

# Newsletter MAR

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der  
Gesellschaft Deutscher Chemiker



Mai 2005

04 / 2005

## Fragebogenaktion

Nachdem nun auch noch einige Nachzüglerbeiträge eingetroffen sind, erweist sich unsere kürzlich in Angriff genommene Fragebogenaktion auf den ersten Blick als sehr erfolgreich. Etwa 80% Rücklauf sind eine gute Basis für unsere vorgesehene Analyse und Bewertung. Deshalb an dieser Stelle schon Mal herzlichen Dank an alle, die tatkräftig bei der Beschaffung des Materials mitgewirkt haben. Naturgemäß wird die Auswertung, aber auch die Aufarbeitung einige Zeit in Anspruch nehmen.

Wir werden Sie im Rahmen des Newsletters über die Fortschritte auf dem Laufenden halten.

stb

## Fachgruppentagung 2005

*Liebe Mitglieder der Fachgruppe Magnetische Resonanz,*  
im Namen des Fachgruppenvorstands möchten wir Sie herzlich zur diesjährigen Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanz nach Mainz ans MPI für Polymerforschung einladen.

Vom 26. bis 29. September wird sich unsere Tagung insbesondere zwei Schwerpunkten widmen:

"NMR meets Theory" - Wie Spektroskopie und theoretische Rechenmethoden zum gegenseitigen Nutzen miteinander verbunden werden können.

"High-Field Bio-NMR Symposium" - Vortragsreihe und offene Podiumsdiskussion zum aktuellen Stand und zu Zukunftsperspektiven der (biologischen) Höchstfeld-Spektroskopie in Deutschland in Zusammenarbeit mit der DFG.

Dies alles ist in ein breites Vortrags- und Posterprogramm eingebettet, wie Sie der

angehängten Broschüre entnehmen können. Ein Tutorial zu theoretischen Methoden, Vorträge der Ernst-Preisträger sowie ein Konferenzdinner werden natürlich nicht fehlen. Für lebendige Diskussionen und regen Austausch sollte damit gesorgt sein.

Anmeldungen von Teilnehmern und Beiträgen sind online über die Internetseite der Tagung möglich (**bis zur gemeinsamen Deadline am 15. Juli 2005**):

<http://www.mppi-mainz.mpg.de/~fgmr>

Auf Wiedersehen in Mainz!  
Ingo Schnell & Gunnar Jeschke

Dear Magnetic Resonance Colleague,

Mark your calendars: thanks to the generous support of the Minerva Foundation (Münich), a Gentner workshop devoted to all areas of Magnetic Resonance (MR) is due to take place next December 11-15, 2005 in Eilat, by the shores of Israel's Red Sea Riviera.

The objective of this meeting is to assemble experts on biomolecular solution and solid state NMR, NMR hardware, small molecule and materials NMR, polymer NMR spectroscopy, in vivo NMR and MRI, diffusion-weighted MR, ODMR and pulsed EPR, to discuss the latest conceptual and technical advances as well as the methodological frontiers of our field. A world-class series of experts has confirmed their prospective participation in the meeting. Yet nearly half the program remains to be filled up. We are now looking forward to your prospective contribution, from which the remaining lectures and all contributed poster presentations will be selected by the workshop's Program Committee. For attendees coming from

Israel and Germany, the generous support received from our sponsors will make the expense of attending this symposium largely symbolic. Yet at the same time, this implies that the number of Binational attendees we can accept will be restricted to ca. 100. So don't wait too long! Our capacity is limited, and deadlines will be honored. Registration preferences will be given to poster & talk presenters, staying on-site for the duration of the Workshop. Further details on the workshop can be found at the meeting's web site:

<http://www.weizmann.ac.il/conferences/MR2005>. We look forward welcoming you in Eilat; don't hesitate to contact us with your questions and suggestions,

Dr. Marc Baldus  
Co-organizer,Germany  
MPI for Biophysical  
Chemistry  
37077 Göttingen  
Germany

Prof. Lucio Frydman  
Symposium Coordinator,  
Israel  
Weizmann Institute  
of Science  
76100 Rehovot  
Israel

## Prof. Berthold Thomas – 65. Geburtstag

Am 16.6.2005 feiert Professor Berthold Thomas seinen 65ten Geburtstag. Nach der Promotion und Habilitation an der TU Dresden zur  $^{31}\text{P}$ - und  $^{15}\text{N}$ -NMR-Spektroskopie an Phosphazenen wechselte er 1985 an die TU Bergakademie Freiberg. Hier wirkte er zunächst als Dozent für Anorganische und Silikatchemie, wurde später zum Dozenten für Analytische Chemie – Strukturchemie umberufen und hat seit 1992 den Lehrstuhl für Strukturchemie und Molekülspektroskopie inne. Während dieser Tätigkeit baute er an der Bergakademie Freiberg eine moderne NMR-Spektroskopie auf. Seine Forschungsschwerpunkte sind bei Struktur-Eigenschaftsuntersuchungen an silikatischen Gläsern, der Festkörper-NMR an Cyclophosphazenen, aber auch bei Strukturuntersuchungen an Braunkohlen und deren Abbauprodukten zu finden.

Besonders viel Wert legt Berthold Thomas auf seine Aufgaben als Hochschullehrer. Vorlesungen zu halten ist ihm stets Freude und Berufung. In seiner unnachahmlichen Art hat er es verstanden, den Studenten den Lehrstoff verständlich und interessant zu vermitteln.

Wir wünschen ihm für den wohlverdienten Ruhestand alles Gute.

Erica Brendler

## GDCh-Jahrestagung

Im Rahmen der GDCh-Jahrestagung 2005 „Chemie schafft neue Strukturen“ vom 11. - 14.9.2005 in Düsseldorf findet am 14.9.2005 ein gemeinsam mit der CIC gestaltetes Symposium statt:

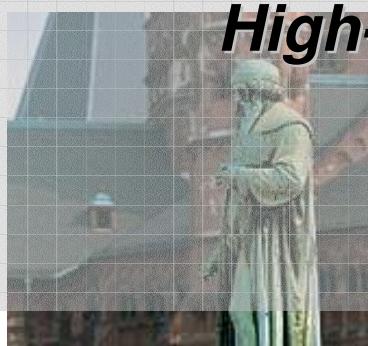
HS 5L	Gemeinsames Symposium der Fachgruppen Chemie-Information-Computer Magnetische Resonanzspektroskopie <i>Structural Biology</i>
13.40	ReSpect: Calculating NMR and EPR Parameters with a Relativistic Touch Kaupp, M., Würzburg/D, Arbuznikov, A. V., Würzburg/D, Pevickine, R., Würzburg/D, Malkina, O. L., Bratislava/SK, Malkin, V. G., Bratislava/SK, Malkin, I., Würzburg/D, Asher, J., Würzburg/D, Kacprzak, S., Würzburg/D, Straka, M., Würzburg/D, Hrobank, P., Bratislava/SK, Repisky, M., Bratislava/SK, Patrakov, A., Würzburg/D
14.20	Prediction of molecular alignment in dilute liquid-crystalline phases Zweckstetter, M., Göttingen/D, Korukottu, J., Göttingen/D, Haberz, P., Göttingen/D, Schnell, J.R., Boston/USA, Hummer, G., Bethesda/USA, Griesinger, C., Göttingen/D, Chou, J.J., Boston/USA, Bax, A., Bethesda/USA
14.40	Automation of Protein NMR Structure Determination, Problems and Solutions Görgwald, W., Regensburg/D
15.20	Electron microscopy in structural biology Kühlbrandt, W., Frankfurt/D
15.40	Proteins in Action Monitored by TR-FTIR Gerwert, K., Bochum/D
16.00	Molekulare Maschinen bei der Arbeit: Röntgenkristallographie an Multiproteinkomplexen Kettenberger, H., München/D

Zu fast allen Jahrestagungen und Symposien können noch Poster in Form von Abstracts bis zum **17.05.2005**, Last-Minute-Poster bis zum **01.08.2005** eingereicht werden. Bitte beachten Sie die Hinweise für Autoren auf der Webseite der Tagung.

etkh

**Zu guter Letzt** 😊

„.... diese Informationen stehen aber auch alle auf dem A0-Aushang im Praktikum, da können Sie das nochmal nachlesen“. „Ja, das habe ich gesehen. Aber wissen Sie, ich lese keine Aushänge, das ist so unpersönlich!“



**GDCh Magnetic Resonance Division  
27<sup>th</sup> Discussion Meeting**

***High-Field Bio-NMR Symposium  
&  
"MR meets Theory"***



MPI for Polymer Research, Mainz  
September 26-29, 2005



## Invitation

The GDCh Magnetic Resonance Division (FGMR) cordially invites you to participate in its 27<sup>th</sup> annual discussion meeting which will this year be held at the Max Planck Institute for Polymer Research in Mainz on September 26-29. Topics of current interest in Magnetic Resonance Spectroscopy will be discussed and presented in lectures of invited speakers, contributed talks as well as on posters.

As a special event, the meeting includes a symposium dedicated to high-field NMR on biological systems, which is concluded by an open podium discussion about future perspectives, chances and limits of NMR spectroscopy.

Moreover, the meeting places a particular emphasis on the crosslinks and the interplay between magnetic resonance and theoretical as well as computational approaches.

## Tentative Programme

Monday, 26.9.	9	Ernst Award Lectures	NMR and Theory	Small Molecules	Bio-Solids	Coffee	Coffee	Coupled Techniques	EPR 1	High-Field Bio-NMR Symposium 1	High-Field Bio-NMR Symposium 2	High-Field Bio-NMR Symposium 3	Lunch	Coffee	Coffee	Poster 1 & Dinner	Poster 2 & Coffee	Mitgliederversammlung	Conference Dinner	Closing
	10																			
	11																			
	12																			
	13																			
	14																			
	15																			
	16																			
	17																			
	18																			
	19																			
	20																			
	21																			
	22																			

## Sessions

In eight sessions, various speakers present current results and concepts in the fields of NMR and theory, small molecules, bio-solids, functional materials, imaging, coupled techniques, as well as special issues of EPR.

### High-Field Bio-NMR Symposium

In collaboration with the DFG, the meeting hosts a special symposium on the status and the future of high-field NMR on biological systems. The symposium is concluded by an open podium discussion where NMR spectroscopists discuss the potential of NMR with experts on other, complementary and competing, methods of structure determination.

## Call for Contributions

Contributors are invited to present recent research progress on posters. In addition, each session will include at least two contributed talks. Abstracts can be submitted via <http://www.mpiip-mainz.mpg.de/~fgmr>. Online submission will be activated on April 1, 2005. Deadline is on **July 15, 2005**.

## Ernst Awards

The GDCh magnetic resonance division calls for applications for Ernst Awards. To be eligible, applicants must be the main contributory author of a paper concerning some aspect of magnetic resonance that was published or accepted in a peer-reviewed journal during the period June 1, 2004 - July 1, 2005, and they must not have completed their PhD studies at the time that paper was submitted. Applicants should send a pdf file of their paper or manuscript as an email attachment to Gunnar Jeschke ([jeschke@mpiip-mainz.mpg.de](mailto:jeschke@mpiip-mainz.mpg.de)) before the deadline of **July 15, 2005**. In addition, a short statement is required from the supervisors, indicating what was the contribution of the applicant to the work described in the paper.

## Local Organisation

The meeting is organised by Gunnar Jeschke ([jeschke@mpiip-mainz.mpg.de](mailto:jeschke@mpiip-mainz.mpg.de)) and Ingo Schnell ([schnelli@mpiip-mainz.mpg.de](mailto:schnelli@mpiip-mainz.mpg.de)). Please contact for additional information or requests.

## Venue

The meeting will take place at the Max Planck Institute for Polymer Research in Mainz (<http://www.mpiip-mainz.mpg.de>).

## Transport

In Mainz, the MPI for Polymer Research can be reached via bus line 68 from the main station, which runs in intervals of 20 minutes during daytime. Please use the stop at "Ackermannweg". Alternatively, several bus lines provide service to the stop at "Friedrich-von-Pfeiffer-Weg", from which the MPI can be reached within a ten minutes' walk. See also directions given on the homepage at <http://www.mpiip-mainz.mpg.de> > Institute > How to find.

## Accommodation

Participants are requested to book their hotel rooms on their own, for example at the following hotels:

- Hotel Königshof, Schottstrasse 1-5, 55116 Mainz  
Tel. +49 6131 96011-0, Fax +49 6131 611271  
<http://www.info-mainz.de/hotel-Koenigshof>
- Central Hotel Eden, Bahnhofsplatz 8, 55116 Mainz  
Tel. +49 6131 276-0, Fax +49 6131 276-276  
<http://www.lodging-germany.com/mainz/ti-eden.htm>
- Hotel Ibis, Holzhofstrasse 2, 55116 Mainz  
Tel. +49 6131 2470, Fax +49 6131 234126  
<http://www.info-mainz.de/gastst/ibis>

A complete list of hotels in Mainz is available via <http://www.info-mainz.de/hotels/search.php?stadt=MZ>.

## Registration & Fees

Participants need to register online at <http://www.mpiip-mainz.mpg.de/~fgmr>. Registration will be open from **April 1 till July 15, 2005**.

Fees are € 120 for GDCh/FGMR members, € 160 for non members, € 40 for students, € 0 for student GDCh/FGMR members, € 40 for the tutorial, and € 30 for the conference dinner (free for student GDCh/FGMR members). Conference fees include Tuesday and Wednesday lunches as well as Tuesday dinner at the conference location.