



GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

01/2024 • 67. Ausgabe

MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanz
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist Sommer. Das Jahr ist zur Hälfte rum. Und wir möchten Ihnen in die sommerliche Pause gern den ersten MARS 2024 senden. Neben den eigentlich schon obligatorischen Geburtstagsinterviews, dieses Mal mit Albrecht Khuen, Gerd-Joachim Wolff und Heinrich Marsmann, freuen wir uns, zwei Buchbesprechungen im Gepäck zu haben. Christian Griesinger bespricht das neue Buch von Horst Kessler und Nils Schlörer rezensiert das qNMR-Buch von Schönberger et al. Ferner erläutert uns Peter Bigler das frei zur Verfügung stehende NMR-Tutorial auf der Webseite der Uni Bern. Zu Beginn steht allerdings erneut ein Nachruf: einer der Mitgründer unserer Fachgruppe sowie ehemaliger Vorsitzender und NMR-Technikbegeisterte Dieter Ziessow ist Anfang des Jahres verstorben – für uns besonders wichtig ist, dass er 1982 auch Gründungsredakteur des MARS war. Zum Schluss berichtet die Berlin/Potsdamer-NMR-Community von der Einrichtung eines Stammtisches für alle Interessierten.

Wir danken allen Autorinnen und Autoren der Beiträge und senden sonnige Grüße!

Ihre MARS-Redaktion

Inhalt

Nachruf auf Dieter Ziessow	2
NMR-Tutorial	4
qNMR: the handbook	6
NMR – Mein Kompass in der Organischen und Medizinischen Chemie	7
Zum 75. Geburtstag von Albrecht Khuen .	10
Zum 75. Geburtstag von Gerd-Joachim Wolff	11
Zum 85. Geburtstag von Heinrich Marsmann	12
Treffen von Berliner & Potsdamer NMR Laborleiter*innen	13

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

Aus der Fachgruppe

Nachruf auf Dieter Ziessow

Um Dieter Ziessow war es im letzten Jahrzehnt ungewöhnlich still geworden; die Alzheimer-Krankheit hatte ihn erfasst. Die Nachricht von seinem Tod, wenige Tage vor seinem 84. Geburtstag am 28. Februar 2024, hat viele seiner Weggefährt:innen in der internationalen NMR-Welt, aber auch weit darüber hinaus überrascht und sehr berührt.

Er wurde 1940 in München geboren, allerdings zogen Ziessows Eltern bald nach Berlin in die Siemensstadt, und (West-)Berlin wurde seine Heimat. Dort absolvierte er 1959 ein exzellentes Abitur und studierte an

der TU Berlin (TUB) sein Traumfach Chemie, sowie gleichzeitig Mathematik und Theoretische Physik. 1965, direkt nach der Diplomprüfung ernannte ihn die TUB zum wissenschaftlichen Assistenten am Iwan-N.-Stranski-Institut für Physikalische Chemie.

Dieter Ziessow näherte sich der NMR-Spektroskopie mehr aus der Perspektive der Physik und des Bauens von NMR-Apparaturen. Sein Doktorvater war der früh verstorbene Institutsleiter Ernst Lippert (1922–1982), ein Schüler des Physikers und IR-Pioniers Reinhard Mecke (1895–1969), Freiburg. Das Thema seiner Doktorarbeit (1969) lautete: „Torrey-Oszillationen in der heteronuklearen Doppelresonanz. Beschreibung der Methode und ihrer Anwendung auf C-13-mono und -disubstituierte Moleküle natürlicher Häufigkeit“.

Das ummauerte West-Berlin verließ Dieter Ziessow regelmäßig für viele Forschungsaufenthalte und Tagungen, zum ersten Mal, als er 1969–1970 Research Assistant an der Yale University,



(Foto: Viola Ziessow, 2018)

School of Medicine, Section Physical Sciences in New Haven wurde. Dort traf er Daniel D. Traficante, damals Director of the NMR Lab at Yale University. Traficante gründete später die Zeitschrift *Concepts in Magnetic Resonance*, und zusammen mit Dieter Ziessow gab er mehrmals pro Jahr weltbekannte NMR-Ausbildungskurse an vielen Orten.

Die beiden Leidenschaften, Entwicklung neuer rechnergesteuerter NMR-Techniken und Lehre führten Ziessow zur lebenslangen beruflichen Zusammenarbeit und privaten Freundschaft mit Tony Keller und Daniel Traficante.

Mit Tony Keller (Bruker) verband Ziessow, dass Tony Keller am Stranski-Institut das erste NMR-Spektrometer mit einem Feld-Frequenz-Lock installiert hatte. „Tony entwickelte die Elektronik des Nachts, während die anderen Mitarbeiter von Bruker die Institutsführung zum Essen ausgeführt hatten...“ so Bernhard Blümich, einer seiner ersten Doktoranten.

1975 war Dieter Ziessow zum AH4-Professor berufen worden. Im Souterrain des Ernst-Reuter-Hauses war die große und geräumige Werkstatt für seine Mitarbeiter sowie Diplomanden und Doktoranden aus der Informatik, der Chemie und der Physik.

Rechner-Racks wurden installiert, Rechenprogramme entwickelt und geschrieben, normale NMR-Spektrometer wurden ausgeschlachtet, erweitert und umgebaut. „Einmal brachte Daniel Traficante zwei Frequenzdekaden aus den USA im Handgepäck mit, welche Ziessow dringend für sein Spektrometer benötigte; aber er hatte nicht das Geld oder die Möglichkeit für den regulären



D. Ziessow 1984 am Rechner in der Werkstatt (Foto: E. E. Wille)

Import aus den USA“, so Bernhard Blümich. Stolz war Ziessow auf den erstmaligen Aufbau einer NMR-Apparatur, die durch einen „General Purpose Prozessrechner“ (IBM 1800, synchroner Prozessor) steuerbar war; das war 1972!

Im fünften Stock des legendären Ernst-Reuter-Hauses (erbaut 1938 an der heutigen Straße des 17. Juni) befand sich das Iwan-N.-Stranski-Institut. Dort waren die Büros der Professoren und Mitarbeiter, und dort fanden Seminare, Prüfungen, Antrageschreiben etc. statt. Mit dem Fahrrad ging es zu den Hörsälen der TUB, zu den Gremiensitzungen, zwischendurch nach Hause zu den beiden Töchtern in die Carmerstraße, ebenfalls in Charlottenburg unweit des Hauptgebäudes der TUB, und am Freitag bis zur Wiedervereinigung zur großen Wiese vor der Ruine des Reichstagsgebäudes zum AK-Fußballspiel. Danach fuhr er in die fabelhaft ausgestattete, natürlich selbstgebaute Küche, um grandios zu kochen und zu bewirten, oder eben zurück an den Rechner, an den Schreibtisch, in die Werkstatt. Es waren die Zeiten der „instabilen Magneten“, der kleinen Prozessoren, Speicher, die Anfänge der FT-NMR-Spektroskopie und mehrdimensionalen NMR-Techniken. Ziessow interessierte Strukturaufklärung und die Dynamik von (Bio-)Molekülen, NMR mit stochastischer Anregung, Systemtheorie höherer Ordnung, Linear Prediction, MEM, neuronale Netze, numerische Verfahren aller Art.

Chemie-Studenten vieler Generationen begeisterte Dieter Ziessow an der TUB und später auch bei seiner Aufbauarbeit in Indonesien durch seine PC-Vorlesungen. Humorvoll modernisierte er die Lehre, war nicht zuletzt dafür auch Dekan, Mitglied des Akademischen Senats sowie Mitglied und Vorsitzender des Konzils (natürlich

der Reformfraktion) geworden. Arbeitsgruppenmitglieder erzählen von seinem T-Shirt mit der Gibbs-Helmholtz-Gleichung, das er unter seinem Oberhemd trug und bei passender Gelegenheit zeigte.

Ziessow gehört zu den Gründern der FG MR, er war im ersten Vorstand Beisitzer und übernahm von Horst Kessler, dem ersten Vorsit-

zenden, den Vorsitz. Mit ihm führte er im Rahmen des GDCh-Fortbildungsprogramms viele in die 2D-NMR-Spektroskopie ein. Zusammen mit Klaus Roth und Wolfgang Bremser gehörte er zudem ab 1982 zur ersten Redaktion des MARS.

Er widmete sich bereits vor(!) dem Internet der „verteilten Spektroskopie“ in der Nutzergruppe Chemie des Deutschen Forschungsnetztes (DFN), und im 21. Jahrhundert war er einer der Initiatoren des BMBF-Leitprojektes „Vernetztes Studium“, organisierte viele Treffen wie auch 1986 den legendären ersten Workshop „Computer in der Chemie“ in Hochfilzen. Diesem Thema blieb er treu und übernahm 1997–2004 den Vorsitz der GDCh-Fachgruppe „Chemie-Information-Computer (CIC)“.

Nach seiner Emeritierung 2005 als Professor für Allgemeine und Physikalische Chemie war er weiter kreativ aktiv, arbeitete an der Neukonzeption seines bereits 1973 erschienen Werkes „On-Line Rechner in der Chemie: Grundlagen und Anwendung in der Fourierspektroskopie“,¹ liebte seinen regelmäßigen Hochschulsport, Skifahren, NMR-Kurse, den Aufbau der Chemie an Universitäten in Indonesien, das Wandern, Radfahren, Musik, das Tanzen, bis ihn die Alzheimer-Krankheit mehr und mehr der liebevollen Sorge durch seine Töchter anheim gab. Viele trauern mit ihnen!

Marco Sielaff
Bernhard Blümich
Eva E.Wille

¹ D. Ziessow, On-Line Rechner in der Chemie: Grundlagen und Anwendung in der Fourierspektroskopie, De Gruyter, 1. Edition (1973), 384 Seiten, ISBN-13: 978-3110039528



Praxis

NMR-Tutorial

Überblick

Das interaktive, elektronische Lernmittel dient dem Erwerb theoretischer und praktischer Kenntnisse, wie NMR Experimente funktionieren. Mit Hilfe eines virtuellen NMR-Spektrometers und entsprechenden Werkzeugen zur Datenverarbeitung erfährt der Anwender in autodidaktischer Weise, wie die Spektren ausgewählter 1D- und 2D-NMR-Experimente zustande kommen und wie diese von den experimentellen Parametern abhängen.

Das auf Englisch abgefasste Tutorial ist auf einer ILIAS-Plattform der Universität Bern lokalisiert – der Zugriff ist ohne Registrierung möglich.

Ausrichtung und Ziele des Tutorials

Das Aussehen der NMR-Spektren und damit auch die daraus abgeleiteten spektralen Parameter hängen, wie man zwar weiss, aber oft zu wenig berücksichtigt, nicht nur von der Struktur des untersuchten Moleküls, sondern auch vom gewählten NMR-Experiment, der Art der Datenverarbeitung und insbesondere den entsprechenden Parametern ab.

Im Gegensatz zu den meisten NMR-Lehrbüchern, die ihren Schwerpunkt auf die Interpretation der Spektren und die Strukturabhängigkeit der spektralen Parameter legen, konzentriert sich das Tutorial deshalb auf das NMR-Experiment, dessen Funktionsweise und den Einfluss der entsprechenden experimentellen Parameter.

Damit soll das notwendige Fachwissen zu diesen wichtigen Themen interaktiv vermittelt bzw. erweitert werden und damit einerseits zur Erhöhung der Qualität und Zuverlässigkeit von NMR-Untersuchungen als auch zur bestmöglichen Nutzung des Potentials moderner Spektrometer beitragen.

Diese Ziele sollen einerseits mit einem Leitfaden, dem Tutorial Guide, mit Hilfe einzelner Module der Bruker Topspin-Software zur Simulation von 1D- und 2D-NMR Experimenten und zur Verarbeitung/Analyse der entsprechenden

Rohdaten, sowie Referenzdateien zur Verifikation erreicht werden.

Das Tutorial ist für „NMR-Einsteiger“, die mit den Grundlagen der NMR-Spektroskopie vertraut sind, konzipiert, dient aber auch der Weiterbildung für fortgeschrittene Benutzer von Spektrometern, die ihr Verständnis zwischen Theorie und Praxis vertiefen möchten.

Das Tutorial eignet sich sowohl zum Einzelstudium als auch im Rahmen von NMR-Kursen für Fortgeschrittene.

Aufbau und Themen des Tutorials

■ About This Tutorial

Überblick über die einzelnen Elemente des Tutorials, den Umfang und die Themen der verschiedenen Kapitel. Für die Hauptkapitel, die je einem repräsentativen NMR Experiment gewidmet sind, wird der Ablauf eines typischen Lernabschnitts – der einen einzelnen Aspekt des Experiments behandelt – aufgezeigt und der Einsatz der Topspin-Module sowie die Verwendung der Verifikationsdateien erläutert.

■ The Basics of NMR in Brief

Kurzgefasster Abriss über allgemeinere Themen wie die Ziele der NMR-Spektroskopie, die Strukturabhängigkeit der spektralen Parameter, die Klassifizierung der NMR-Experimente, das 1D-/2D-Konzept und die Modelle zur Analyse/Simulation von NMR-Pulssequenzen. Die klassischen Schritte einer NMR-Untersuchung und die Grundlagen der Verarbeitung von 1D- und 2D-NMR Daten werden beschrieben. Dieser Teil des Tutorial Guides dient somit der Auffrischung des „NMR-Basiswissens“ sowie der Vorbereitung für die nachfolgenden, experimentbezogenen Kapitel.

■ Software Modules

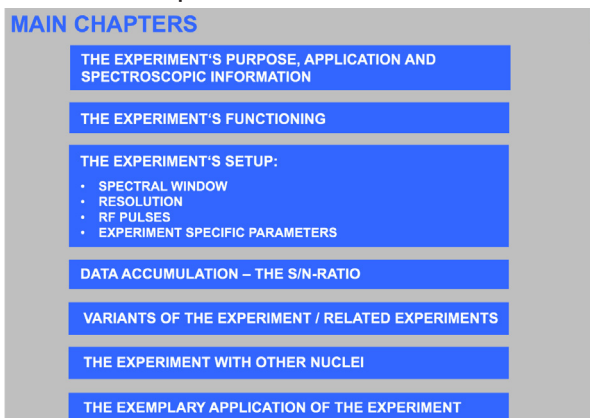
Behandelt die Installation der Software und gibt kurze interaktive Einführungen zur Anwendung der Datenverarbeitungs- und Simulationsmodule (NMRSIM) für damit nicht vertraute Nutzer. Dadurch sollen erste praktische Erfahrungen mit diesen Softwaretools gesammelt und die nötigen Fähigkeiten zur zuverlässigen und effizienten NMR-Simulation und -Datenverarbeitung aufgebaut werden. Da NMRSIM NMR-Roh-

daten (Zeitsignale) liefert, das Resultat von Simulationen aber nur anhand von Spektren (Frequenzsignal) interpretiert werden kann, ist eine adäquate NMR-Datenverarbeitung zwingend.

■ Representative 1D and 2D NMR Experiments

In diesem ausgeprägt interaktiven Teil des Tutorials werden in sieben Hauptkapiteln ausgewählte 1D- und 2D-Pulssequenzen, vorgestellt: 1D ^1H , 1D ^{13}C , 1D ^{13}C APT, 1D ^{13}C DEPT, 1D ^1H , ^1H COSY, 2D ^1H , ^1H COSY, 2D ^1H , ^{13}C HSQC.

Geführte Simulationen mit Hilfe des Tutorial Guide und den beiliegenden Simulationsdateien geben dem Benutzer einen Überblick über Zweck, Anwendungsbereich und spektroskopische Informationen dieser Experimente und erlauben ihm, deren Funktionsweise und den Einfluss der entsprechenden experimentellen Parameter im Detail zu untersuchen und sowohl von der theoretischen als auch praktischen Seite her zu verstehen:

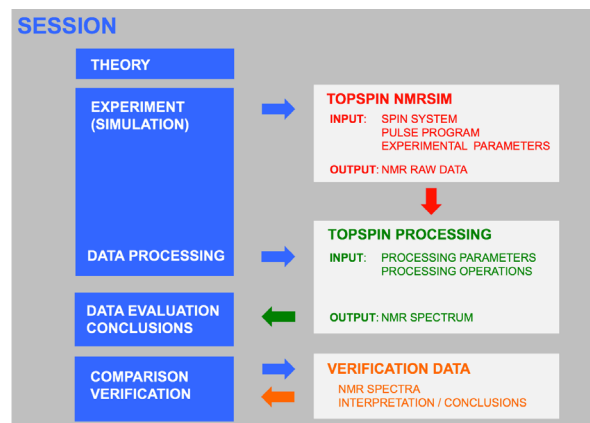


Zum detaillierten Studium der einzelnen Aspekte eines ausgewählten NMR-Experiments, wie die Abhängigkeit seiner Spektren von der Länge einzelner Delays/Pulse oder von Feldgradienten, dienen sogenannte Sessions:

Nach einer bewusst kurz gehaltenen Einführung in die nötigen theoretischen Grundlagen – unter Einbezug des Produktoperator-Formalismus – führt der Anwender, entsprechende Experimente/Simulationen (Check its) sowie die Datenverarbeitung mit Hilfe einzelner Anweisungen und den beiden TOPSPIN Modulen selbständig durch.

Die erhaltenen NMR-Spektren sowie die Evaluation der Simulationsergebnisse und die daraus abgeleiteten Schlussfolgerungen vergleicht, bzw. verifiziert der Anwender schlussendlich mit den

entsprechenden Verifikationsdateien im pdf-Format.



Schlussfolgerung

Mit dem vorgestellten NMR-Tutorial sollen NMR-Anfängern wie fortgeschrittenen Nutzern die nötigen theoretischen und praktischen Fertigkeiten und die nötige Kompetenz zur Bedienung eines NMR-Spektrometers und/oder zur Evaluation/Interpretation von NMR-Spektren vermittelt werden. Das elektronische Format des Tutorials erlaubt dem Benutzer, die Themenauswahl und das Arbeitstempo seinen Bedürfnissen anzupassen, ohne beim Erkunden dieses faszinierenden Gebietes ein reales NMR-Spektrometer zu belasten. Nicht zuletzt soll mit diesem NMR-Tutorial auch die Neugier und das Interesse für die „Mechanik“ und die Vielfalt der Experimente dieser äußerst leistungsfähigen spektroskopischen Analyseverfahren geweckt werden.

Peter Bigler
(Bern)

■ Zugang zum NMR-Tutorial

<https://www.ilias.unibe.ch/link/nmr-tutorial>

■ Kontakt

nmr_tutorial@bluewin.ch

Für Fragen, Anregungen, Hinweise oder bei gewünschter Unterstützung für Einzelanwender oder beim Einsatz in Lehrveranstaltungen

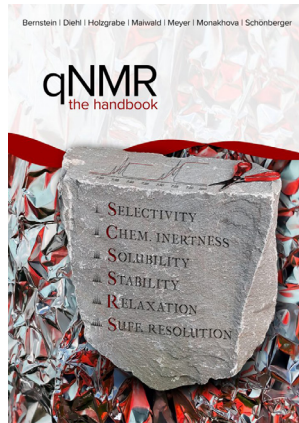


Buchbesprechung

qNMR: the handbook

In den letzten zwei Dekaden ist die quantitative (q)NMR-Spektroskopie zunehmend auch bei „normalen“ NMR-Spektroskopikern ins Bewusstsein gerückt. Viele trauen sich aber nicht an die Materie, weil es von vagen Vorstellungen abgesehen kaum allgemeinverständliche „Praktiker-geeignete“ Literatur für Anfänger gibt. Hier hat sich nun ein Autorenkollektiv ausgewiesener Experten auf dem Gebiet zusammengetan, um Abhilfe zu schaffen.

Um es gleich vorwegzusagen: Das Buch besticht durch seine ansprechende Aufmachung und eine zielgerichtete, leicht verständliche Sprache. Wer „Kochbücher“ wie „200 and More...“ benutzt hat wird hier von einem ähnlichen Konzept überzeugt werden, das über das rein Anwendungsbezogene hinaus aber noch einige Zusatzinformationen bereithält. Nach einem sehr kompakten Überblick über die NMR an sich (hierzu ist dann noch ein eigenes Kapitel nachgeschaltet) und einem ausführlicheren über die Entwicklung der qNMR behandelt das Buch in bester „Hands-on“-Tradition die wichtigsten Themen, die bei der Implementierung



dieser Methode Fragen aufwerfen. Neben unterschiedlichen Konzepten für die Quantifizierung gehen die Autoren ausführlich auf die Probenvorbereitung sowie die technischen/softwareabhängigen Bereich der Spektrenaufnahme, -prozessierung und -analyse. Ein Kapitel zum Arbeiten im QA- und GxP-Umfeld rundet die Betrachtung ab. Ein weiteres, kurzes Kapitel weist auf mögliche Anwendungen im pharmazeutischen Bereich hin.

Zusammenfassend empfiehlt sich dieses Werk für alle diejenigen NMR-Spektroskopiker, die neugierig auf einen ersten Ausflug in die qNMR sind und hierzu eine verlässliche Orientierung suchen. Das Buch ist bislang im Selbstverlag herausgekommen und kann bei den üblichen Online-Händlern für Mitte 60 Euro erworben werden.

nes

■ qNMR: the handbook

M. Bernstein, B. Diehl, U. Holzgrabe, M. Maiwald, K. Meyer, Y. Monakhova, T. Schönberger

BoD – Books on Demand, 2. Edition (6. Februar 2024)

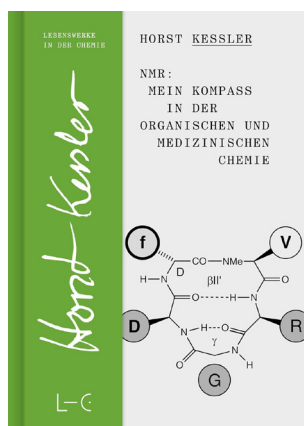
ISBN-13: 978-3756878918

302 Seiten, 65 Euro

Buchbesprechung

NMR – Mein Kompass in der Organischen und Medizinischen Chemie

Horst Kessler legt in der Reihe „Lebenswerke in der Chemie“ „NMR: Mein Kompass in der organischen und medizinischen Chemie“ vor. Es ist in Kapitel eingeteilt, die mal notwendigerweise chronologisch den Lebensweg von Kessler wiedergeben und mal thematisch



sind, wenn es um wesentliche Arbeitsgebiete geht, die Horst Kessler im Lauf seiner wissenschaftlichen Karriere begeistert haben und in denen er jeweils Wesentliches geleistet hat. Der Druck ist ansprechend und gut leserlich. Wissenschaftliche Bilder zur Veranschaulichung der Methoden und Resultate sind im Text und füllen die Breite der Seiten. Bilder von Weggefährten sind am Rand. Horst Kessler versteht es, seine Wissenschaft anschaulich darzustellen und einige Highlights werden im Rahmen der Rezension wiedergegeben. Was darüberhinaus für jeden Menschen, ob Wissenschaftler oder nicht, von Interesse sein dürfte, sind die Erkenntnisse über Menschen in und um die Wissenschaft, die Kessler in die Biographie einwebt: Denn Wissenschaft wird von Menschen vorangebracht und an den Grenzen des Wissens, die Horst Kessler Zeit seines Lebens interessierten, gibt es natürlicherweise unterschiedliche Erkenntnisgrade, mit denen unterschiedliche Menschen unterschiedlich professionell, mal abgeklärt, mal höchst persönlich umgehen. So hat sich Horst Kessler als Doktorand im Seminar mit seinem Doktorvater Egon Müller in Tübingen mit besseren Kriterien für Aromatizität, nämlich Reaktivität und NMR spektroskopisch nachweisbarem Ringstrom, „angelegt“. Müller beharrte auf Farbe als Kriterium und nahm das unabhängige Denken seines Doktoranden krumm. Dies hat Horst Kessler wohl nie vergessen, denn in seiner

ganzen Karriere war ihm das bessere Argument wichtiger als, wer es formulierte, und er war begierig, von den Mitarbeitern zu lernen, statt Sie zu belehren. Blickt man als Wissenschaftler heute, der sich an offene Grenzen und die Welt als globales Dorf gewöhnt hat, auf die ersten Jahre von Horst Kessler in seinem Heimatort Suhl in Thüringen und später Studium in Leipzig, so wird man in die Nachkriegszeit mit innerdeutscher Mauer zurückgeworfen, in der fehlende Linientreue trotz schulischer Bestnoten einen Studienplatz verhinderte. Aber auch oppressive Systeme sind löchrig und Horst Kessler fand in dem Leipziger Professor Leopold Wolf einen Förderer, der ihm einen Studienplatz an der Leipziger Universität, die ihm viele Jahrzehnte später den Ehrendoktor verlieh, vermittelte. Kessler war aber nicht nur findig, sondern hatte auch feine Antennen, die DDR Propaganda zu durchschauen: „Wir haben keine Absicht, eine Mauer zu bauen“ konterkarierte mit den publizierten Wanderungsbewegungen von Ost nach West 1961, die extrapoliert zu einer menschenleeren DDR nach einem weiteren Jahr geführt hätte. Also plante Kessler seine Flucht so methodisch und sorgfältig wie ein chemisches Experiment. Allein diese Seiten rechtfertigen den Kauf des Buches. Die Flucht gelang am 4. August 1961, nur 9 Tage vor dem Mauerbau. Gerhard Quinkert, sein und mein Kollege in Frankfurt, erzählte mir, dass ihn diese methodische Planung derart überzeugt hatte, dass er seine Berufung im jugendlichem Alter von knapp 31 Jahren, 1971 nach Frankfurt betrieb.

Horst Kessler hat immer Felder aufgetan, die etablierte Felder verbanden. Das erste war die systematische Untersuchung von Kinetiken organischer Moleküle: Kessler schreibt: „Allerdings hatten Physikochemiker meist nicht die richtigen Moleküle, die Austauschkinetik zur Lösung mechanistischer Fragestellungen detailliert zu untersuchen. Umgekehrt verstanden die Organischen Chemiker meist zu wenig von den NMR-Phänomenen. Das eröffnete mir ein ideales Arbeitsfeld, die „weiße Landkarte“ der intramolekularen Beweglichkeiten mit atomaren Sonden zu erschließen.“ Die atomaren Sonden sind die Resonanzen der Atomkerne in der NMR. Als Highlight möge hier die Zusammenfassung der Arbeiten, publiziert in dem Angewandte Klassiker von 1970, dienen, der ihm eine Schiedsrichterrolle bei einer Bürgerstockkonferenz (dem Olymp der Organiker damals) und die erste Auslandseinladung nach Sheffield einbrachte. Bei der Tagung war auch der kürzlich verstorbene Albert Eschenmoser zuge-



gen, der seinen Freund und Kollegen Gerhard Quinkert aufforderte, Kessler zum Berufungsvortrag für die vakante Professur in Frankfurt einzuladen. Vier Tage vor seinem 31. Geburtstag trat er die Stelle als jüngster Chemie-Ordinarius in Deutschland an.

Als zweites großes Thema wandte sich Kessler in Frankfurt gegen den Rat von Quinkert, aber beflügelt von dem früh verstorbenen Höchstchemiker Rolf Geiger und in den Fußstapfen des vorigen Lehrstuhlinhabers Theodor Wieland, zu dem er ein herzliches Verhältnis pflegte, den zyklischen Peptiden zu. Aber Interessen verschieben sich nicht von heute auf morgen, sondern der erste Kontakt entstand über die strukturelle Dynamik, die Kessler ja in Tübingen für seine Habilitation untersucht hatte, am Beispiel von Peptiden, die im Kristall eine geringere Zahl von Konformationen annehmen als in Lösung. Durch ein einfaches Experiment, bei dem erst die Spektren im Kristall und dann in Lösung aufgenommen wurden, konnte dies gezeigt werden. Noch wichtiger sind natürlich die Konformationen von Wirkstoffen am Target (Rezeptor), wo man bei konformationell heterogenen Molekülen nicht drum herumkommt, diese experimentell zu bestimmen. Dann führt Horst Kessler mit einem Sinn für das große Ganze, aber doch mit Liebe zum Detail die Bedeutung und Konzepte der Konformationsanalyse zyklischer Tripeptide und Pentapeptide an, wobei er auf die Verbindung zur Konformationsanalyse carbocyclischer Ringe verweist. Die Regeln für die eingenommenen Konformationen sind so stark vom Rückgrat und der Konfiguration der Aminosäuren am α -Kohlenstoff bestimmt, dass man die Seitenketten beliebig ändern kann und so das von Kessler erfundene räumliche Screening möglich ist. Dieses hat ihm das Design von klinisch verwendeten Molekülen ermöglicht (siehe unten).

Um bei der Herstellung von zyklischen Peptiden und deren Konformationsanalysen mittels NMR und Strukturrechnungen mittels Molekulardynamik (MD) international kompetitiv zu werden, ging Horst Kessler nicht zu drei Sabbaticals, sondern entsendete Mitarbeiter, die er für befähigt hielt, in Gruppen, die auf dem jeweiligen Gebiet führend waren. Einmal war das sehr attraktiv für die entsendeten Mitarbeiter, aber auch die externen Gruppen profitierten, da sie ja für erhebliche Zeit Mitarbeiter bekamen. Nach der Rückkehr war der know-how Transfer in Kesslers Gruppe viel umfänglicher und schneller als wenn Kessler nach einem der drei Sabbaticals

seine Leute hätte ausbilden müssen. Als Gastgeber griff er dabei immer zu den Superstars, bei NMR waren dies Richard Ernst und Ray Freeman, bei MD der spätere ETH Professor Wilfred van Gunsteren. Viele der entsendeten machten eine akademische Karriere. Nach den Modellpeptiden ging Kessler mehr und mehr zu biologisch aktiven Peptiden über nach dem Motto, „warum uninteressante Moleküle untersuchen, wenn es auch interessante gibt“. Diese Arbeiten kulminierten in Cyclosporin, einem teilweise N-methylierten Undecapeptid, das von Sandoz (heute Novartis) als Immunsuppressivum eingesetzt wird. Hier beschreibt Kessler die Konformationsbestimmung in Chloroform/Benzolmischungen über NOEs. Er lag damit praktisch zeitgleich mit Kurt Wüthrichs Proteinstrukturbestimmung von BUSI IIa. Mit den Chloroform/Benzoldaten konnte Kessler gut verstehen, wie Cyclosporin Membranen passieren kann, die Konformation im Cyclophilin gebundenen Zustand war allerdings deutlich verschieden von der im organischen Lösungsmittel bestimmten.

Kessler beschreibt aber nicht nur seine wissenschaftlichen Durchbrüche, sondern wie selbstverständlich ergibt sich daraus auch sein Engagement in Wissenschaftsorganisationen, wie der Fachgruppe Magnetische Resonanz in der GDCh, deren Gründung erst im zweiten Anlauf gelang und deren Ehrenmitglied und Otto-Stern-Preisträger Kessler dann später wurde. In dem Zusammenhang erfährt der Leser wie Kessler über Gremienarbeit denkt: Man dient einmal in einem Amt, aber bewirbt sich nicht nochmal, um das Gremium nicht zu dominieren. Das Ende des zweiten Kapitels beschreibt die Beweggründe an die TU München umzuziehen, die wie alle solche Entscheidungen Kompromisse darstellen, insbesondere da mittlerweile in Frankfurt eine Vielzahl von NMR Spektrometern standen, die man nicht so einfach umzieht.

Die Münchner Zeit im dritten Kapitel mit verbesserter Ausstattung beginnt mit einer rührenden Schilderung Kesslers Verbundenheit zu Richard Ernst, dem er den zweiten Ehrendoktor verschaffte und mit dem er am Vorabend der Verkündung des Nobelpreises an Richard Ernst in Moskau in der Oper durch die wackelnden Köpfe der vor ihnen Sitzenden am Blick auf die Bühne gehindert wird. Allein diese Schilderung sollte sich der Leser der Rezension im Buch im Detail anschauen. Kurz nach dem Umzug fiel auch die innerdeutsche Mauer, ein Ereignis, das Kessler anders als den Mauerbau wie wohl die überwie-

gende Mehrheit niemals erwartet hätte. Aber die TU München brachte auch neue Anforderungen an die Lehre und Praktikumsgestaltung mit sich. Außerdem erweiterte Kessler seine Forschungsanstrengungen nun in Richtung Peptidomimetika, in denen auch Hybride aus Aminosäuren und Zuckern synthetisiert wurden. Parallel erfolgte der Ausbau der apparativen NMR Infrastruktur erst mit dem 750 MHz Gerät 1994 und dann 1999 mit dem 900 MHz Gerät aufgrund von entsprechenden DFG Ausschreibungen, in denen sich Horst immer kompetitiv durchsetzte. Mit den hohen Feldern rückten dann auch Proteine in den Fokus und Kessler beschreibt einen einleuchtenden Mechanismus, wie das Protein, das dann die Spinnenseide wird, in der Drüse weitgehend ungeordnet aber dichtgepackt vorliegt und dann durch pH Änderung und Scherkräfte zu einem Material mit deutlich besserer Reißfestigkeit als Stahl bei gleichem Durchschnitt wird.

Im vierten Kapitel geht es um das Design zyklischer Peptide mit dem Ziel ihre biologische Aktivität so zu optimieren, dass sie als Wirkstoffe am Menschen eingesetzt werden können wie das Pentixafor, zu dem gerade 22 klinische Studien laufen. Kesslers Herzblut ist aber in die Integrine gegangen, die einem Hinweis von Rolf Geiger noch aus der Frankfurter Zeit entsprangen. Die Tripeptidsequenz RGD bindet hervorragend an Integrine, die dann nicht mehr ihre Zielproteine aus der extrazellulären Matrix binden können. Integrine sind für die Zell-Zellkommunikation entscheidend und haben daher Anwendungen bei Krebs, aber auch Wundheilung z.B. von Knochen, die sich mit einem Implantat schneller verbinden, wenn es mit den entsprechenden Integrin-Bindern dekoriert ist. Die Anwendung des räumlichen Screenings verknüpft mit chemischer Intuition und Serendipity (Begegnungen unter anderem auf dem Toronto Tower mit Vertretern der Firma Merck in Gegenwart des Rezensenten) ebnete den Weg zu Industriekooperationen und damit wieder zur Anwendung am Menschen eines spezifischen RGD Zyklopeptids, des berühmten Cilengitids, das zwar als Therapeutikum nicht reüssierte, aber für die Diagnostik von soliden Tumoren von Bedeutung ist. Die Beschreibung dieser Entwicklungen ist äußerst spannend zu lesen und gibt einen Einblick in die Welt der Pharmawirtschaft, die letztlich das Leben verbessern und verlängern.

Kapitel 5 widmet sich der Zeit nach der Emeritierung, in der Horst Kessler mehr als vorher von Drittmitteln abhing, die ihm vorher immer

zuflossen, aber in der Emeritusphase, wo sie besonders nötig waren, nicht gleich kamen. Kessler beschreibt dennoch eine beeindruckende Zahl von Kooperationen und Erfolge in dem Projekt, die orale Bioverfügbarkeit von zyklischen Peptiden durch Methylierung von Amidgruppen zu steigern. Dies gelang ihm weitgehend wieder durch den schon etablierten Ansatz des räumlichen Screenings nun erweitert durch N-Methylierungen. Kapitel 6 schließlich fasst die Erinnerungen der Reisen zusammen, die Horst Kessler im Lauf seines wissenschaftlichen Lebens unternahm. Auch wenn der schönste Ort der Welt sicher subjektiv ist, so erfährt man bei der Lektüre Kesslers Buches, wo der sich befindet.

Horst Kessler versteht es, in diesem höchst lesenswerten Lebenswerk nicht nur einen Abriss einer höchst erfolgreichen wissenschaftlichen Laufbahn zu geben, sondern auch einen Kompass für jeden Interessierten in und um die Wissenschaft zu formulieren. Für ihn war dieser Kompass die NMR Spektroskopie, die von äußerst freundlichen, an wissenschaftlicher Innovation interessierter Menschen dominiert wurde. Als sich Horst Kessler biologischer und medizinischer orientierte, waren nicht überall alle Türen so offen wie in der NMR Spektroskopie und nicht alle Menschen waren so wohlwollend. Aber Horst Kesslers unstillbare Neugier gepaart mit Gewissenhaftigkeit, Ehrlichkeit und Fleiß wirken auf den Leser ansteckend, auch wenn er als Wissenschaftler hohe Frustrationstoleranz haben und die eine oder andere menschliche Enttäuschung verkraften musste und muss.

*Christian Griesinger
(Göttingen)*

■ **NMR – Mein Kompass in der Organischen und Medizinischen Chemie (Lebenswerke in der Chemie)**

H. Kessler

GNT-Verlag GmbH; Erstauflage, im
Schuber (16. Dezember 2023)

ISBN-13: 978-3862251322

301 Seiten, 39,80 Euro



Nachgefragt

Zum 75. Geburtstag von Albrecht Khuen



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Nach einem Jahr Postdoc in Durham/England und einem Jahr am Textilfaserinstitut in Stuttgart-Wangen ergab eröffnete sich 1981 eine Stelle

am Institut für physikalische und theoretische Chemie der TU-Berlin. Dort beschäftigte man sich mit der technischen Seite der NMR-Spektroskopie.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Nun, wir haben ein cw-Spektrometer in ein Pulsspektrometer umgebaut. Als Rechner wurde eine PDP-II eingesetzt. Dann wurde mit stochastischer Anregung experimentiert und das Spektrum mittels Kreuzkorrelation gewonnen. Der jetzige Prof. B. Blümich (emeritiert, RWTH Aachen) war daran maßgeblich beteiligt.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Damals kam die 2D-NMR auf. Dafür beschafften wir uns einen programmierbaren Pulsgenerator. Das wurde mit Elan ausprobiert und weiterentwickelt.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Das Institut hat eng mit der Firma Bruker zusammengearbeitet.

Was macht für Sie einen typischen NMR-Spektroskopiker aus?

Er sollte die Vorteile und Grenzen des Verfahrens kennen und entsprechend seine Kunden beraten können. Allerdings habe ich mit dem Routinebetrieb wenig zu tun gehabt.

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?

Es geht um das Grundsätzliche, ein Bild dafür ist das rotierende Koordinatensystem mit der Magnetisierung in z-Richtung, die durch einen Puls in die x-y Ebene gebracht wird. Dort rotiert die Magnetisierung, durch die T_1 - und T_2 -Zeiten immer mehr an Kohärenz verlierend und so kleiner werdend. Habe ich einmal als Apple II-Grafik programmiert.

Was ist in ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten 10 Jahren?

Da sind einmal die bildgebenden Verfahren, wie sie in der medizinischen Diagnostik angewandt werden, zu nennen und zum anderen die Konstruktion immer stärkerer Magneten im Kampf gegen die relative Unempfindlichkeit der Methode im Vergleich zu anderen spektroskopischen Verfahren (UV, IR, Raman).

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

An der TU-Braunschweig habe ich Chemie studiert und mit einer Untersuchung von Flüssigkeiten mit der Ramanspektroskopie promoviert. Nach Postdoc in England und einem Zwischenspiel in Stuttgart bin ich an der TU Berlin im Arbeitskreis Prof. Dr. D. Ziessow gelandet. Anschließend habe ich in der chemischen Industrie daran mitgearbeitet, den Rechner für viele Aufgaben nutzbar zu machen („Digitalisierung“).

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns.



Albrecht Khuen (Frankfurt am Main) wurde am 12. April 2024 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

Nachgefragt

Zum 75. Geburtstag von Gerd-Joachim Wolff



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

In Tübingen während meines Chemiestudiums, bei Prof. Breitmaier.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Die ersten 2Ds in der Applikation bei Bruker in Karlsruhe, beginnend mit SECSY und COSY, was intensive Arbeiten zur Verbesserung der Spektrometerstabilität, Magnetfeldhomogenität und Probenkopfperformance zur Folge hatte.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

NOESY.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Das war ein AM250, an dem damals in Rheinstetten die Vollautomation mit Probenwechsler entwickelt wurde.

Was macht für Sie einen typischen NMR-Spektroskopiker aus?

Die Freude an der Lösung von Problemen – bei Strukturfragen, dynamischen Prozessen, bei der Analyse komplexer Gemische.

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?

Den Bereich der biochemisch-/medizinischen Anwendungen finde ich persönlich besonders interessant und wichtig.

Was ist in ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten 10 Jahren?

Im Bereich der Hardware die weitere kontinuierliche Steigerung der Messempfindlichkeit bei kleinen Mengen.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Chemiestudium in Tübingen mit Diplom in organischer Chemie, gefolgt von der Promotion in Bonn. 1979 NMR-Applikationschemiker bei Bruker in Karlsruhe, ab 1982 NMR-Produktmanager in den USA und in der Folge Leitung der US-Niederlassung in Boston; ab 1988 Marketing- und Vertriebsmanagement in Karlsruhe bis 2014.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns.

Es ist nur eine einfache exponentiell abfallende Kurve.

Gerd-Joachim Wolff (Marxzell) wurde am 4. Dezember 2023 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!



Nachgefragt

Zum 85. Geburtstag von Heinrich Marsmann



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Zur NMR kam ich bei meiner Diplomarbeit 1963 in Göttingen am Anorganischen Institut bei Prof. O. Glemser. Ich sollte Verteilungsungleichgewichte von Phosphorsäureestern messen.

Da sich die Ankunft des Zusatzteils (Hochauflösung) verzögerte, habe ich bei meinem Betreuer (damals) Dr. E. Schwarzmann hospitiert, der ¹H-wide-line-NMR-Spektroskopie betrieb. Damit konnte man in Festkörpern den Abstand und die Art von OH-Gruppen bestimmen. Da Dr. Schwarzmann sehr mit der Planung des neuen Instituts ausgelastet war, habe ich ihm bald die Messungen abgenommen.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Neue Kerne zu erschließen.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Die Pulsfolge INEPT, womit man bei der ²⁹Si-NMR, die ich hauptsächlich – neben dem Service für die Chemie – für meine eigenen Arbeiten betrieb, auch kleinste Fernkopplungen erfassen konnte.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Klar, meine erste Liebe, das Varian A 60 A. Heute kaum vorstellbar, nix Puls, mittelalterliche cw-Technik mit Elektromagnet. Man sollte die Erinnerungen nicht verklären, aber für mich als Wald- und Wiesen-Organiker war es ein toller Triumph, dass ich die Kiste reparieren konnte. Das war allerdings (manchmal) auch nicht kompliziert, da das Spektrometer noch Röhren hatte und man mit einem Drehschalter die Anodenstromstärken von ca. 10 Röhren messen konn-

te. Dann brauchte man nur die durchgebrannte Röhre auszutauschen. Das war aber auch das Einzige, was ich später vermisst habe. Ansonsten bin ich mit dem Varian XL-100 und später Bruker WH270 groß geworden.

Was macht für Sie einen typischen NMR-Spektroskopiker aus?

Die Neugier auf das, was die Moleküle so hergeben.

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?

In der Ausbildung möglichst viel aufsaugen, was Theorie und Physik liefern. Man kann nicht einfach nicht voraussagen, wohin die Wissenschaft treibt.

Was ist in ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der NMR in den letzten 10 Jahren?

Die enormen Fortschritte in der Signalgewinnung, wie z. B. die Supercyclen, die in einem Scan mehrere Pulssequenzen direkt hintereinander ermöglichen. Zum anderen die riesigen Fortschritte in der Datenverarbeitung, die die Beschränkung der Länge des FID's aufhoben oder der enorme Zeitgewinn durch die Verwendung von sparsamen Matrizen. Ich trage immer noch zu der ²⁹Si-Datenbank bei, die von Prof. Dr. Frank Uhlig von der TU Graz betrieben wird. Ich sehe dann, daß die meistens Ergebnisse das Resultat von schon fast antiken Pulssequenzen stammen.

Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen.

1938 in Rostock geboren, Studien an der TU Berlin und der Georg-August-Universität in Göttingen. Post-doc in St. Louis und in Nashville, Habilitation an der RUB Bochum. Seit 1974 in Paderborn.

Aus der Fachgruppe

Treffen von Berliner & Potsdamer NMR Laborleiter*innen

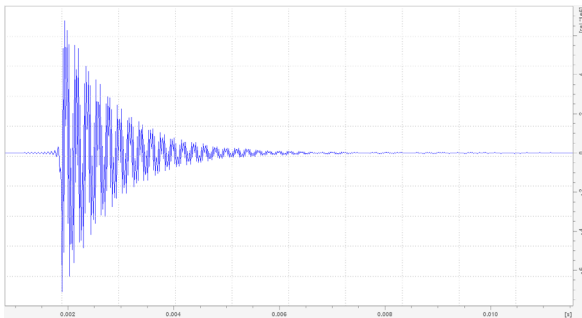
Angeregt durch die Konferenz „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“ haben sich am 4. Juli 2024 die Berliner und Potsdamer NMR-Laborleiter*innen zu einem Treffen in einer Berliner Gastwirtschaft getroffen. Die Resonanz war groß, 11 Kolleg*innen aus 7 Institutionen kamen bei dem Treffen zusammen und haben ihre Erfahrungen rund um den Alltag in den NMR-Abteilungen untereinander ausgetauscht. Beabsichtigt ist die Schaffung eines halbjährig zusammenkommenden „Stammtisches“ für Berliner und Potsdamer Kolleg*innen. Falls Interesse besteht den Berliner/Potsdamer Stammtisch beizutreten, wir freuen uns.



Sebastian Kemper
(Berlin)

sebastian.kemper@tu-berlin.de

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns.



Ein modernes ^{11}B -Spektrum, welches mich daran erinnerte, wie ich vor ganz vielen Jahren 2D-Spektren von Oligoboranaten gewinnen konnte. Aber zu der Zeit gab es keine Monitore an den Geräten sondern nur Oszillographen und die üblichen Plotter konnten nur linear aufzeichnen. Man konnte allerdings richtige 2D-Plotter anschließen, mit denen man die Spektren aufzeichnen konnte. Man arbeitete sozusagen blind und hoffte auf gute Ergebnisse. Die oktaedrischen Boranate waren allerdings sehr nett zu einem.

Heinrich Marsmann (Paderborn) wurde am 22. September 2023 85 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

