



01/2020 • 60. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

am Ende eines wirklich einzigartigen und unvergesslichen Jahres wollen wir uns doch noch einmal mit einem regulären MARS bei Ihnen, den Mitgliedern der Fachgruppe, melden.

Zum einen, weil durch die Pandemie einige Dinge fast in Vergessenheit geraten wären – dies sind beispielsweise die Ernst-Preise und der erste Albert-Overhauser-Preis vom letzten Jahr, für die wir hier noch die Berichterstattung nachzuholen haben.

Auch dieses Jahr hat eine ganze Reihe bekannter Persönlichkeiten aus der Magnetresonanz einen runden Geburtstag gefeiert. Einige davon melden sich hier zu Wort.

Inzwischen wurde auch die Förderung für das NFDI4Chem-Konsortium bewilligt, das im Oktober seine Arbeit aufgenommen hat, mit dem Ziel, eine durchgehende Digitalisierung von Forschungsdaten (auch aus der Magnetresonanz) zu erreichen – das in einem Jahr, das eindrucksvoll gezeigt hat, wie schnell und umfassend viele Dinge digitalisiert werden können, wenn die Notwendigkeit dazu besteht. Dies lässt uns, trotz der Schwierigkeiten und Krisen in Verbindung mit dem Corona-Virus, optimistisch in die Zukunft blicken.

In diesem Sinne wünschen wir Ihnen gesegnete, ruhige und gesunde Weihnachtsfeiertage und ein gutes neues Jahr!

Johannes Liermann und Nils Schlörer

Inhalt

Ernst-Preise 2019.....	2
Albert-Overhauser-Preis 2019.....	2
Ehrenmitgliedschaft für Tony Keller.....	3
Zum 80. Geburtstag von Horst Kessler.....	3
Zum 85. Geburtstag von Harald Günther... ..	5
Zum 80. Geburtstag von Dieter Michel.....	6
Zum 70. Geburtstag von Angela Gronenborn	7
Diskussionstagung „Praktische Probleme“ findet online statt.....	8
Die geheime Wahrheit über Bruker.....	8

Impressum

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

Redaktion: Dr. Johannes Liermann (*jl*, Universität Mainz, liermann@uni-mainz.de), Dr. Nils Schlörer (*nes*, Universität Köln, nilschloerer@uni-koeln.de).

Aus der Fachgruppe Ernst-Preise 2019

Am 28. August 2019 hat die Fachgruppe drei junge Wissenschaftler/innen in Berlin mit dem Ernst-Preis 2019 ausgezeichnet.

■ Victoria Aladin

Goethe-Universität Frankfurt

Complex Formation of the Tetracycline-Binding Aptamer Investigated by Specific Cross-Relaxation under DNP

Angew. Chem. Int. Ed.
2019, 58, 4863–4868

Die Kombination aus MAS und DNP ist sehr nützlich, um komplexe biologische Systeme wie Membranen oder sogar ganze Zellen zu untersuchen, kann aber darüber hinaus auch zu bemerkenswerten Spindynamiken führen. In dieser Arbeit nutzt Victoria Aladin unter der Betreuung von Björn Corzilius eine neue Methode der spezifischen Kreuz-Relaxation unter DNP-Bedingungen (SCREAM-DNP), um selektiv den Komplex aus einem RNA-Aptamer und einem Liganden spektral zu isolieren und daran umfangreiche Bindungsstudien durchzuführen.



■ Daniel Friedrich (geb. Stöppler)

FMP Berlin

Insight into small molecule binding to the neonatal Fc receptor by X-ray crystallography and 100 kHz magic-angle-spinning NMR

PLOS Biology 2018, 16, e2006192

Der neonatale Fc-Rezeptor (FcRn) ist ein wichtiges Target für die Therapie von Autoimmun-Erkrankungen, daher sind Informationen über die Bindung von Inhibitor-Liganden dieses Rezeptors ein wichtiger Ausgangspunkt für die Wirkstoff-Forschung in diesem Bereich. Daniel Friedrich unter Betreuung von Hartmut Oschkinat und die Ko-Autoren kombinieren in dieser Arbeit Ultrafast-MAS mit Röntgen-Kristallographie und weiteren biophysikalischen Methoden, um den Bindungsort eines kleinen Moleküls an den Rezeptor zu charakterisieren.



■ Bálint Koczor

TU München

Time evolution of coupled spin systems in a generalized Wigner representation

Ann. Phys. 2019, 408, 1–50

Die zeitabhängige Entwicklung eines Spinsystems wird in der Quantenmechanik normalerweise auf abstrakte Weise mit dem Dichte-Operator-Formalismus und – davon abgeleitet – mit Produktoperatoren beschrieben. Eine anschaulichere Darstellung von Quantensystemen als Phasenraum liefert der Wigner-Weyl-Formalismus, der bislang aber nur für ungekoppelte Spins formuliert worden war. Bálint Koczor hat unter der Betreuung von Steffen Glaser in seiner umfangreichen Arbeit die Wigner-Darstellung auf gekoppelte Spins erweitert und damit einen wichtigen Beitrag für die Visualisierung gekoppelter Spinsysteme geleistet.



Aus der Fachgruppe Albert-Overhauser-Preis 2019

Im Jahr 2019 hat die Fachgruppe zum ersten Mal den neuen Albert-Overhauser-Preis für Postdoktorand/innen ausgelobt. Wir freuen uns sehr, dass am 28. August 2019 der erste Preisträger seinen Preis erhalten hat.

■ Tomas Orlando

MPIBPC Göttingen

Dynamic Nuclear Polarization of ¹³C Nuclei in the Liquid State over a 10 Tesla Field Range

Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 1402–1406

Seit Jahren ist DNP eine erfolgreiche Methode, um die geringe intrinsische Empfindlichkeit der NMR zu verbessern. Während DNP im Bereich der Festkörper-NMR längst etabliert ist, bereitet die Hyperpolarisation in Lösung aufgrund der komplexen Mechanismen noch vielfältige Probleme und ist insbesondere bei hohen Feldern technisch nicht trivial. In der von Marina Bennati betreuten Arbeit zeigt Tomas Orlando zum ersten Mal, dass eine ¹³C-Signalverstärkung von bis zum 600fachen auch bei hohen Feldern bis 9.4T möglich ist. Damit ist diese Publikation eine wichtige Vorarbeit für mögliche DNP-Anwendungen in der Hochfeld-Flüssigkeits-NMR.



Auszeichnungen

Ehrenmitgliedschaft für Tony Keller



Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie in der GDCh hat am 8. September 2020 Tony Keller die Ehrenmitgliedschaft der Fachgruppe verliehen, „in Würdigung seiner mehr als 50-jährigen Pionierarbeit bei Bruker auf dem Gebiet der kernmagnetischen Resonanz, die gerade Entdecktes zum Segen der Wissenschaft in kommerzielle Produkte verwandelte – von der Rauschentkopplung über die Puls-Fourier-Spektroskopie bis zu supraleitenden Magneten, voll digitalisierten Spektrometern, Cryo-Köpfen und Höchstfeldspektrometern.

Die Früchte seiner Arbeit haben die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie über Jahrzehnte beflügelt, viele wissenschaftliche Erkenntnisse ermöglicht und zur herausragenden Stellung der magnetischen Resonanz in Deutschland entscheidend beigetragen.“ (Urkundentext)

Tony Keller war viele Jahrzehnte Vorstandsvorsitzender der Bruker BioSpin AG und ist wie kaum eine zweite Persönlichkeit mit der Geschichte von Bruker und der technischen Entwicklung der FT-NMR-Spektroskopie verbunden.

Durch die Corona-Pandemie konnte diese Verleihung leider nicht in einer festlichen Form im Rahmen der Fachgruppentagung vorgenommen werden. Die Auszeichnung wurde daher vom stellvertretenden Vorsitzenden Christian Griesinger in Tony Kellers Wohnort übergeben. Wir gratulieren sehr herzlich!

Nachgefragt

Zum 80. Geburtstag von Horst Kessler



Wie und wann sind Sie zur NMR (ESR) gekommen?

Als Diplomand im Arbeitskreis von Eugen Müller (Organische Chemie in Tübingen) untersuchte ich die Reaktion von Furan und Thiophen mit Diazomethan

unter Kupfersalz-Katalyse. Das entstehende cyclopropanierte Homologisierungsprodukt war eindeutig durch NMR-Spektroskopie (damals bei 56,4 MHz) zu charakterisieren. Etwas später nahm ich für den ganzen großen Arbeitskreis von Eugen Müller die NMR-Spektren auf. Was mich dort fand und was mich besonders faszinierte, waren die temperaturabhängigen Koaleszenzphänomene.

Was war das spannendste NMR(ESR)-Experiment für Sie?

Das ist schwer zu sagen, denn die Entwicklung ging rasant voran. Mich interessierten immer die Neuentwicklungen, weil sich mit ihnen neue Anwendungsmöglichkeiten ergaben. Anfangs war es die innermolekulare Beweglichkeit, dann waren es die Konformationsbestimmungen – vor allen von Peptiden und dann von Proteinen - und später die Korrelationen der Struktur und Beweglichkeit mit der biologischen Aktivität zum Design von Wirkstoffen.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Nein.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Ja, ein NMR-Spektrometer.

jl



Was macht für Sie einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker aus?

Den typischen NMR-Spektroskopiker gibt es nicht. Ein guter NMR-Spektroskopiker ist ein Wissenschaftler, der ohne Vorurteile seine Experimente durchführt, interpretiert und diskutiert, auch wenn sie seinen Erwartungen nicht entsprechen.

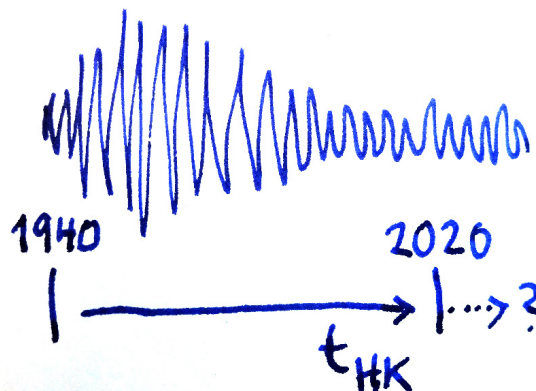
In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?

Das hängt von den Fähigkeiten und Interessen ab. Man sollte das wählen, wo man am ehesten etwas beitragen kann, sei es in der Theorie, in der Entwicklung von physikalischen Techniken oder Anwendungen auf herausfordernde und spannende Probleme. Ich denke, dass heute besonders die komplexen Probleme in der Biochemie und Medizin herausfordernde Ziele sind. Auch wenn das im Zeitalter der „Neuentdeckung“ der Elektronenmikroskopie vielfach übersehen wird, kann die NMR-Spektroskopie wichtige Beiträge liefern, weil man mit ihr Moleküle in Lösung unter Bedingungen studieren kann, die der Natur recht nahe kommen. Vor allem der Einfluss der äußeren Bedingungen (pH, Salzkonzentration, Temperatur, Zusatz von anderen bindenden Molekülen, Lösungsmittel ...) hilft oft zum Verstehen der biologischen Mechanismen.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der ESR/NMR in den letzten zehn Jahren?

Auf dem Gebiet der hochauflösenden NMR-Spektroskopie sehe ich keine bahnbrechenden neuen Techniken. In der Festkörper NMR könnte man evt. Die Ultrafast MAS nennen.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Nach meinem Studium in Leipzig und Tübingen war ich 18 Jahre Lehrstuhlinhaber an der Goethe-Universität in Frankfurt und bin seit 1989 an der TU München. Nach meiner Emeritierung durfte ich als Carl von Linde Professor am Institute for Advanced Study der TUM noch über ein Jahrzehnt weiterarbeiten.

Horst Kessler (München/Garching) wurde am 5. April 80 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

Nachgefragt

Zum 85. Geburtstag von Harald Günther



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Durch meinen Postdoc-Aufenthalt 1961-63 am Mellon-Institut in Pittsburgh, Pa., im Arbeitskreis von Aksel A. Bothner-By (AA'BB').¹

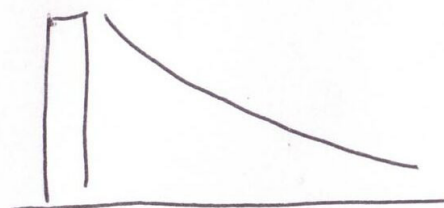
In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?

Keinen, jeder soll das machen, was ihm Spaß macht.

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

Geringer Kontakt zur aktuellen Forschung erlaubt mir kein Urteil. Die großen Ereignisse der NMR nach ihrer Entdeckung durch Edward M. Purcell und Felix Bloch sind zweifellos die Einführung der gepulsten FT NMR durch Richard R. Ernst, die Entwicklung der 2D-Methodik durch J. Jeener und die der NMR-Bildgebung (MRI) durch Paul C. Lauterbur.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Das ¹H-Tieftemperaturspektrum des Benzoloxid-Oxepin Gleichgewichts, aufgenommen 1965 mit Horst Friebolin am DP-60 des Instituts für Elektrowerkstoffe in Freiburg/Brsgr.,² später die Isotopenverschiebung von ⁶Li Resonanzen zur Strukturaufklärung lithiumorganischer Verbindungen in Lösung³ und hochaufgelöste ¹H- und ¹³C-MAS-NMR Spektren von an Kieselgel adsorbier-ten Aromaten.⁴

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Der Nachweis des Streufelds eines Supraleiters mit einem alten Groschen.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

In den 60ern der Varian-A60 mit Seitenbanden-Kalibrierung, später der Supraleiter Bruker WH-400.

Was macht für Sie einen typischen NMR-Spektroskopiker aus?

Er spinnt immer.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Halle – Leipzig – Stuttgart – Heidelberg – Pittsburgh – Köln - Siegen.

Harald Günther (Siegen) wurde am 8. Juli 85 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

¹ vgl. auch *Encyclop. NMR* **1996**, 1, 357

² *Tetrahedron Lett.* **1965**, 4085

³ mit O. Eppers, *Helv. Chim. Acta* **1990**, 73, 2071

⁴ mit M. Ebener und G. v. Fircks, *Helv. Chim. Acta* **1991**, 74, 1296



Nachgefragt

Zum 80. Geburtstag von Dieter Michel



Wie und wann sind Sie zur NMR (ESR) gekommen?

Diplomarbeit bei Prof. Harry Pfeifer, 1964.

Was war das spannendste NMR(ESR)-Experiment für Sie?

Es gibt viele spannende NMR-Experimente, z. B. MAS-NMR im hohen Magnetfeld.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Siehe oben.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

750 MHz Protonenfrequenz, sog. Wide bore.

Was macht für Sie einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker aus?

Verbindung zwischen gutem Experiment und theoretischer Behandlung.

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?

Anwendungen verschiedener NMR-Methoden in den sog. Life-Science, NMR- Bildgebung, 3-D NMR Strukturbestimmungen.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der ESR/NMR in den letzten zehn Jahren?

NMR im Gigahertz-Bereich, Weiterentwicklung und Anwendung der bildgebenden Verfahren der Magnetresonanz.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Diplom 1964, Promotion 1968, fac. doc. 1971, Promotion B (Habilitation) 1974, Hochschuldozent 1980–1988, 1988–1992 außerordentlicher Professor für Experimental-Physik, 1992–2005 C4-Professor für Experimental-Physik, 2000 Prof. h. c. (Staatliche Universität St. Petersburg), Professor i. R. für Experimentalphysik an der Universität Leipzig, gewählt in die Sächsische Akademie der Wissenschaften im Februar 1997.

Dieter Michel (Leipzig) wurde am 17. März 80 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

Nachgefragt Zum 70. Geburtstag von Angela Gronenborn



Wie und wann sind Sie zur NMR (ESR) gekommen?

1974-1975 in Köln, Diplomarbeit bei Harald Günther und anschließend Dissertation im Günther-Arbeitskreis

Was war das spannendste NMR(ESR)-Experiment für Sie?

Alle Experimente die man zum ersten Mal ausprobiert - Das erste 2D $^1\text{H}, ^1\text{H}$ Experiment – vor langer Zeit in London und das erste DNA-Spektrum (auch in London); dann das erste 3D-Experiment (in Martinsried) und in den letzten Jahren das erste ^{19}F -PRE-Experiment.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Nein, das ist so, als würde man fragen, ob man ein Lieblingskind hat.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Zur Zeit, ein 600 MHz Spektrometer mit CP TXO $^{19}\text{F}/^{13}\text{C}$ -H-D cryoprobe.

Was macht für Sie einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker aus?

Gibt es wirklich einen „typischen“ NMR-Spektroskopiker? Da bin ich mir nicht so sicher. Vielleicht erlauben Sie mir einen Scherz: wir „spinnen“ alle ein bisschen und haben eine magnetische Persönlichkeit.

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?

Für alle Studenten ist es wichtig, daß sie ein Gebiet in der Forschung finden, welches sie total in den Bann zieht. Wenn man liebt, was man macht, wird man immer besser darin. Jede Antwort, die man auf eine wissenschaftliche Frage findet beinhaltet hundert neue Fragen. Ich hoffe sehr, daß die Neugier und das ständige Fragen das Herzblut aller Studenten ist, was immer diese studieren.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der ESR/NMR in den letzten zehn Jahren?

Schon immer galt: Die besondere Stärke der NMR-Spektroskopie liegt darin, daß sie es erlaubt, Substanzen atomar und zerstörungsfrei zu analysieren. Das gilt sowohl für Werkstoffe als auch für biologische Materialien - die Substanz vor und nach dem NMR Spektrum ist identisch.

Und, in den letzten 10 Jahren hat die Festkörper-NMR (MAS solid state NMR) enorme Fortschritte gemacht. Mit sehr kleinen Rotoren und sehr schnellem Spinnen erreicht man eine enorme Auflösung der Spektren.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

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 und danach fast 2 Jahrzehnte eine enorm produktive Periode unter phantastischen Kollegen am NIH erlebt. Und jetzt, immer noch begeistert davon, daß ich für mein Hobby bezahlt werde.

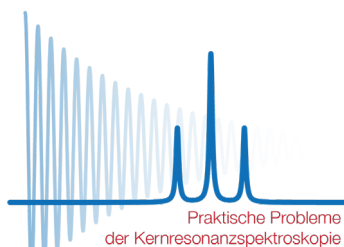
Angela Gronenborn (Pittsburgh, PA) wurde am 11. Mai 70 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!



Veranstaltungen

Diskussionstagung „Praktische Probleme“ findet online statt

Schweren Herzens haben wir uns dazu entschlossen die Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“ im Jahr 2021 in einem Online-Format durchzuführen. Wir hoffen, dass dies die einzige Ausnahme bleibt und die Tagung im Jahr 2022 wieder normal stattfinden kann. Wir haben die Tagung auf vier Tage aufgeteilt und wollen sie vormittags an den Tagen 16., 17., 23. und 24. März stattfinden lassen. Wir freuen uns über jeden Vortragenden und Teilnehmer und hoffen, dass auch unsere Online-Tagung ein großer Erfolg wird.



Anmeldung unter:
<https://www.chemie.tu-berlin.de/ppnmr2020>

Sebastian Kemper
TU Berlin

■ 42. Tagung Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie 2021

16., 17., 23., 24. März 2021
Online (organisiert an der TU Berlin)

<https://www.chemie.tu-berlin.de/ppnmr2020>

Zum Schluss

Die geheime Wahrheit über Bruker

Dachten Sie auch, dass der Ursprung von Bruker in Karlsruhe liegt? Über 60 Jahre hat Bruker diesen Mythos aufrechterhalten, bis unsere investigativen Recherchen die Wahrheit ans Licht gebracht haben.

Der tatsächliche Hauptsitz von Bruker liegt nämlich im beschaulichen Wiesbaden-Schierstein (bundesweit bekannt und beliebt durch die gleichnamige Autobahnbrücke). Den Beweis dafür sehen Sie unten.

Leider wird „Spielzeug Bruker“ ein Ansturm von NMR-Enthusiasten, die noch in letzter Minute Geschenke suchen, durch die aktuellen Corona-Beschränkungen verhaselt – hoffen wir auf mehr Glück im nächsten Jahr.

Frohe Weihnachten, eine gutes neues Jahr und immer gute Resonanz!

jl

