



GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

01/2022 • 64. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanz
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

nach den vielen weniger erfreulichen Ereignissen, die das ausgehende Jahr mit sich gebracht hat, möchten wir hier an erster Stelle eine positive Neuigkeit vermelden: Das Redaktionsteam von MARS hat jungen, dynamischen Zuwachs bekommen, seit 2022 vervollständigt Dr. Maik Icker von der Universität Leipzig das Kleeblatt.

Angesichts der bereits seit Jahren bestehenden Schwierigkeiten bei der Heliumversorgung (Anfang 2023 ist zu dem Thema eine Extra-Ausgabe vorgesehen!) und den für viele Labors beunruhigenden Energiesparmaßnahmen freuen wir uns, dass mit der Entspannung der Corona-bedingten Einschränkungen die nächste Tagung „Praktische Probleme“ aller Voraussicht nach im dritten Anlauf in Präsenz stattfinden kann (siehe S. 6)! Auch in der Redaktion hat sich während der vergangenen drei Jahre einiges angestaut, so dass diese Ausgabe mit einer Rückschau auf einige Ereignisse der Corona-Zeit das Jahr beschließt.

Wir wünschen Ihnen allen frohe Weihnachten und ein hoffentlich ruhiges neues Jahr 2023!

■ Dr. Maik Icker

Als Jahrgang 1986 kam ich im Chemie-Studium in Leipzig an Professor Stefan Bergers NMR-Ausbildung nicht vorbei, worauf eine Promotion in seinem Arbeitskreis folgte. Nach zwei Jahren als Postdoc bei Gavin Morley an der University of Warwick (UK) führte mein Weg zunächst an die BTU Cottbus-Senftenberg, um schließlich 2018 als NMR-Laborleiter an die Universität Leipzig (Institut für Organische Chemie) zurückzukehren.



Inhalt

Ehrenmitgliedschaft für Wolfgang Lubitz	2
Ehrenmitgliedschaft für Stefan Berger	2
Otto-Stern-Preis für Jörg Kärgner	3
Felix Bloch Lecture 2021 und 2022	3
Albert-Overhauser-Preis 2020	4
Ernst-Preise 2020	4
Ernst-Preise 2021	4
Ernst-Preise 2022	5
Gemischtes	6

Tagung Praktische Probleme 2023 in Berlin

NMRium

IVAN Spinsights ist umgezogen

FGMR auf LinkedIn

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

Ehrenmitgliedschaft für Wolfgang Lubitz

Die Ehrenmitgliedschaft in der Fachgruppe wurde Herrn Professor **Wolfgang Lubitz** verliehen in Würdigung seiner Jahrzehnte währenden Förderung der EPR-Spektroskopie im Rahmen der Fachgruppe und im internationalen Raum.



Seine grundlegenden Arbeiten zur biologischen Energiekonversion stellten die Aussagekraft der EPR-Spektroskopie auf höchstem Niveau und vielfältig unter Beweis und strahlen weit über das Feld der magnetischen Resonanz hinaus. Besonders hervorzuheben sind seine exzellenten Arbeiten zu den Eisen-Eisen- und Nickel-Eisen-Hydrogenasen sowie zu den photosynthetischen Reaktionszentren.

Mit diesen Arbeiten beleuchtete er zwei essentielle Bereiche der Energiekonversion: die katalytische Spaltung von Wasser und die Aktivierung molekularen Wasserstoffs.

Die Früchte seiner Arbeit haben die Fachgruppe Magnetische Resonanz über Jahrzehnte beflügelt, viele wissenschaftliche Erkenntnisse ermöglicht und zur herausragenden Stellung der magnetischen Resonanz in Deutschland im Allgemeinen und der EPR-Spektroskopie im Besonderen entscheidend beigetragen.

Aus der Fachgruppe

Ehrenmitgliedschaft für Stefan Berger

Die Ehrenmitgliedschaft in der Fachgruppe wurde Herrn Prof. Dr. **Stefan Berger** verliehen in Würdigung seiner nachhaltigen methodisch-technischen Beiträge, seines langjährigen Engagements für die Fachgruppe Magnetische Resonanz sowie seiner viele Jahrzehnte währenden herausragenden Lehrtätigkeiten auf dem Gebiet der kernmagnetischen Resonanz. Seine Leistungen haben das Verstehen der NMR-Spektroskopie, die Interpretation von NMR-Daten bis hin zur gezielten Anwendung von Experimenten auch durch wenig erfahrene Anwender in außergewöhnlichem Maße gefördert und dadurch substantiell zur Verbreitung der NMR und des Nutzens dieser vielfältigen Technik auch über Fächergrenzen hinweg beigetragen.

Von seinen besonderen Leistungen zeugen vor allem seine zahlreichen Buchveröffentlichungen, die Anfängern als auch Experten die Praxis am NMR-Spektrometer erleichtern und die detaillierte Sammlung von NMR-Parametern in Übersichtswerken, die bereits Generationen von Wissenschaftlern als hilfreiches Nachschlagewerk dienen.

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



Aus der Fachgruppe

Otto-Stern-Preis für Jörg Kärger

Der Otto-Stern-Preis wurde Herrn Professor **Jörg Kärger** verliehen in Würdigung seiner grundlegenden Beiträge zur Anwendung der gepulsten Feldgradienten-NMR-Spektroskopie in der Analyse molekularer Transportprozesse in porösen Materialien.



Professor Kärger hat ausgehend von NMR-Untersuchungen von Transportprozessen die NMR-Spektroskopie in großer Breite und Interdisziplinarität beeinflusst. Er trieb die Etablierung grundlegender physikalischer Modelle des Stofftransports auf molekularer Ebene voran. Dies umfasst die Mehrbereichsdiffusion, die Berücksichtigung von Adsorptionsprozessen und auch die experimentelle Demonstration einer eindimensionalen Diffusion. Seine Arbeiten zum Stofftransport und zur Sorption komplexer nanoporöser Materialien strahlen weit in die Material- und Ingenieurwissenschaften hinein. Das Wissen aus seinen Arbeiten über molekulare Prozesse hat große Relevanz für technische Anwendungen wie molekulare Trennverfahren und heterogene Katalyse.

Seine Arbeiten zeigen somit in vorbildhafter Weise, wie magnetische Resonanz auf höchstem Niveau und konsequent methodisch vorangetrieben zur Lösung aktueller Herausforderungen beispielsweise in den Gebieten Nachhaltigkeit, Klima und Energie dienen kann.

Aus der Fachgruppe

Felix Bloch Lecture 2021 und 2022

Mit der Felix-Bloch-Vorlesung würdigt die Fachgruppe herausragende Leistungen des fortgeschrittenen wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der magnetischen Resonanz in den vergangenen fünf Jahren.

Felix-Bloch-Vorlesung 2021

Jun.-Prof. Dr. **Ann-Christin Pöppler** (Universität Würzburg) und Dr. **Stefan Glögler** (Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie, Göttingen) wurden während des 42. FGMR Discussion Meetings am 1. Oktober bzw. 29. September 2021 jeweils mit der Felix-Bloch-Vorlesung 2021 geehrt.



Felix-Bloch-Vorlesung 2022

Dr. **Dominik Benjamin Bucher** (Technische Universität München) wurde während des 43. FGMR Discussion Meetings am 12. September 2022 mit der Felix-Bloch-Vorlesung 2022 geehrt.



Aus der Fachgruppe

Albert-Overhauser-Preis 2020

Der Albert-Overhauser-Preis 2020 wurde am 28. September 2021 im Rahmen der Online-Fachgruppentagung 2021 verliehen.

■ Angeliki Giannoulis

Weizmann Institute of Science

Two closed ATP- and ADP-dependent conformations in yeast Hsp90 chaperone detected by Mn(II) EPR spectroscopic techniques

PNAS **2019**, *117*, 395–404

Betreuerin: Daniella Goldfarb



Ernst-Preise 2020

Die Ernst-Preise 2020 wurden am 28. September 2021 im Rahmen der Online-Fachgruppentagung 2021 verliehen.

■ Carlo Botha

KIT

On-line SEC-MR-NMR hyphenation: optimization of sensitivity and selectivity on a 62 MHz benchtop NMR spectrometer

Polym. Chem. **2019**, *10*, 2230–2246

Betreuer: Manfred Wilhelm



■ Jens Haller

KIT

Real-time pure shift measurements for uniformly isotope-labeled molecules using X-selective BIRD homonuclear decoupling

J. Magn. Reson. **2019**, *302*, 64–71

Betreuer: Burkhard Luy



Ernst-Preise 2021

Die Ernst-Preise 2021 wurden am 30. September 2021 im Rahmen der Online-Fachgruppentagung 2021 verliehen.

■ Nico Fleck

Universität Bonn

SLIM: A Short-Linked, Highly Redox-Stable Trityl Label for High-Sensitivity In-Cell EPR Distance Measurements

Angewandte Chemie, Int. Ed. **2020**, *59*, 9767–9772

Betreuer: Olav Schiemann



■ Tassilo Grün

Goethe-Universität Frankfurt

Unraveling the Kinetics of Spare-Tire DNA G-Quadruplex Folding

J. Am. Chem. Soc. **2021**, *143*, 6185–6193

Betreuer: Harald Schwalbe



■ Niels Karschin

MPIBPC Göttingen

Magnetically Induced Alignment of Natural Products for Stereochemical Structure Determination via NMR

Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, *59*, 15860–15864

Betreuer: Christian Griesinger



Aus der Fachgruppe Ernst-Preise 2022

Die Ernst-Preise 2022 wurden am 12. September 2022 im Rahmen der Fachgruppentagung 2022 in Karlsruhe verliehen.

■ Jan Borggräfe

Heinrich Heine Universität
Düsseldorf

*Time-resolved structural analysis
of an RNA-cleaving DNA catalyst*

Nature **2022**, 601, 144–149

Betreuer: Manuel Etzkorn



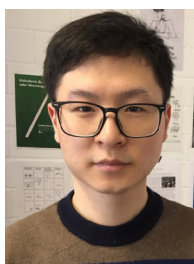
■ Danhua Dai

Goethe-Universität Frankfurt

*Room-temperature dynamic
nuclear polarization enhanced
NMR spectroscopy of small
biological molecules in water*

Nat. Commun. **2021**, 12, 6880

Betreuer: Thomas Prisner



■ Vanessa de Jesus

Goethe-Universität Frankfurt

*Switching at the ribosome:
riboswitches need rProteins as
modulators to regulate translation*

Nat. Commun. **2021**, 12, 4723

Betreuer: Boris Fürtig / Harald
Schwalbe



■ Fabian Hecker

MPIBPC Göttingen

*Detection of Water Molecules
on the Radical Transfer Pathway
of Ribonucleotide Reductase by
¹⁷O Electron–Nuclear Double
Resonance Spectroscopy*

J. Am. Chem. Soc. **2021**,
143, 7237–7241

Betreuerin: Marina Bennati



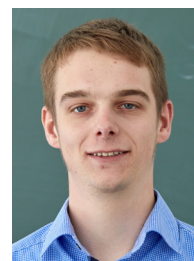
■ Tobias Hett

Universität Bonn

*Spatiotemporal Resolution of
Conformational Changes in
Biomolecules by Combining Pulsed
Electron–Electron Double Resonance
Spectroscopy with Microsecond
Freeze–Hyperquenching*

*J. Am. Chem.
Soc.* **2021**, 143, 6981–6989

Betreuer: Olav Schiemann



■ Alexander Klein

LMU München

*Atomic-resolution chemical
characterization of (2x)72-
kDa tryptophan synthase via
four- and five-dimensional
¹H-detected solid-state NMR*

PNAS **2022**, 119, e214690119

Betreuer: Rasmus Linser



■ Shari Meichsner

TU Dortmund

*In-Cell Characterization of the
Stable Tyrosyl Radical in E. coli
Ribonucleotide Reductase Using
Advanced EPR Spectroscopy*

Angew. Chem. Int. Ed. **2021**,
60, 19155–19161

Betreuerin: Müge Kasanmascheff

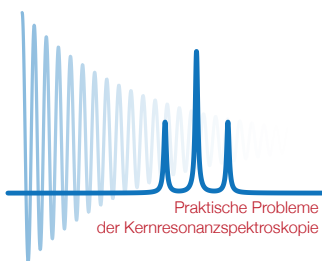


Zum Schluss

Gemischtes

Tagung Praktische Probleme 2023 in Berlin

Nachdem die Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“ im Jahr 2020 entfallen musste und dann zweimal online stattgefunden hat, soll 2023 ein neuer Anlauf genommen werden, sie am 21. und 22. März 2023 als Prä-



senz-Veranstaltung abzuhalten. Gastgeber wird dann das Leibniz-Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie (FMP) in Berlin-Buch sein.

Wie in den vergangenen Jahren werden Tutorials, Vorträge und Workshops genügend Raum für den Austausch zwischen Teilnehmern aus Hochschulen, Behörden und der Industrie über anwendungsbezogene Probleme und Fragestellungen der NMR-Spektroskopie bieten. Ein Treffen des GDCh-AK „Kleine Moleküle“ ist ebenfalls eingeplant. Es wird wie schon zuvor keine Tagungsgebühren geben, um aber die Tagung planen zu können, ist eine Anmeldung über die Tagungswebseite notwendig.

Peter Schmieder
FMP Berlin

■ 44. Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“

Berlin-Buch

21. und 22. März 2023

ppnmr2023.schmieder-nmr.de

NMRium

Seit einigen Jahren ist eine Webseite online, die ein niedrighschwelliges, kostenloses Tool zur Prozessierung von 1D- und 2D-NMR-Daten anbietet und vor allem auch hervorragende Inhalte für die

Lehre im Bereich der Auswertung von NMR-Spektren präsentiert.

So können Sie entweder Ihren Studierenden NMR-Rohdaten zusenden mit der Aufgabe diese selbst zu prozessieren und die Struktur zu ermitteln oder Sie nutzen die Vielzahl von dort hinterlegten Übungsbeispielen. Zu jedem Übungsspektrum gibt es eine Summenformel als Hilfestellung. Mittels Strukturzeichentool kann dann für das hinterlegte Spektrum eine Lösung vorgeschlagen werden.

Einfach – toll!

mi

■ Link

www.nmrium.org

IVAN Spinsights ist umgezogen

Das wertvolle Forum und Repositorium für die VARIAN/Agilent-SpektroskopikerInnen unter uns ist (erneut) umgezogen: von Slack zu Zulip. Nachdem Agilent das Hosting von Spinsights Ende 2020 eingestellt hatte, beschloss das IVAN-Konsortium, die Inhalte auf der Slack-Plattform bereitzustellen. Kostengründe führten nun zu einem erneuten Wechsel des Hostings. Slack-NutzerInnen des Forums erhielten einen Einladungslink zu Zulip. Wer keinen erhalten hat oder neu dazukommen möchte, muss per Direktnachricht an den Admin Dan Iverson (ehemaliger VARIAN/Agilent-Programmierer, E-Mail: daniverson2016@gmail.com) einen solchen Einladungslink anfragen. Eine andere Registrierungsmöglichkeit besteht leider nicht.

mi

FGMR auf LinkedIn

Unsere Fachgruppe hat nun einen LinkedIn-Kanal. Das Team der studentischen Vertreter im Vorstand der FGMR bestehend aus Lisa Fries und Markus Matz betreuen diesen Kanal.

mi

■ Link

[linkedin.com/groups/12719460](https://www.linkedin.com/groups/12719460)