



Ernst Awards 2011

Even in 2011 we are happy to call for papers to continue our tradition with the "Ernst Awards". These awards are given to eminent Ph.D. students from Germany and abroad.

The prize money is

500€

(besides travelling and accomodation to participate the group meeting).

Candidates should be Ph.D. students on the basis of their genuine published work. The papers must have been refereed and accepted by an international scientific journal. Because this year our Annual Meeting is embedded in the EUROMAR in Frankfurt (have you registered yet ? If not: <http://euromar2011.org/>) from August 21st till August 25th the deadline for submission of manuscripts is **June 1st, 2011**.

All manuscripts will be evaluated by members of a scientific committee under the guidance of Dres. H. Kogler and W. Jahnke and should be send in electronic form to

Dr. E. Haupt
erhard.haupt@uni-hamburg.de

The Ernst Awards will be presented during the Annual Meeting of the Discussion Group in Frankfurt and involves a lecture by the winners.

EUROMAR 2011 / Fachgruppentagung 2011

The EUROMAR Conference, the main meeting of the European magnetic resonance community, will take place this

year in Frankfurt from 21.-25. August 2011. It will be held in conjunction with the 33rd Discussion Meeting of the Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh). Its mission is to communicate new methodological approaches. The website is open for registration now, please visit <http://www.euromar2011.org/> for more information and details. For members of the FGMR there are reduced fees; especially for young scientists. Additionally, the GDCh has donated some student grants (Details see webpage). As usual at Discussion Meetings of the FGMR, the Ernst-Awards will be given to excellent young students in a plenary session. So please send in applications for the Ernst Award in time!

In 2011 the EUROMAR Conference will be additionally accompanied for the first time by the European Federation of EPR Groups (EFEPR) Meeting, a triennial meeting of all European EPR Groups, which was also chosen as the main conference of the International EPR Society. So we hope to have a very good mix of EPR and NMR scientist at the meeting in Frankfurt with fruitful interactions and mixed sessions.



There is a broad selection of topics covered by the invited plenary and session speakers, but be aware that ½ of the slots

for talks will be finally selected by abstracts handed in it time! We, the Biological Magnetic Resonance Center in Frankfurt (BMRZ) as local organizers, hope for a stimulating and inspiring conference in Frankfurt. We expect more than 600 participants from all fields of magnetic resonance, exhibitions from all major companies in the field, and are hoping to see a strong participation of our FGMR members at the conference!

tp



SMASH 2011

Die SMASH 2011, die wichtigste Klein-Molekül-NMR Tagung, findet in diesem Jahr wieder in Chamonix statt (18.-21. September 2011). Vielleicht ist das für einige Interessierte eine gute Gelegenheit, sich über Neuigkeiten im Bereich der "Small Molecules" zu informieren. Wie schon die Jahre zuvor zeichnet sich diese Tagung besonders durch einen engen Kontakt zwischen Industrie- und Hochschulspektroskopikern aus. Eine exzellente Gelegenheit Kontakte zu knüpfen!

Bei der Auswahl der Sessions und Workshops hat diesmal ein Vorstandsmitglied maßgeblich Einfluss nehmen können und uns bekannte Interessen eingebracht (siehe Flyer). In diesem Jahr wird es

eine große Anzahl an Vorträgen geben, um die man sich durch Einreichung eines Abstracts auf www.smashnmr.org bewerben kann.

Wir freuen uns sehr auf Ihre Abstracts und hoffen, daß das Programm Sie zur Teilnahme verführt.

cmt

Industrie-Treff bei der Fachgruppentagung/EUROMAR 2011

Die Fachgruppe möchte den Kreis der industriellen Anwender stärken und eine noch bessere Plattform für den wissenschaftlichen Austausch unter Kollegen aus der Industrie bieten. Dies betrifft insbesondere die NMR-Spektroskopie mit ihren Anwendungen in der Analytik, Strukturbioogie und in Metabolismus-Studien. Hier besteht auf vielerlei Ebenen der Bedarf nach Diskussion und Erfahrungsaustausch, den die Fachgruppe noch stärker als bisher fördern möchte.

Ein persönliches Kennenlernen ist die beste Voraussetzung für dauerhaften Kontakt. Deshalb möchten wir alle in der Industrie arbeitenden Kollegen zu einem Treffen beim Mittagessen einladen. Dieses soll im Rahmen der Fachgruppentagung stattfinden, die dieses Jahr zusammen mit der EUROMAR vom 21. bis 25. August 2011 in Frankfurt stattfinden wird. Vorläufig ist **Montag, der 22.8.2011** für das gemeinsame Mittagessen geplant. Näheres wird im Programm der EUROMAR zu finden sein.

Wir freuen uns auf Ihre Teilnahme!

Till Maurer (Genentech)

Wolfgang Jahnke (Novartis)

DFG

Die DFG hat, auf Anregung des Apparatenausschusses und aufgrund eines Rundgespräches nach der Fachgruppen-

tagung in Münster, neue Empfehlungen zu Nutzung und Betrieb von NMR-Spektrometern herausgegeben.

Dabei wurde besonders der Themenkomplex "Zentralisierung von NMR-Spektrometern in NMR-Serviceabteilungen" berücksichtigt. Näheres entnehmen Sie bitte dem Anhang.

etkh

Bruker Prize 2011 der RSC ESR Group geht an Prof. Thomas Prisner



Seit 1986 zeichnet die ESR-Gruppe der Royal Society of Chemistry jährlich einen Wissenschaftler mit der Bruker-Preis-Vorlesung aus. Dieser von der Bruker BioSpin GmbH gesponserte Preis wird auf der internationalen Jahrestagung der ESR RSC Group verliehen- die in diesem Jahr vom 3.-7. April in York stattfindet. Der diesjährige Preis geht an den stellvertretenden Vorsitzenden unserer Fachgruppe, Prof. Thomas Prisner von der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt/Main für bedeutende Beiträge zur Anwendung der ESR-Spektroskopie an chemischen und biologischen Systemen.

Die Forschung von Thomas Prisner ist methodenorientiert, wobei die Hochfeld-EPR-Spektroskopie, dynamische Kernpolarisation und Abstandsmessungen zwischen Elektronenspins die hauptsächlichen Entwicklungsrichtungen sind. Seine Anwendungsarbeiten sind vorwiegend biologisch orientiert, wobei Elektronentransferproteine, die RNA-Ligand-Wechselwirkung und Transport und Signalübertragung über biologische Membranen hinweg die Schwerpunkte bilden. Thomas Prisner hat unser Forschungsgebiet auch durch die

Organisation einer internationalen EPR-Sommerschule 2005 in Wiesbaden und mehrerer nationaler und internationaler Konferenzen gefördert.

Herzlichen Glückwunsch zu dieser Auszeichnung!

Gunnar Jeschke

5. Sommerschule "Advanced EPR" der European Federation of EPR Groups

Vom 5.-12. September 2010 haben sich 80 Studenten und 22 Vorlesende in Konstanz am Bodensee zu einer Sommerschule zum Thema fortgeschrittener EPR-Techniken getroffen. Gastgeber waren Malte Drescher (Universität Konstanz) und Gunnar Jeschke (ETH Zürich). Neben den 27 von europäischen Wissenschaftlern gehaltenen Vorlesungen (45 min + 15 min Diskussion) über die Grundlagen der EPR-Spektroskopie und ausgewählte Anwendungsfelder waren die Eröffnungsvorlesung von Jack Freed (Cornell University) über "EPR und Proteindynamik" und die Spezialvorlesung von Brian Hoffman (Northwestern University) über Metalloproteine Höhepunkte der Schule.



Zusätzlich zu den Vorlesungen wurden 27 Tutorien zu 12 verschiedenen Themen (je 75 Minuten, Gruppengröße etwa 10 Studenten) und 15 Spektrometer-Kurse zu 5 Themen (je 150 Minuten, Gruppengröße 3-4 Studenten) angeboten. Das Programm wurde von einer Postersession, einer allgemeinen Fragerunde mit den Dozenten,

einem Ausflug und einem Konferenzdinner auf der Insel Mainau abgerundet. Die Diskussionen nach den Vorlesungen und vor den Postern waren lebhaft.

Der Posterpreis ging an Philipp Spindler aus Thomas Prisners Gruppe an der Goethe-Universität Frankfurt/Main, der Preis für den besten Dozenten an Dr. Stefan Stoll, der selbst ein Absolvent der 1. European EPR Summer School 1999 in Caorle, Italien ist.

Gunnar Jeschke

Chemistry Year 2011

Wie Sie inzwischen sicher alle wissen, ist 2011 von der UNESCO zum *International Year of Chemistry* auserkoren worden.



Wenn Sie also eine geeignete, insbesondere öffentliche Veranstaltung anbieten, sollten Sie sie eventuell mit dem entsprechenden Label versehen. Sowohl das deutsche als auch das englische Label sind zur Nutzung freigegeben.

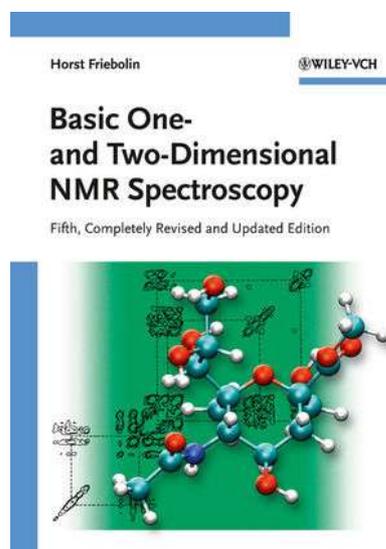
Sollten Sie planen, eine Veranstaltung extra zu diesem Ereignis anzubieten wäre es natürlich noch wichtiger, diese entsprechend anzukündigen.

Sowohl auf der deutschen Webseite (va.gdch.de/ijc2011/site/default.aspx) als auch auf der englischen Seite (www.chemistry2011.org/) können Sie ihre Veranstaltung selbstständig in einen Veranstaltungskalender eintragen und eine Fülle weiterer Informationen erhalten.

Bei weitergehenden Fragen ist ihnen sicher auch die GDCh-Geschäftsstelle, sofern möglich, gerne behilflich.

Corrigendum

Leider ist es doch passiert: bei der Buchbesprechung des "Friebolin" in MARS 35 ist das falsche Titelblatt der neuen Auflage abgebildet worden.



Ich bitte um Entschuldigung und Nachsicht



etkh

SSNMR

Hello everyone

I've set up a Twitter feed to alert people to the latest publications in solid-state NMR as soon as they appear online. This can be viewed at:

<http://twitter.com/solidstatenmr>

Please note that you don't have to sign up for a Twitter account in order to view this feed. If I've missed your latest publication, let me know at

SSNMRtwitter@gmail.com.

Best regards, Luke

--

Dr. Luke A. O'Dell
Stacie Institute for Molecular Science
National Research Council Canada
1200 Montreal Road, Building M-40
Ottawa, ON, K1A 0R6

EUROMAR 2011

8th EFEPR • 33rd FGMR

21.-25.08.2011

Frankfurt am Main, Germany

www.euromar2011.org

GOETHE
UNIVERSITÄT
FRANKFURT AM MAIN



BMRZ



Plenary Lectures

Ivano Bertini University of Florence, Italy
Robert Bittl Free University of Berlin, Germany
Geoffrey Bodenhausen EPFL, Switzerland; ENS, Paris, France
Jürgen Haase University of Leipzig, Germany
Mei Hong Iowa State University, USA
Wayne Hubbell UCLA, USA
Gunnar Jeschke ETH Zürich, Switzerland
Ann McDermott Columbia University, USA
Beat Meier ETH Zürich, Switzerland
Klaas Prüssmann ETH Zürich, Switzerland
Ilme Schlichting MPI for Medical Research, Heidelberg, Germany
Shimon Vega Weizmann Institute, Israel
Kurt Wüthrich The Scripps Research Institute, USA; ETH Zürich, Switzerland

Tutorial Lectures

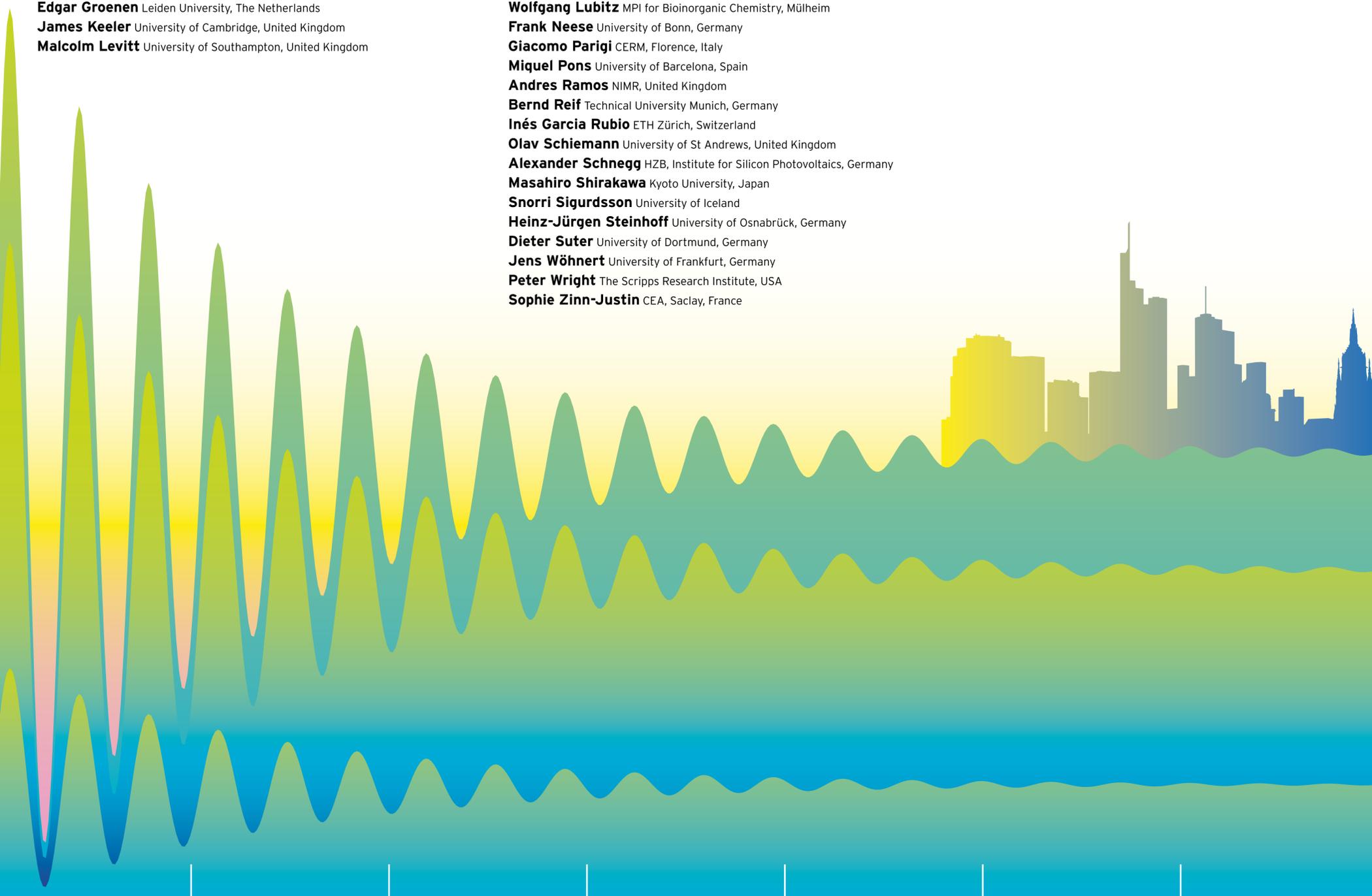
Crossing the Borders:

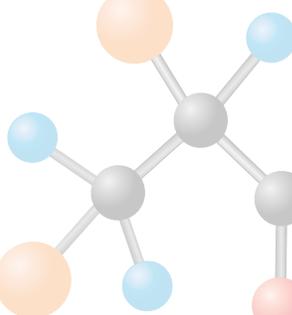
From Liquid and Solid State NMR to DNP and EPR

Marina Bennati MPI for Biophysical Chemistry, Göttingen, Germany
Edgar Groenen Leiden University, The Netherlands
James Keeler University of Cambridge, United Kingdom
Malcolm Levitt University of Southampton, United Kingdom

Session Lectures

Silvio Aime University of Torino, Italy
Hashim M. Al-Hashimi University of Michigan, USA
Bernhard Blümich RWTH Aachen University, Germany
Martin Blackledge IBS, Grenoble, France
Rolf Boelens Utrecht University, The Netherlands
Anja Böckmann CNRS, Lyon, France
Teresa Carlomagno EMBL, Heidelberg, Germany
Jack Freed Cornell University, USA
Lucio Frydman Weizmann Institute, Israel
Steffen Glaser Technical University Munich, Germany
Clemens Glaubitz University of Frankfurt, Germany
Daniella Goldfarb Weizmann Institute, Israel
Didier Gourier ENS, Paris, France
Robert R. Griffin MIT, USA
Angela M. Gronenborn University of Pittsburgh, USA
Ruth M. Gschwind University of Regensburg, Germany
Dariusz Hinderberger MPI for Polymer Research, Mainz, Germany
Alexej Jerschow NYU, USA
Walter Köckenberger University of Nottingham, United Kingdom
Anne Lesage CRMN, Lyon, France
Wolfgang Lubitz MPI for Bioinorganic Chemistry, Mülheim
Frank Neese University of Bonn, Germany
Giacomo Parigi CERM, Florence, Italy
Miquel Pons University of Barcelona, Spain
Andres Ramos NIMR, United Kingdom
Bernd Reif Technical University Munich, Germany
Inés Garcia Rubio ETH Zürich, Switzerland
Olav Schiemann University of St Andrews, United Kingdom
Alexander Schnegg HZB, Institute for Silicon Photovoltaics, Germany
Masahiro Shirakawa Kyoto University, Japan
Snorri Sigurdsson University of Iceland
Heinz-Jürgen Steinhoff University of Osnabrück, Germany
Dieter Suter University of Dortmund, Germany
Jens Wöhnert University of Frankfurt, Germany
Peter Wright The Scripps Research Institute, USA
Sophie Zinn-Justin CEA, Saclay, France





SMASH 2011

18-21 September 2011 Chamonix, France

Le Majestic Centre de Congrès

www.smashnmr.org



The SMASH 2011 NMR Meeting will once again take place in Chamonix, France. SMASH is a scientific meeting highlighting Small Molecule work. There is a broad focus of NMR applications, in addition to other analytical technologies, used for small molecule research. The small size of this meeting provides an excellent networking opportunity for students and professionals while attracting leading spectroscopists in this field. This Small Molecule NMR meeting brings together cutting-edge science from Academia and Industry in one international meeting.

SESSIONS & WORKSHOPS TOPICS

Optimising NMR in the Modern Laboratory

**University vs. Industry:
Challenges for Doing Innovative Science**

**Quantification in NMR without Using
Internal References**

**Critical Applications of NMR in
Pharmaceutical Development**

Automated Structure Verification and Elucidation

Optimisation of Small Molecule NMR Experiments

Further Progress in Solid State NMR

Advances in Determining Conformation/Configuration

Enhancements for Physical Organic Chemistry

**NMR Solutions to Combating Counterfeits and
Achieving Quality**



Students:

Thanks to several of our Sponsors, SMASH is pleased to offer substantial discounts for student attendees. Additionally, a select number of stipends are awarded to students and Post-Docs. Additional details can be found on the smashnmr.org website.

After Dinner Speaker:

Professor Ray Freeman University of Cambridge

This year upgraded talks will be added to the Program. Select posters will be chosen for Oral Presentations. Details and important dates can be found at www.smashnmr.org

Program Co-Chairs:

Dr. Christina Thiele,
Technische Universität Darmstadt

Dr. Michael Bernstein,
AstraZeneca R&D Charnwood



SMASH 2011 will be held at Le Majestic Centre de Congrès in Chamonix, France from the 18th-21st of September. Chamonix is located 85 km southeast of Geneva in the Alps, but don't worry the altitude is only about 1000 meters. Chamonix is a popular destination for skiing, in fact it was the site of the First Winter Olympics Games in 1924. There is plenty to see and do during the late summer too. You can take the Aiguille du Midi cable car to top station at 3824 meters. There is hiking, biking, mountain climbing, many other activities.

Empfehlungen zu Nutzung und Betrieb von NMR-Spektrometern

Auf Anregung des Apparateausschusses der DFG wurde zum Themenkomplex Zentralisierung von NMR-Spektrometern in NMR-Serviceabteilungen am 23. September in Münster ein Rundgespräch veranstaltet. Die Ergebnisse der Expertenrunde wurden vom Apparateausschuss beraten und darauf basierend werden folgende Hinweise und Empfehlungen zu Nutzung und Betrieb von NMR-Spektrometern formuliert:

Nutzungskosten:

Die DFG ermöglicht seit 2010, in DFG-Projekten Betriebs- und Folgekosten innerhalb der Hochschule / Institution zu finanzieren, soweit diese projektabhängig sind und nicht durch den generellen Betrieb entstehen. Finanzierbar aus DFG-Mitteln sind dabei anteilige Personalkosten, Verbrauchsmaterial für die Messungen usw.; Aufgabe der Grundausstattung und damit nicht finanzierbar bleiben Wartungskosten, Installation, Abschreibung etc.

Diese Erweiterung der Finanzierungsmöglichkeiten soll die Zentralisierung wissenschaftlicher Serviceleistungen unterstützen und die Tatsache berücksichtigen, dass wissenschaftliche Service-Einheiten zum Teil auch intern Nutzungsentgelte verlangen, um ihre Kosten zu decken.

NMR-Spektroskopie wird als Service meist im Bereich der Chemie angeboten. Dort ist es schon seit langem üblich, dass breit angewendete analytische Methoden, wie eben die NMR-Spektroskopie, aber auch diverse andere Techniken in Form eines organisierten Service verfügbar sind. Die gemeinsame Nutzung von (NMR-) Geräten ist etabliert und die Ressourcenplanung der Fachbereiche berücksichtigt üblicherweise die dabei auftretenden Personal- und Sachkosten.

In anderen Disziplinen und bei anderen Geräteklassen sind die Überlegungen zu gemeinsamer Nutzung noch weit weniger fortgeschritten, so dass dort die DFG mit der Neuregelung auch Anstöße z.B. zur Etablierung von Nutzerordnungen geben möchte.

Die DFG möchte explizit nicht in die Diskussion des Finanzierungsmodells der jeweiligen Fachbereiche eingreifen. Ob ein kostenfreier Zugang zu den Geräten durch ausreichende Grundfinanzierung möglich ist, oder ob Nutzungskosten, auch in verschiedenen Kategorien wie z.B. interne, externe und industrielle Nutzer, erhoben werden, muss abhängig von den jeweiligen Gegebenheiten und Strukturen entschieden werden.

Wenn ein wissenschaftlicher NMR-Service Nutzungsentgelte verlangt, so können Mittel dafür von den Nutzern im Rahmen von DFG-Projekten beantragt werden. Einmalig (!) ist dafür der DFG die Nutzerordnung der NMR-Einheit vorzulegen. Die so beantragten Nutzungskosten müssen nicht jedes Mal aufgeschlüsselt werden, sondern die Etablierung von Pauschalsätzen wird von der DFG angestrebt. Nutzungskosten können nur beantragt werden, wenn der entsprechende NMR-Service Nutzungsgebühren von allen Nutzern verlangt.

Gemeinsame Aufstellung:

Die Aufstellung von NMR-Spektrometern an einem gemeinsamen Ort befördert den Erfahrungsaustausch sowohl zwischen technischen als auch zwischen wissenschaftlichen Mitarbeitern, die die NMR-Geräte betreiben und/oder benutzen. Es wird nicht nur die Verbindung von Routinebetrieb und aktueller Forschung gestärkt, sondern die gemeinsame Aufstellung ermöglicht auch Synergieeffekte bei Wartung, Reparatur, Klimatisierung und Versorgung mit Kryogenen. Auch ohne zentral gesteuerte Messzeitvergabe wird die Auslastung der höherwertigen Ausstattung optimiert. Wenn dediziertes Personal die Messungen durchführt, werden die NMR-Spektrometer effizient genutzt und Geräteschäden durch Fehlbedienung vermieden.

Es erscheint unproblematisch, bei solchen gemeinsam aufgestellten Geräten die Nutzung auf bestimmte Gruppen aufzuteilen, die sich in Betriebs- und Nutzungsprofilen unterscheiden, z.B. bestimmte NMR-Geräte der Anorganischen Chemie bzw. der Organischen Chemie zuzuordnen.

Dedizierte Geräte für spezielle Anwendungen profitieren auch von der zentralisierten Aufstellung, können und sollten aber eher nicht in ein gemeinsames Nutzungsmodell eingeschlossen werden.

NMR-Expertise

Es ist unerlässlich, dass erfahrene NMR-Experten den effizienten Betrieb von NMR-Spektrometern garantieren. In NMR-Großgeräteanträgen muss immer erkennbar sein, wer über die notwendige Expertise und Erfahrung verfügt. Dies kann ein erfahrener NMR-Wissenschaftler ebenso wie ein erfahrener NMR-Leiter sein, wobei letzterer nach außen unter Umständen nicht so sichtbar auftritt, oft aber in der NMR-Community sehr wohl bekannt ist.

Fragen beantwortet: Dr. Christian Renner, Tel. 0228/885-2324, Email: Christian.renner@dfg.de

Assignment criteria for Ernst-Awards:

Who: Students, Diploma Students, PhD Students who have not finished their thesis at the time of the submission.

The award is dedicated to applicants from Germany and all other countries. Self applications are accepted. If there are more than one author on the paper the personal contribution of the applicant should be specified with a "letter of support" by the supervisor. The applicants have the obligation to receive the award personally during the annual meeting of the Fachgruppe and to present the work in a plenary talk*.

What: Exactly one scientific contribution, which is accepted by a peer review journal (listet at JCR/Web of Science)

When: The contribution must be accepted by the journal until June 1st of the year of application (letter of acceptance). The date of the submission should not be older than 18 month. (e.g.: submission of the paper in 2008 – 1.1. till 31.12.2008 – acceptance till 1.6.2009; application for the award in 2009). Applications are usually accepted till July 1st.

Why: The submitted contribution shall enlarge the methodology of MR, extend the theoretical background or improve the experimental applications and is remarkable because of

- Methodological quality
- Improvement of the applicability of magnetic resonance methods
- Creativity.

* Traveling expenses are refunded for common well-priced means of transport. For awardees from abroad refund is limited to 1000 €.