



MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

nach einer längeren Pause melden wir uns mit einer entsprechend umfangreichen Ausgabe zurück. Im vergangenen Jahr gab es reichlich Gelegenheit, die nach wie vor ungebrochene forschersische Entwicklungsfreude in den verschiedensten Bereichen der NMR-Spektroskopie zu begutachten – allen Unkenrufen bezüglich einer Stagnation der „reifen“ Methode zum Trotz. Die Berichte zur Fachgruppen-Diskussionstagung und vom qNMR-Summit legen davon Zeugnis ab. Für die nächsten Ausgaben haben wir uns diesbezüglich vorgenommen, in knapper Form für ein breiteres Publikum einige der wichtigsten neuen Entwicklungen zu umreißen, die sich auf unserem Gebiet beobachten lassen. Dafür hoffen wir auch auf Ihre Unterstützung – Themenvorschläge nehmen wir gerne entgegen.

Austausch und Weiterbildung sind tragende Säulen unserer „Community“ – dem tragen wir in dieser ersten Ausgabe des Jahres besonders Rechnung. Daher finden Sie neben Ehrungen und Jubiläen in diesem Heft wieder einen Ausblick auf Tagungen und Fortbildungen. Besonders hinweisen wollen wir auf die 40. Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“, zum ersten Mal in Mainz (S. 6).

Wir wünschen Ihnen allen viel Spaß beim Schmökern, für 2018 positive Resonanzen und hoffen auf zahlreiche Rückmeldungen und Themenvorschläge,

Nils Schlörer und Johannes Liermann

Inhalt

Preis Ausschreibungen der Fachgruppe	2
39. FGMR-Diskussionstagung in Bayreuth . . .	3
Felix-Bloch-Vorlesungspreis für Muslim Dvo- yashkin	4
Ernst-Preise 2017	5
Termine 2018	6
Waldi Bauer im Ruhestand	8
Richard R. Ernst Prize 2018 (EUROMAR) . . .	9
Wissenstransfer durch internationale qNMR- Summits	10
Zum 75. Geburtstag von Hans Wolfgang Spiess	11
Zum 85. Geburtstag von Joachim Buddrus . .	12
Bernd Reif erhält Laukien-Preis 2017	12

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, nil.schloerer@uni-koeln.de).

Die nächste Ausgabe 2/2018 erscheint voraussichtlich am 25. Juni 2018 (Redaktionsschluss 11. Juni 2018).

Aus der Fachgruppe

Preisausschreibungen der Fachgruppe

Felix-Bloch-Vorlesung 2018

A special award is given to a distinguished scientist in the field of magnetic resonance. Nominees – preferably young researchers – should have made a particularly impactful scientific contribution over the course of the last five years. All of the disciplines associated with magnetic resonance can be considered. A sub-committee of the Board of the FGMR is responsible to select the awardee among the nominations.

The award is endowed with 1000 €.

The awardee is supposed to give a total of four lectures. The first of these follows the award ceremony within the FGMR 2018 conference from 10th to 13th September 2018 in Leipzig.

Nominations should include a written letter of recommendation in addition to the curriculum vitae and a list of publications of the nominee and should be sent no later than June 1st, 2018 to:

Dr. Susanne Kühner
s.kuehner@gdch.de

Ernst-Preis 2018

Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker zeichnet mit dem Ernst-Preis wissenschaftliche Arbeiten von jungen Wissenschaftlern/innen aus, die das methodische Spektrum der magnetischen Resonanz, ihr theoretisches Verständnis, oder ihre Anwendung bereichern.

Die vorgeschlagene Publikation muss zwischen dem 1. Juni 2017 und dem 1. Juni 2018 publiziert oder vom Journal akzeptiert worden sein. Der Kandidat/die Kandidatin darf zum Zeitpunkt der Einreichung der Arbeit die Dissertation noch nicht abgeschlossen haben. Über die Auswahl entscheidet ein Gutachter-Gremium. Die Preisverleihung erfolgt im Rahmen der Fachgruppentagung vom 10. bis 13. September 2018 in Leipzig. Der Förderpreis ist verbunden mit einer Verleihungsurkunde und einem Preisgeld von 500 Euro.

Anträge können formlos mit der wissenschaftlichen Arbeit und einer Begründung der Betreuerin/des Betreuers für den Kandidatenvorschlag, aus dem die Rolle der Kandidatin/des Kandidaten in der Planung, Durchführung und Interpretation der Arbeit hervorgeht, elektronisch bis zum 1. Juni 2018 eingereicht werden an:

Dr. Susanne Kühner
s.kuehner@gdch.de
<https://www.gdch.de/index.php?id=3300>

Aus der Fachgruppe

39. FGMR-Diskussionstagung in Bayreuth

Die 39. Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) fand vom 25. bis 28. September 2017 an der Universität Bayreuth statt (Homepage unter <http://www.fgmr-gmrm-2017.uni-bayreuth.de>). Das Partnerland war diesmal Frankreich. Zusammen mit Luminita Duma (University of Technology, Compiègne), Bruno Guigliarelli (Aix-Marseille Université) und Olivier Girard (Aix-Marseille Université) wurde die Tagung von Ernst Rössler (Experimentalphysik), Paul Rösch (Biochemie), Jürgen Senker und Renée Siegel (beide Anorganische Chemie) von Bayreuther Seite organisiert.

Die Teilnehmerzahl belief sich auf über 250, wobei ein beträchtlicher Anteil aus Frankreich kam. 17 kommerzielle Anbieter von NMR- und ESR-Hard- und Software sowie Verlagen mit MR-bezogener Literatur nutzten die Chance ihre Produkte auszustellen. Damit wies die Tagung für die MR-Community beider Länder eine hohe Attraktivität auf.

Der Schwerpunkt der Tagung mit dem Titel „39th FGMR Discussion Meeting and Joint Conference of the German and French Magnetic Resonance Societies: Advances in Magnetic Resonance – Methods and Applications“ lag auf der Darstellung neuer methodischer Fortentwicklungen der Magnetischen Resonanzspektroskopie (NMR, EPR und MRI). So gab es Sitzungen mit den Titeln „New Methods“, „Computational Methods/Fast NMR“, „EPR-Methods“ und „Hyperpolarization Methods“. Darüber hinaus thematisierten die Sessions „Structural Biology“ und „Bio-Macromolecules and Dynamics“ biologische Fragestellungen bei den Anwendungen. Gegenstand weiterer Sitzungen waren „Small Molecules/Homogeneous Catalysis“, „Soft Matter“, „NMR Crystallography/ Materials“, „Ma-

gnetic Resonance Imaging“ und „Paramagnetic Systems“. Erstmals fand eine Session zum Thema „NMR-Relaxometry“ statt. Diese Methode hat in den letzten Jahren deutlich an Schwung gewonnen, da mittlerweile Relaxometer kommerziell verfügbar geworden sind.

Das Programm bestand aus fünf Plenarsitzungen mit zwölf Vorträgen und sechs Parallelsitzungen mit jeweils vier Vortragenden und spiegelte die große Vielfalt des MR-Gebietes wider. Als Referenten konnten hochkarätige und international ausgewiesene Sprecher aus Frankreich und Deutschland gewonnen werden. Die Tagung begann mit drei „Tutorials“ auf dem Gebiet der EPR, der Flüssigkeit- und der Festkörper-NMR.

Felix-Bloch-Lecturer ist in diesem Jahr Dr. Muslim Dvoyashkin von der Universität Leipzig. Mit den Ernst-Awards wurden Monu Kaushik (Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main), Artur Lozovoi (Technische Universität Ilmenau) und Matthias Roos (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg) ausgezeichnet. Das Conference Dinner im Deutschen Dampflokomotiv-Museum in Neuenmarkt hinterließ einen bleibenden Eindruck.

Jürgen Senker und Ernst Rössler, Bayreuth



Die diesjährigen Preisträger der Felix-Bloch-Vorlesung (siehe Seite 4) und der Ernst-Preise (siehe Seite 5).



Aus der Fachgruppe

Felix-Bloch-Vorlesungspreis für Muslim Dvoyashkin

Am 25. September 2017 hat die Fachgruppe den Felix-Bloch-Vorlesungspreis an Muslim Dvoyashkin (Uni Leipzig) vergeben. Wir geben an dieser Stelle die Laudatio von Jörg Kärger wieder.

Muslim Dvoyashkin studierte Physik in Kazan, dem Ort der Entdeckung der ESR durch Evgenij Zavojskij und, bis heute, einer Hochburg der Magnetischen Resonanzspektroskopie in Russland. Mit einer Master-Arbeit bei Vladimir Skirda schloss er 2005 als Zavojskij-Studentenpreisträger sein Studium mit Auszeichnung ab.

Damals, wie auch in seinen anschließenden Arbeiten zur Promotion bei Rustem Valiullin und Jörg Kärger an der Fakultät für Physik und Geowissenschaften der Universität Leipzig im Rahmen eines internationalen Graduiertenkollegs mit den Universitäten Amsterdam, Delft, Eindhoven, Twente und Utrecht, stand im Mittelpunkt seines Interesses die Anwendung der NMR-Diffusometrie zur Untersuchung der Dynamik in komplexen Systemen, so unter anderem zum Verhalten von Fluiden in Porenräumen im überkritischen Zustand.

Von 2011 bis 2013 arbeitete er als Post-Doc zusammen mit Russ Bowers und Sergey Vasenkov an der Universität von Florida und dabei insbesondere auch am „National High Magnetic Field Laboratory“ in Gainesville. Hier beschäftigte er sich mit Hyperpolarisationsmethoden zur Untersuchung von Diffusionsvorgängen in nanoporösen



Muslim Dvoyashkin

Materialien und trat mit einer Reihe bemerkenswerter Arbeiten zum Nachweis der Single-File-Diffusion in Nanokanälen hervor.

Nach seiner Rückkehr nach Leipzig wendete er sich, nun am Institut für Technische Chemie unter Leitung von Roger Gläser, der Entwicklung neuartiger Magnetresonanzmethoden zur Untersuchung dynamischer Prozesse in nanostrukturierten Materialien für die Katalyse zu. Dazu gehören die Anwendung der Hochfeld-Gradienten-NMR bei der Erforschung molekularer Massenübertragungsphänomene in katalytisch aktiven Materialien in Zusammenarbeit mit Jürgen Haase am Felix-Bloch-Institut für Festkörperphysik und die In-situ-

und Operando-Erkennung der Reaktionsdynamik in katalytischen Mehrphasensystemen in Kooperation mit Jörg Matysik am Institut für Analytische Chemie. Unterstützt von der DFG und der Max-Buchner-Forschungstiftung, verfolgt er diese Aktivitäten seit 2015 als Leiter einer Nachwuchsgruppe.

Jörg Kärger, Leipzig

Aus der Fachgruppe Ernst-Preise 2017

Wie jedes Jahr hat die Fachgruppe auch 2017 im Rahmen der FGMR-Tagung in Bayreuth drei Nachwuchswissenschaftler für eine Publikation mit dem Ernst-Preis ausgezeichnet. Dem Fachgruppenvorstand lagen 13 Nominierungen vor, deren hohe Qualität die Entscheidung auch in diesem Jahr nicht leicht gemacht hat. Auf der

Grundlage externer Gutachten von international renommierten Experten konnten jedoch drei Preisträger ausgewählt werden, die mit ihren Arbeiten sehr eindrücklich die große methodische Breite der Magnetresonanz repräsentieren. Wir gratulieren sehr herzlich!

jl



Für Ihre Arbeit *Bis-Gadolinium Complexes for Solid Effect and Cross Effect Dynamic Nuclear Polarization* in der Angewandten Chemie wurde **Monu Kaushik** (Universität Frankfurt) mit dem diesjährigen Ernst-Preis ausgezeichnet. Unter der Betreuung von Björn Corzilius studierte sie DNP mit Gd(III) als paramagnetischem Zentrum. Durch die Messung von Komplexen mit verschiedenen Gd(III)–Gd(III)-Distanzen konnten sie zeigen, daß es auch für diese Spezies einen distanzabhängigen Cross-Effect-Mechanismus gibt. Wengleich die DNP-Verstärkung durch Gd(III) geringer ist als für Nitroxid-Biradikale, wird der Einsatzbereich für DNP durch diese Studie auch auf Szenarien erweitert, in denen Nitroxidradikale nicht stabil sind, beispielsweise bei intrazellulären Anwendungen.

Bis-Gadolinium Complexes for Solid Effect and Cross Effect Dynamic Nuclear Polarization
Angew. Chem. Int. Ed. **2017**, *56*, 4295–4299.
DOI: 10.1002/anie.201612388

Die Segmentdynamik in hochverschlaufenen Polymerschmelzen war bislang nicht in allen Größenordnungen bekannt. Mit der Arbeit *Segmental dynamics of polyethylene-alt-propylene studied by NMR spin echo techniques* im *Journal of Chemical Physics* schließt **Artur Lozovoi** (TU Ilmenau) unter der Betreuung von Siegfried Stapf durch Messungen von Segmentverschiebungen über sieben Größenordnungen insbesondere die bisherige Lücke im Millisekundenbereich. Besonders originell ist hierbei, daß die Beiträge von inter- und intramolekularer Dipol-Dipol-Wechselwirkung durch Isotopenverdünnung separiert werden konnten. Die Implementierung einer neuen Festkörperecho-Methodik rundet diese theoretisch und experimentell weit überdurchschnittliche Arbeit ab.

Segmental dynamics of polyethylene-alt-propylene studied by NMR spin echo techniques
J. Chem. Phys. **2017**, *146*, 224901.
DOI: 10.1063/1.4984265



Eine Reihe von wichtigen Proteineigenschaften wie dem Transport- oder Aggregationsverhalten in Zellen werden durch sogenannte „crowding conditions“ beeinflusst, in denen Proteine einer komplexen physikalischen Kolloiddynamik unterworfen sind. Unter der Betreuung von Kay Saalwächter untersuchte **Matthias Roos** (Universität Halle-Wittenberg) in seiner Arbeit *Coupling and Decoupling of Rotational and Translational Diffusion of Proteins under Crowding Conditions* im *Journal of the American Chemical Society* drei unterschiedliche Proteine und gelangte so zu einer theoretisch anspruchsvollen Beschreibung ihrer translationalen und rotationalen Diffusion in verschiedenen Konzentrationsbereichen. Die Ergebnisse dieser Arbeit sind von grundlegender Bedeutung und werden wichtige Folgeuntersuchungen in diesem Bereich anstoßen.

Coupling and Decoupling of Rotational and Translational Diffusion of Proteins under Crowding Conditions
J. Am. Chem. Soc. **2016**, *138*, 10365–10372.
DOI: 10.1021/jacs.6b06615



Vorschau

Termine 2018

Tagungen

■ 6th Practical Applications of NMR in Industry Conference (PANIC)

4. bis 8. März 2018
La Jolla, CA (USA)

Latest developments in the use of NMR for problem solving in industry are presented and discussed among a diverse group of attendees that include regulatory, industrial, government, and academic experts.

<https://www.panicnmr.com/>

■ 40. Tagung Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie

20. und 21. März 2018
Mainz

Diese Tagung beschäftigt sich vor allem mit anwendungsbezogenen Problemen und Fragestellungen der NMR-Spektroskopie und ist eine wichtige Plattform für den Austausch zwischen NMR-Nutzern aus Hochschulen, Behörden und Industrie. Anmeldung möglich bis 5. März 2018.

<https://www.analytik.chemie.uni-mainz.de/pp2018/>

■ Analytica Conference

10. bis 12. April 2018
München

Analytica conference is the scientific heart of analytical chemistry. It brings together suppliers, users and researchers. In doing so, analytica promotes interdisciplinary collaboration at the international level.

<http://www.analytica.de/trade-fair/supporting-program/analytica-conference/>

■ 59th Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (ENC)

29. April bis 4. Mai 2018
Orlando, FL (USA)

The ENC includes hundreds of oral and poster presentations that showcase the hottest topics and highlight the intellectual diversity of NMR. The program features talks, tutorial lectures, hundreds of posters, and an after-dinner lecture. Deadline for abstract submission March 26, 2018.

<http://www.enc-conference.org/>

■ EUROMAR 2018

1. bis 5. Juli 2018
Nantes (Frankreich)

Latest scientific breakthroughs in magnetic resonance in broad range of scientific fields, ranging from physics and chemistry to biology and medicine. Deadline for abstract submission April 23, 2018.

<http://www.euromar2018.org/>

■ 28th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (ICMRBS)

19. bis 24. August 2018
Dublin (Irland)

ICMRBS is a well-established biennial NMR conference covering novel developments in the use of magnetic resonance in biological systems and in the rapidly growing field of macromolecular structure characterisation by various magnetic resonance techniques. This conference includes sessions on solution-state NMR, solid-state NMR, EPR, MR imaging, Metabolomics and all other related areas.

<https://www.eiseverywhere.com/ehome/28icmrbs2018/>

■ 40. Diskussionstagung der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie (FGMR)

10. bis 13. September 2018
Leipzig

Deadline for abstract submission July 1, 2018.

<http://fgmr-2018.chemie.uni-leipzig.de/>

■ Small Molecule NMR Conference (SMASH) 2018

16. bis 19. September 2018
Philadelphia, PA (USA)

Vorträge zu Entwicklungen aus unterschiedlichen Bereichen der Kleinmolekül-NMR

<http://www.smashnmr.org/>

■ NMR Summit 2018

10. und 11. Oktober 2018
Würzburg

Tagung und Workshop zum Thema quantitative NMR.

<https://go.uniwiue.de/qnmr2018>

Schulen und Workshops

■ Summer School Theory of NMR, Part IV

Prof. Dr. Jörg Matysik (Organisator)

25. Februar bis 3. März 2018
Schloss Windischleuba (bei Leipzig)

The school will focus on hyperpolarized NMR. The subjects of the school will cover: CIDNP, DNP, ONP, PHIP, optical pumping, LLS, Haupt effect.

<https://analytik.chemie.uni-leipzig.de/start/ak-prof-matysik/summer-school-iv-2018/>

■ EMBO-Workshop Challenges for Magnetic Resonance in Life Sciences

27. bis 31. Mai 2018
Grosseto (Italien)

This EMBO Workshop aims at grouping scientists proposing the most advanced NMR and EPR applications together with experts in combining magnetic resonance techniques with other structural and computational tools. Their synergistic application and the exploration of potential promising approaches represent key points for improving the description of the structural, dynamic and functional properties of the biomolecules inside living cells and involved in specific cellular pathways, and for addressing some of the major fundamental questions in life sciences.

<http://meetings.embo.org/event/18-nmr/>

■ Summer School 1D and 2D NMR Spectroscopy in Liquids

Arbeitsgruppe NMR-Spektroskopie (AG-NMR) in der Gesellschaft Österreichischer Chemiker (GÖCh)

9. bis 14. September 2018
Niederöblarn im Ennstal, Steiermark (Österreich)

Zwölf Vorträge von NMR-Spezialisten aus Industrie und akademischen Forschungseinrichtungen befassen sich mit folgenden Themenkreisen: Prinzipien der 1D und 2D-NMR, Formalismen und Computersimulationen, experimentelle NMR-Techniken sowie die Anwendung von NMR-Spektren bei der Strukturbestimmung von kleinen Molekülen und Biopolymeren. In Tutorien und kleinen Übungsgruppen werden die Interpretation

von NMR-Spektren, NMR-Theorie, Strukturaufklärung von Biopolymeren sowie Computeranwendungen und NMR-Software vertiefend diskutiert.

<https://nmr-summer-school.uni-graz.at/en/program/>

■ 4. G-NMR-Schule

Prof. Dr. Christian Griesinger

8. bis 12. Oktober 2018
Göttingen
Nähere Informationen folgen später.

Fortbildung

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung

Prof. Dr. Reinhard Meusinger

5. bis 9. März 2018
Frankfurt am Main

Grundlagenkurs: Spektreninterpretation, Struktur-Spektren-Beziehungen, 100 NMR-Übungen, Verifizierung, Konstitutionsbestimmung.

<http://www.gdch.de/fortbildung>

■ GDCh-Kurs Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter

Dr. Johannes Liermann

3. bis 5. September 2018
Mainz

Grundlegendes Verständnis der Funktion moderner NMR-Spektrometer, Durchführung gängiger NMR-Experimente, typische Fehler und Probleme.

<http://www.gdch.de/fortbildung>

■ GDCh-Kurs NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

Prof. Dr. Reinhard Meusinger

29. Oktober bis 1. November 2018
Frankfurt am Main

Fortgeschrittenenkurs: Strukturaufklärung, 2D-NMR, Datenbanken, Gemischanalytik.

<http://www.gdch.de/fortbildung>

■ Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie

Prof. Dr. Jörg Matysik

8 Kurse im Studienjahr 2018/19 ab Oktober 2018
Leipzig

Zusatzqualifikation zum Fachchemiker (Fachingenieur) für Analytik und Spektroskopie. Das Aufbaustudium ist für Teilnehmer mit Hoch- oder Fachhochschulabschluss in Chemie konzipiert, Absolventen einer anderen naturwissenschaftlich-technischen Fachrichtung können jedoch ebenfalls teilnehmen.

<http://analytik.chemie.uni-leipzig.de/aufbau-studium>

ISMAR - The IEEE International Symposium on Mixed and Augmented Reality



Mixed Reality (MR) and Augmented Reality (AR) allow the creation of fascinating new types of user interfaces, and are beginning to show significant impact on industry and society. The field is highly interdisciplinary, bringing together signal processing, computer vision, computer graphics, user interfaces, human factors, wearable computing, mobile computing, computer networks, displays, sensors, to name just some of the most important influences. MR/AR concepts are applicable to a wide range of applications. Since 1998, ISMAR and its forerunner events, IWAR, ISAR and ISMR, have been the premier forums in this vital field.

[ISMAR on Wikipedia](#)

[ISMAR on Twitter](#) [ISMAR LinkedIn Group](#) [YouTube](#) [flickr](#)

Upcoming symposium

ISMAR 2018, Munich, Germany

The 17th International Symposium on Mixed and Augmented Reality (ISMAR 2018) will be held in October in Munich, Germany.

Entgegen anderslautenden Gerüchten müssen wir 2018 nicht auf die ISMAR verzichten...



Aus der Fachgruppe

Waldi Bauer im Ruhestand

In der deutschen NMR-Community gibt es sicher kaum jemanden, der dem freundlichen Herrn mit fränkischem Akzent noch nicht begegnet wäre – hilfsbereit, distinguiert und mit seiner zurückhaltenden, herzlichen Art schon vom ersten Augenblick äußerst einnehmend. Die Rede ist natürlich von Walter „Waldi“ Bauer.

Der gebürtige Bamberger studierte – nach einem kurzen Abstecher in die Rechtswissenschaften – Chemie und Biologie auf Lehramt in Regensburg. An das Staatsexamen schloß sich eine Promotion über Lithium-Enolat-Heptafulvene bei Jörg Daub an. Das Lithium ließ ihn auch nach seinem Postdoc-Aufenthalt bei Dieter Seebach in Zürich nicht los, mit NMR-spektroskopischen Untersuchungen von Lithium-Organen hat er sich, zurück in der fränkischen Heimat an der Universität Erlangen-Nürnberg, einen Namen gemacht. Im vergangenen Jahr ist er nun in den Ruhestand eingetreten.

Walter Bauer hat sich neben seinen Forschungsinteressen auch sehr um das Fortbestehen der Gemeinde der „kleinen“ NMR-Laborleiter aus dem Routine- und Kleinmolekülbereich verdient gemacht. Als perfekter Gastgeber und Organisator der jährlichen Diskussionstagungen („Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“) hat er diese Gruppe auch in schwierigen Zeiten zusammengehalten. Mit ehrlichem Respekt gegenüber den manchmal mehr und manchmal weniger wissenschaftlichen Problem-



stellungen der Beiträge auf „seiner“ Tagung konnte er so eine wichtige Plattform für alle NMR-Anwender etablieren, als Gegengewicht zum kommerziellen Familientreffen eines großen Herstellers und zu der sehr akademischen und von großen, forschungsstarken Gruppen dominierten Fachgruppentagung.

Eines ist er aber in seiner beruflichen Laufbahn gewiß nicht geworden: ein verstaubter Beamter. Als begeisterter Rockmusiker spielt er nicht nur in mehreren Bands, sondern macht auch vor NMR-Spektrometern nicht halt: durch Manipulation der ^1H -NMR-Frequenz von Aceton brachte er sie zum Klingen, mit Stücken von Bach bis zu den Beatles. Wir sind sicher, daß er dieses Hobby auch in seinem Ruhestand weiter verfolgen wird – wer hier auf dem laufenden bleiben will, muß nur nach „Waldi Bauer“ auf Youtube suchen.

Im Namen aller, die das Vergnügen haben ihn zu kennen, möchten wir uns an dieser Stelle von ganzem Herzen bei ihm bedanken, auch wenn wir wissen, dass wir seiner Person durch einige dürre Zeilen nicht gerecht werden.

jl, nes

Ausschreibungen

Richard R. Ernst Prize 2018 (EUROMAR)

Dear Colleague,

We are asking for nominations for the “Richard R. Ernst Prize in Magnetic Resonance” (Ernst Prize), named after magnetic resonance pioneer and Nobel Laureate Prof. Richard R. Ernst, which will be awarded at the EUROMAR 2018 in Nantes to recognize ‘recent beneficial applications of Magnetic Resonance’.

The Ernst Prize is intended to award achievements going beyond fundamental research, for groundbreaking applications of new or of previously known techniques in all areas of magnetic resonance. It is intended for research published within the last three years, although the origins of the ideas and experiments may have been described in previous publications. In special cases, and at the discretion of the Prize Committee, the award may be for cumulative achievements over a longer period of time. The Ernst Prize is intended to be awarded to a single individual; however, it may be awarded to up to three scientists if the Prize Committee deems that their contributions to the development of the applications are of equal value. Former prize recipients are Alex Pines (2016) and Robert Griffin (2017).

The Prize comes with a purse of 10,000 Euros; it is sponsored by the Bruker BioSpin Corporation, and is awarded annually at the EUROMAR conference.

The 2018 Ernst Prize committee is made by Profs. Lucia Banci (chair), Lucio Frydman, Alex Pines, Robert Griffin, Wiktor Kozminski, Patrick Giraudeau and Hartmut Oschkinat.

Nominations must include and fulfill the following conditions:

- Nominations must include the nominee’s name, affiliation, address, phone number, and e-mail
- Nominations must include a brief (ca. 200 words) description of the work serving as the basis for the nomination, and a list of relevant publications (~5).
- Nominees may not have received the Guenther Laukien Prize or the Russell Varian Prize in the preceding five years.
- Self-nominations are not accepted
- Nominations for the 2018 Ernst Prize will be considered until February 16, 2018 to Lucia Banci, the Chair of the Ernst Prize Committee.

On behalf of the Euromar Board of Trustees and of the Ernst Prize Committee

Thomas Prisner
(Chair, Euromar Board of Trustees)
Prisner@Chemie.Uni-Frankfurt.de

Lucia Banci
(Chair of the Ernst Prize Committee)
banci@cerm.unifi.it



Arbeitsbereiche

Wissenstransfer durch internationale qNMR-Summits

In den letzten Jahren hat sich die quantitative NMR Spektroskopie quasi zu einer eigenständigen Disziplin entwickelt, die bereits als offizielle Methode eingesetzt wird und Einzug in die europäische, japanische und amerikanische Pharmacopoeia gehalten hat. Anforderungen nach GxP Compliance, System- und Qualitätstests, Ringversuchen, Referenzmaterialien, Applikationen sowie (automatische) Auswertungen stehen besonders im Raum. Zudem wird von unterschiedlichen Seiten eine Validierung der qNMR gefordert, wobei die Meinungen von Behörden und NMR-Wissenschaftlern stark auseinandergehen. Im optimalen Falle ist die qNMR als Primärmethode und somit als valide anzusehen, ähnlich einer Waage. Andere Bestrebungen gehen dahin, qNMR-Validierungen an die bestehenden sehr umfangreichen chromatographischen Vorgaben wie z. B. nach ICH anzulehnen.

Der Startschuss der deutschen qNMR-Meetings fiel im Juni 2016 bei Spectral Service in Köln. Geleitet von Dr. Bernd Diehl und Elina Zailer wurde die Notwendigkeit der Vereinigung der Diskussionsgruppen europäischer, japanischer und amerikanischer qNMR-Experten, die eine konzentrierte Handlung im Bereich der NMR-Spektroskopie anstreben, verdeutlicht. Somit entwickelte sich im letzten Jahr eine enge Zusammenarbeit von zahlreichen NMR-Experten, die ihr Wissen auf zahlreichen qNMR-Meetings und Summits sowie der Practical Applications of NMR in Industry Conference (PANIC) austauschen. Das erste qNMR Summit wurde im Oktober 2016 in der Zentrale der United States Pharmacopoeia (USP) in Rockville, MD (USA) als Kooperation mit dem Center for Natural Product Technologies (CEN-APT) der Universität Illinois von Chicago College of Pharmacy veranstaltet. Bereits im März 2017 fand unter der Leitung von Dr. Michael Maiwald

das nächste zweitägige qNMR Summit bei der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin, Deutschland, statt. Der letzte qNMR Day wurde von der Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche (GIDRM) unter Leitung von Prof. Dr. Vito Gallo am 24. November 2017 in Bari, Italien, organisiert. Im Rahmen von 12 Vorträgen wurden die neusten Entwicklungen bezüglich Anforderungen nach GxP Compliance, Ringversuchen, Referenzmaterialien, Auswertungen und Applikationen präsentiert. Das diesjährig erste qNMR Summit fand bereits im Januar in Tokio, Japan, statt. Am ersten Tag stand hierbei das Thema der unterschiedlichen internationalen NMR-Standards und Richtlinien im Fokus. Am zweiten Tag wurde die (quantitative) NMR in Hinblick auf die Pharmacopeias beleuchtet und diskutiert. Und auch die kommenden wichtigen Daten stehen schon fest:

- PANIC+Validation Workshop, La Jolla, Kalifornien, 4. bis 8. März 2018
- qNMR Summit, Würzburg, Deutschland, 10./11. Oktober 2018

Weitere Informationen zu den bisherigen und zukünftigen qNMR Events finden Sie unter:

- <http://www.qnmrsummit.com/>
- <http://www.validnmr.com/qnmr-events/>

*Elina Zailer
Spectral Service, Köln*

Nachgefragt

Zum 75. Geburtstag von Hans Wolfgang Spiess



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

In der Doktorarbeit bei Professor Hermann Hartmann im Institut für Physikalische Chemie an der Universität Frankfurt am Main im Herbst 1966. Ge-

messungen habe ich die Anisotropie der chemischen Verschiebung von Kobalt-Komplexen (5–70 kHz) neben enorm großen Quadrupolkopplungen bis 165 MHz mit einem 60 MHz Elektromagneten. Mir war damals schon bewusst, dass solche Messungen in den kurz danach zugänglich werdenden supraleitenden Magneten wesentlich besser und genauer durchgeführt werden könnten. Tatsächlich hat es fast drei Jahrzehnte gedauert, bis dies durch MQ MAS für kleinere Quadrupolkopplungen realisiert wurde.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Die Messung ‚ultralangsamere Bewegungen‘ auf einer Zeitskala von mehreren Minuten mit ^2H - ‚Spin-Alignment‘.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Die für mich wichtigsten NMR- und EPR-Experimente haben heute als wesentlichen Anteile die Bildung und Beobachtung von Spin Echos.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Wie sagt man doch? Ich liebe meine Frau, kein Spektrometer.

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

In meinen Arbeitsgebieten spielt Physik/Theorie immer eine entscheidende Rolle. Hier tummeln/tummelten sich oft Gestalten, so auch ich, die sich ein erfolgreiches Physik-Studium nicht zutrauten und so in der Physikalischen Chemie landeten.

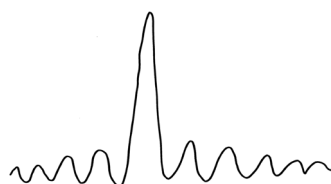
In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?

Signalsteigerung durch Hyperpolarisation.

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

Erfolgreiche Signalsteigerung durch Hyperpolarisation und ‚defect spin sensors‘.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ich habe ein ^2H -NMR-Echo gezeichnet – arbeitet heute noch jemand mit FIDs?

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Studium an der Goethe Universität Frankfurt, Wanderjahre mit Stationen in Florida, Heidelberg, Mainz, Münster, Bayreuth; zur Ruhe gekommen und zur Ruhe gesetzt am MPI in Mainz. Jahrzehntelange Zusammenarbeit mit Chemikern und Physikern in verschiedenen Konstellationen als Schüler, Kollege, Lehrer.

Hans Wolfgang Spiess (Mainz) wurde am 14. Oktober letzten Jahres 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!



Nachgefragt

Zum 85. Geburtstag von Joachim Buddrus



Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Ja. Experimente, die Linienverbreiterungen liefern. Stichwort „Dynamische NMR-Spektroskopie“

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Geboren 1932 in Ostpreußen. Diplomiert 1959 bei Nobelpreisträger Alder („Diels-Alder-Synthese“). Vorlesungen in Berlin und Wuppertal. Lehrbuch „Grundlagen der Organischen Chemie“ 5. Auflage.

Joachim Buddrus (Dortmund) wurde am 2. Mai letzten Jahres 85 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

Auszeichnungen

Bernd Reif erhält Laukien-Preis 2017

Prof. Dr. Bernd Reif (TU und Helmholtz-Zentrum München) hat am 27. März 2017 während der 58th ENC in Asilomar, Pacific Grove, California, USA, den Günther-Laukien-Preis 2017 erhalten. Der Preis beinhaltet ein Preisgeld von 20.000 US\$ und wird alljährlich von der Firma Bruker Biospin gestiftet. In diesem Jahr wurde der Preis mit Prof. Dr. Kurt Zilm, Yale University, geteilt.



*Bernd Reif
Foto: ENC*

Der Günther-Laukien-Preis, der seit 1999 vergeben wird, honoriert innovative methodische Entwicklungen auf dem Gebiet der experimentellen NMR-Spektroskopie, die mit grosser Wahrscheinlichkeit zu nutzbringenden neuen Anwendungen führen und ist der renommierteste Preis auf dem Gebiet der NMR-Methodenentwicklung.

Mit Prof. Reif wurde zum zweiten Mal ein in Deutschland arbeitender Wissenschaftler ausgezeichnet. Bernd Reif erhält den Laukien-Preis 2017 in Anerkennung seiner Arbeit zur Detektion von Protonen in der biologischen MAS (Magic Angle Spinning) Festkörper-NMR-Spektroskopie. Dr. Reifs gegenwärtige Forschung zielt auf die Entwicklung von Festkörper-NMR-Methoden zur Charakterisierung von Struktur und Dynamik von Proteinen in der festen Phase, sowie auf die Anwendung von Lösungs- und Festkörper-NMR zur Untersuchung von amyloidogenen Peptiden und deren Wechselwirkung mit Kleinmolekülen und molekularen Chaperonen, wie z. B. dem kleinen Hitzeschockprotein α B-CrySTALLIN.

Text: ENC