Datenarchivierung. Weiterhin ist die Etablierung unterschiedlicher Nutzergruppen wichtig, die je nach Erfahrung und Expertise unterschiedliche Rechte beim (Fern) Zugriff auf die NMR-Geräte haben. Hieraus sind Materialien entstanden, die auf unserer [Homepage](#) heruntergeladen werden können.

Ein weiterer Schwerpunkt war die Quantifizierung des CO₂-Fußabdrucks von NMR-Einrichtungen. Hierzu haben wir folgende Aspekte betrachtet: die An- und Abreise von Proben und Nutzer:innen, Klimatisierung, Stromverbrauch der NMR-Geräte und der Einsatz von flüssigen Gasen (Helium und Stickstoff) zur Kühlung. Zur Unterstützung nachhaltiger Entscheidungen wur-

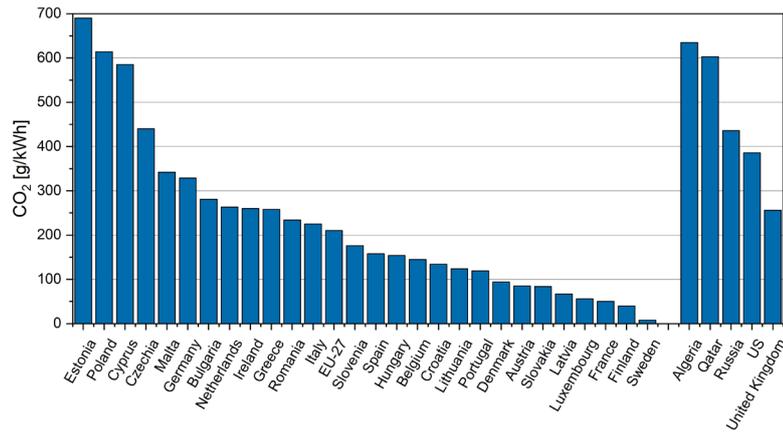


Abb. 2: CO₂-Ausstoß pro kWh für Länder der EU und andere ausgewählte Länder in 2023.

Quelle: [European Environment Agency](#) und [our world in data](#)

de ein Online-Tool entwickelt, das es Einrichtungen erlaubt, den CO₂-Fußabdruck basierend auf Geräteinsatz und Verbrauch von Kühlmitteln zu schätzen. Dieses [Werkzeug steht öffentlich zur Verfügung](#) (Abb. 1). Ein zentrales Ergebnis der Analyse zeigt, dass der CO₂-Ausstoß stark vom nationalen Strommix abhängt (Abb. 2).

Besonders wirksam zur Reduktion des Fußabdrucks ist die Rückgewinnung von flüssigem Helium direkt vor Ort. Dies spart auf lange Sicht nicht nur Kosten und sichert die Verfügbarkeit von flüssigem Helium, sondern vermeidet auch CO₂ durch die Verlagerung der Verflüssigung nach Europa, welches weniger fossile Brennstoffe zur Stromgewinnung verwendet als zum Beispiel die USA oder der Nahe Osten.

Das R-NMR Projekt endet nun, dennoch bleiben die entwickelten Materialien sowie Videos von einer Vielzahl von Workshops erhalten (auf unserer Homepage sowie auf Zenodo und YouTube).

Julia Wirmer-Bartoschek

