



Bericht  
über die Mitgliederversammlung der  
GDCh-Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie  
am 26. September 2017 in Bayreuth

Herr Prof. Luy begrüßt alle Fachgruppenmitglieder und eröffnet die Versammlung. Die Tagesordnung wird angenommen.

## 1. Bericht der Fachgruppenvorsitzenden

### Preise der FG MR

#### **Ernst Award 2017**

1. Monu Kaushik, Universität Frankfurt am Main, für die Publikation "Bis-Gadolinium Complexes for Solid Effect and Cross Effect Dynamic Nuclear Polarization", Monu Kaushik, Mian Qi, Adelheid Godt and Björn Corzilius, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 4295 –4299
2. Artur Lozovoi, Universität Ilmenau für die Publikation "Segmental dynamics of polyethylene-alt-propylene studied by NMR spin echo techniques", A. Lozovoi, C. Mattea, M. Hofmann, K. Saalwaechter, N. Fatkullin, and S. Stapf, *J. Chem. Phys.* 146 (2017)
3. Matthias Roos, Universität Halle-Wittenberg, für die Publikation, "Coupling and Decoupling of Rotational and Translational Diffusion of Proteins under Crowding Conditions", Matthias Roos, Maria Ott, Marius Hofmann, Susanne Link, Ernst Rössler, Jochen Balbach, Alexey Krushelnitsky and Kay Saalwächter, *J. Am. Chem. Soc.* 2016, 138, 10365–10372

#### **Felix-Bloch-Lecture**

Dr. Muslim Dvoyashkin, Universität Leipzig

Die Einladungen, den Preisträger zu Vorträgen einzuladen wird von der Geschäftsstelle an Professoren versendet. Der Vorsitzende appelliert an alle Anwesenden, mehr Bewerbungen einzureichen und weist darauf hin, dass der Preis nicht auf Deutschland beschränkt ist und zwar bevorzugt aber nicht ausschließlich für Nachwuchswissenschaftler ist.

#### Fachgruppenkonto

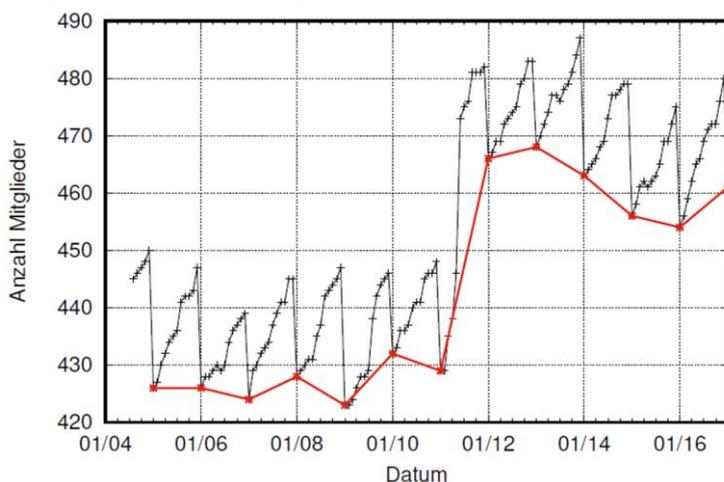
Das FG Konto weist eine positive Entwicklung auf, so dass finanzieller Spielraum für Aktivitäten der Fachgruppe möglich sind.

Es werden für die Verwendung des Geldes Stipendien zur Teilnahme an der FG Tagung, Stipendien für Tagungen im Ausland, europ. EPR-Schule, Anhebung der Preisgelder (vorzugsweise Felix-Bloch-Vorlesung) vorgeschlagen.  
Der Vorstand wird diese Ideen diskutieren und Entscheidungen treffen.

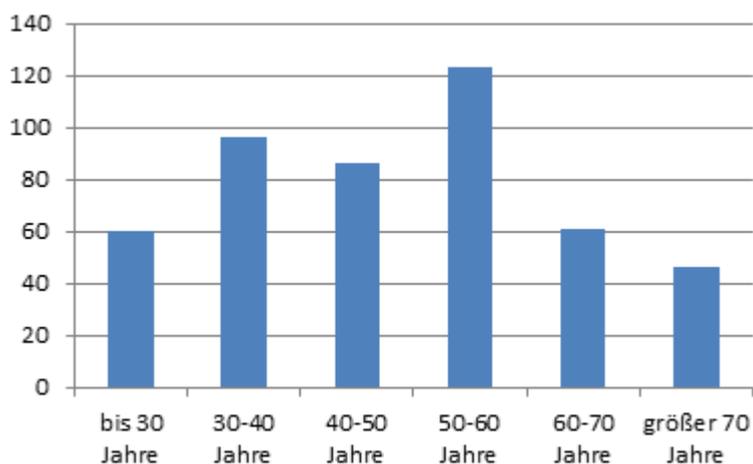
### Mitgliederzahlen

Aktuell hat die Fachgruppe 476 Mitglieder, davon 380 Männer, 92 Frauen und 68 studentische Mitglieder.

### Mitgliederentwicklung



### Altersverteilung



## 2. Fachgruppen-Tagungen

### 39. Diskusstagung 25. bis 28. Sept. 2017 in Bayreuth

gemeinsame Tagung der GDCh-FG MR und der Groupe Magnétisme et Résonance Magnétique mit 248 Teilnehmern

12 Plenarvorträge (5 aus Deutschland, 7 aus Frankreich)

25 eingeladene Vorträge (14 aus Deutschland, 11 aus Frankreich)

### 39. Diskusstagung 10.-13. September 2018 in Leipzig

Die FGMR Tagung wird gemeinsam mit dem SPP-1601 EPR durchgeführt, das Abschlusskolloquium des SPP erfolgt im Anschluss an die reguläre Tagung am Donnerstagnachmittag in der Kongresshalle am Zoo.

Tagungsort: Augusteum, die Eröffnungsveranstaltung findet im Paulinum statt, das Conference Dinner in Auerbachs Keller (Kapazität 250 Pers).

Lokales Organisationskomitee: Marina Bennati, MPI Biophys. Chem. (EPR)  
Andreas Pöpl, Physik/Univ. Leipzig (EPR)  
Harald Möller, MPI Kognitions- & Neurowiss. (MRI)  
Thomas Kahn, Radiologie/Uniklinikum Leipzig (MRI)  
Daniel Huster, Med. Physik/Univ. Leipzig (NMR)  
Jörg Matysik, Chemie/Univ. Leipzig (NMR)  
Ruth Geschwind, Regensburg

Programm: 3 Parallelsessions  
13 Plenaries  
66 Vorträge  
4 Tutorials

#### 41. Diskussionstagung im Rahmen der in Berlin

Termin: 25. – 30. August 2019

Ort: Berlin, FU Henry Ford Bau und Harnack Haus

Christian Griesinger ist Kontaktperson zwischen FG Vorstand und Tagungs-Organisatoren.

### **3. Bericht über die ESR-Spektroskopie**

#### Aktivitäten

-SPP1601 Meeting in Hirschegg im Kleinwalsertal mit 66 Teilnehmern, davon 10 eingeladene Sprecher und 5 Gäste von SHARED EPR

-Young Researcher Workshop in Freudenstadt/Schwarzwald  
10.-12. April 2017 organisiert von Doktoranden der Universität Stuttgart mit 27 Teilnehmern, eingeladene Redner waren Johannes Majer, Wien ("Superconducting and atomic qubits") und Graham Smith, St. Andrews ("High-field EPR")

- EPR Present and Future: Joint SPP1601/SharedEPR Conference

9.-12. Oktober 2017, New Paltz, USA

mit 38 Teilnehmern von SPP1601 und etwa 30 von SHARED EPR

je 15 Vorträge von SPP1601 und SHARED EPR

Poster Session und Round tables zu der Frage in welche Richtung geht die EPR mit dem Ziel ein white paper zu verfassen

#### zukünftige Veranstaltungen

- Frühling 2018 Young Researcher Workshop

- Second bi-lateral meeting SHARED EPR/ SPP 1601 im Rahmen der FGMR Tagung vom 10.-13. September 2018 in Leipzig

Der SPP wird im nächsten Jahr auslaufen, die EPR wird aber weiterhin essentieller Bestandteil der FGMR Tagung sein und die Kooperation mit Amerika wird aufrecht erhalten.

#### 4. Bericht IDNMR Programm

Stand der Technik (Routinemäßige 1D/2D-Charakterisierung neuer Moleküle und Bereitstellung digitaler Originaldaten) und die Publikationsstandards aus dem Analogzeitalter divergieren stark. 2/3 der Experimente bleiben unberücksichtigt, ein Zugriff auf Originaldaten und Zuordnungen ist oft nicht gewährleistet. Das hat bei den Synthetikern eine Gleichgültigkeit zur Folge, da sich die Auswertung und adäquate Datenhinterlegung "nicht auszahlt".

Basierend auf den Gesprächen beim Anwendertreffen 2016 in Erlangen und einer Umfrage im Frühjahr 2016 wurde "Quick Check", ein Tool zur Prüfung von NMR-Daten eingeführt und in einer Roadshow an inzwischen an 5 Standorten (Uni Mainz, TU Darmstadt, Uni Heidelberg, Uni Bochum, MPI f. Kohlenforschung Mülheim) vorgestellt und in Zusammenarbeit mit den fünf Institutionen einem Betatest unterzogen. In einem Folgeantrag soll das bisher auf nmrshiftdb2 basierende System auf der Grundlage der Erfahrungen aus der ersten Projektphase und dem Betatest zu einem umfassenden Datenrepositorium ausgebaut werden, das die vollständige Publikation der NMR- und Strukturdaten vereinfacht und die Daten bei Einreichung auf Konsistenz prüft, um die Gutachter zu entlasten. Im Folgeantrag ist eine Kooperation mit dem NMReData-Projekt (Etablierung eines elektronischen Formats für die NMR-Datenpublikation in MRC) vorgesehen.

Die Software soll nicht erst für Publikationen, sondern bereits für Bachelor- und Masterarbeiten verwendet werden, um die Nachwuchswissenschaftler damit vertraut zu machen und den Aufbau lokaler Repositorien für Arbeitskreise zu ermöglichen.

#### 5. Verschiedenes

##### MR-Forschung in Deutschland

Vorstellung und Aufruf zu prüfen, ob die Informationen aktuell und vollständig sind.

##### Bericht aus den Gremien

Aufruf Gremien/Organisationen vorzustellen im Rahmen der MV. Der Vorsitzende fragt das Interesse bei den Mitgliedern ab, Interesse wird einstimmig bekundet. Emmy-Noether-Stipendiaten Erfahrungsberichte. Der Vorsitzende wird für die nächste Mitgliederversammlung einen Vertreter von Gremien/Organisation zur Vorstellung suchen.

Vorsitzende der Fachgruppe

Für den Bericht

Prof. Dr. Burkhard Luy

Dr. Susanne Kühner  
(GDCh-Geschäftsstelle)

Frankfurt, den 17.11.2017