



GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

02/2016 • 55. Ausgabe

# MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie  
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

## Liebe Kolleginnen und Kollegen,

auch in diesem Jahr werden wieder tausende von chemischen Publikationen veröffentlicht werden, in denen NMR-spektroskopisch gewonnene Daten einen wichtigen Beitrag liefern. Leider werden diese Daten in vielen Fällen in einer Form publiziert, dass sie wissenschaftlich praktisch wertlos sind. Mit diesem Problem wird sich die IDNMR-Initiative befassen, über die Sie auf S. 2 mehr erfahren.

Eine weitere neue Initiative stellen wir auf S. 4 vor, die sich der Herausforderung stellen möchte, der qNMR als valide Alternative zu den etablierten analytischen Methoden Anerkennung zu verschaffen.

Wie vielseitig NMR ist und dass man FIDs auch auf ganz andere Weise „prozessieren“ kann, hat Waldi Bauer als Vollblutmusiker bereits in der Vergangenheit mehrfach unter Beweis gestellt. Wir haben ihn eingeladen, seine Werke und seinen YouTube-Kanal auf S. 3 vorzustellen.

Wir freuen uns außerdem, Ihnen in dieser Ausgabe ein neues Format für die Würdigung runder Geburtstage vorstellen zu können, bei dem wir die Jubilare einfach selber zu Wort kommen lassen. Wenn Sie Vorschläge haben, wer diesen Fragebogen auch unbedingt ausfüllen sollte, wenden Sie sich einfach direkt an uns.

Viel Vergnügen und auf ein baldiges Wiedersehen auf der Fachgruppentagung in Düsseldorf,

*Nils Schlörer und Johannes Liermann*

## Inhalt

Das IDNMR-Projekt .....	2
Neue NMR-Musik .....	3
qNMR-Meeting in Köln .....	4
Zum 85. Geburtstag von Gisbert Großmann	5
Zum 70. Geburtstag von Klaus Albert. ....	7
Zum 70. Geburtstag von Ludger Ernst. ....	8
Zum 75. Geburtstag von Frank H. Köhler ...	9

## 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](http://www.gdch.de/nmr).

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

Die nächste Ausgabe 03/2016 erscheint am 31. Oktober 2016 (Redaktionsschluss 14. Oktober 2016).

Datenqualität

## Das IDNMR-Projekt Konzepte zur Verbesserung der Qualität publizierter NMR-Daten

Die meisten NMR-Spektroskopiker sind mit dem Problem bestens vertraut: Während die „Kundschaft“ eine immer raschere Bearbeitung von immer mehr Proben erwartet, kommt nicht nur die Analyse und Aufbereitung der Daten für Publikationen zu kurz – von einer individuellen Kontrolle durch Experten gar nicht zu reden – sondern auch die Ausbildung der Studierenden, die schließlich die Experimente analysieren sollen.

### Das Problem: Peaklisten statt Zuordnungen

Die Ursachen hierfür liegen zum Teil in der weitreichenden Automatisierung des NMR-Messbetriebs, die eine umfassende Analyse auch von vielen Proben schneller und einfacher denn je ermöglicht – und zumindest in der Organischen Chemie den Eindruck erweckt hat, Spektrenaufnahme und -auswertung seien gleichermaßen quasi automatisiert und ohne wissenschaftliches Zutun im Handumdrehen erledigt.

Es sollte aber auch nicht darüber hinweggesehen werden, dass sich viele synthetisch arbeitende Kolleginnen und Kollegen, teilweise wohl auch durch unzureichende Kenntnis des heutigen Kanons an Standard-NMR-Experimenten und deren strukturanalytischen Aussagen, in der Regel damit begnügen, NMR-Spektren als reine „Peaklisten“ zu betrachten, die zu weiten Teilen nicht ausreichend analysiert werden. Zweidimensionale Experimente, die ab einer bestimmten strukturellen Komplexität unverzichtbar sind und wenigstens seit Beginn des Jahrtausends zum Standardrepertoire für die Charakterisierung neuer Moleküle gehören, werden dabei schlichtweg ignoriert.

Hinzu kommt, dass die heute übliche Form der Publikation von NMR-Daten als Zahlenkolonne im Manuskript oder Supplement im Wesentlichen auf einer IUPAC-Empfehlung von 1972 basiert, während die zugeordneten NMR-Daten in elektronischer Form, beispielsweise in Datenbanken,



wesentlich leichter auffindbar und visualisierbar wären. Hierfür gibt es aber bislang keinen etablierten Standard.

In der Summe haben diese Versäumnisse dazu geführt, dass heute mit Hilfe der NMR-Spektroskopie, obwohl sie unbestritten die leistungsfähigste Methode für die Charakterisierung kleiner Moleküle und ihrer Reaktionsmechanismen ist, häufig unvollständige oder fehlerhafte Ergebnisse publiziert werden, so auch nicht selten Strukturen, die nicht zu den NMR-Daten passen. Es bedarf nicht viel Phantasie sich vorzustellen, dass eine weitere Entwicklung in dieser Richtung die NMR-Spektroskopie von einer wissenschaftlichen Disziplin zu einer reinen Anwendermethode deklassieren dürfte.

### Erste Schritte: Eine DFG-geförderte Initiative

Wie könnte ein Ausweg aus dieser Situation aussehen? Im Juli dieses Jahres nimmt die von Seiten der Fachgruppe/GDCh (auch finanziell mit einer Förderung aus dem Sonderfonds für außergewöhnliche Fachgruppenaktivitäten) unterstützte und durch ein DFG-Projekt geförderte Initiative zur Verbesserung der Datenqualität in der NMR, kurz „IDNMR“, ihre Arbeit auf. Eine Gruppe von NMR-Spektroskopikern wird hierbei versuchen, an ausgewählten deutschen chemischen Fachbereichen und Instituten, exemplarisch die dort arbeitenden „Synthetiker“ für die derzeitigen Missstände bei der Zuordnung und Veröffentlichung von NMR-Daten zu sensibilisieren und um Unterstützung für eine Reform des heute üblichen Umgangs mit NMR-Spektren zu werben.

Als erster Ansatz, um eine Auseinandersetzung mit der Zuordnung von NMR-Daten und damit eine wissenschaftlichere Herangehensweise an

den Umgang mit NMR-Spektren zu fördern, wird ein Web-basiertes QuickCheck-Tool präsentiert, das eine rasche Überprüfung von  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -Zuordnungen ermöglicht. Die Anwendung basiert auf der Datenbank nmrshiftdb und wird von CSEARCH (CSEARCH Robot Referee) unterstützt. Die Betreiber der Datenbanken, Stefan Kuhn, Nils Schlörer (nmrshiftdb) und Wolfgang Robien (CSEARCH) haben zusammen mit Johannes Liermann das Projekt organisiert und ins Leben gerufen.

Das Projekt IDNMR wird nach einer lokalen Informationsveranstaltung am Department für Chemie in Köln (13. Juni) mit einem Workshop am 28. und 29. September in Köln beginnen, zu dem interessierte Kolleginnen und Kollegen herzlich eingeladen sind. Im kommenden Wintersemester werden dann an den Universitäten Bochum, Darmstadt, Göttingen, Heidelberg und Mainz sowie dem Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim vor Ort Vorträge und Workshops zum Thema Datenqualität und Zuordnung in der NMR stattfinden; im Anschluss daran sollen dort die Nutzer der NMR-Abteilungen Erfahrungen mit der Überprüfung von Zuordnungen durch das QuickCheck-Tool und dem Aufbau einer lokalen Datenbank sammeln und Anregungen zur Weiterentwicklung geben.

## Ausblick

Die im Verlauf der auf ein Jahr angelegten Initiative gesammelten Erfahrungen sollen schließlich in die im Anschluss geplante Weiterentwicklung dieses Werkzeugs für die Qualitätskontrolle von NMR-Daten einfließen, bei der auch weitere Verbesserungen an der freien Datenbank nmrshiftdb wie die Integration zusätzlicher NMR-Parameter ( $J$ , NOE, RDC) und -Experimente (2D) in Angriff genommen werden sollen. Alle diese Maßnahmen sollen den Weg bereiten, um als längerfristiges Ziel ein benutzerfreundliches Evaluierungsprotokoll für den Publikationsprozess von NMR-Daten zu entwickeln, mit dem Zuordnungen – wie z.B. in der BioNMR-Datenbank BMRB bereits etabliert – vor der Veröffentlichung überprüft und anschließend in einer freien Datenbank hinterlegt werden können.

Weitere Informationen, die im Lauf des Projekts aktualisiert werden, finden Sie auf der Projekt-Homepage unter [www.nmr.chemie.uni-koeln.de/idnrm.html](http://www.nmr.chemie.uni-koeln.de/idnrm.html).

nes

Kurioses

## Neue NMR-Musik – mit Drums und Opernsängerin

NMR ist als Analytikanwendung zweifellos eine ernste Sache. Daß es aber nicht immer so bieder zugehen muß, wurde, quasi augenzwinkernd, bereits vor 20 Jahren gezeigt: es gibt einen Web-Artikel über NMR-Musik, also die „mißbräuchliche“ Verwendung eines 500 MHz-JEOL-Spektrometers zur Generierung von Tönen ([www.chemie.uni-erlangen.de/bauer/music.html](http://www.chemie.uni-erlangen.de/bauer/music.html)). Darin wird erläutert und hörbar gemacht, wie FIDs klingen und wie man einfache Songs ertönen lassen kann, zusammen mit Erklärungen der „Basics“. Vor zwei Jahren wurde nachgelegt und ein Video gedreht („NMR meets MUSICIANS“), dessen 10-Minuten-Trailer auf der Homepage des Autors ([www.chemie.uni-erlangen.de/bauer/Bauer.html](http://www.chemie.uni-erlangen.de/bauer/Bauer.html)) und auf YouTube abrufbar ist (Keywords „Waldi Bauer“). In diesem Video werden neue, mit dem  $^1\text{H}$ -NMR-Signal von Aceton kreierte Songs präsentiert. Diese sind nun auch, neben komplexen Akkorden, mit Baß und Schlagzeug „angereichert“. Nachdem der Autor selbst Drummer ist, darf natürlich auch ein „Schlagzeugsolo“ nicht fehlen.



Die neueste „Schöpfung“ ist die Kombination der NMR-Musik mit einer klassischen Opernsängerin. Im Rahmen eines Festsymposiums zu Ehren des 2014 verstorbenen Prof. Paul von Ragué Schleyer, das kürzlich in Erlangen stattfand, präsentiert Sopranistin Regina Klepper in einer Welturaufführung mit Hilfe der „ $^1\text{H}$ -NMR-Aceton-Töne“ die Songs „Ave Maria“ (J. S. Bach) und „Hallelujah“ (L. Cohen). Auch diese Video-Clips gibt es auf YouTube („Waldi Bauer“). Die DVDs der Vorträge über NMR-Musik (2014 und 2016) können auf Anfrage beim Autor bestellt werden, in HD-Qualität und zum Selbstkostenpreis. Neue akustische „NMR-Kuriosa“ sind in Arbeit...

Walter Bauer (Erlangen)  
[walter.bauer@fau.de](mailto:walter.bauer@fau.de)



## Tagungen

# qNMR-Meeting in Köln

In den letzten Jahren hat sich die quantitative NMR-Spektroskopie quasi zu einer eigenständigen Disziplin entwickelt. Die Methodik selbst hat Einzug in das Europäische Arzneibuch (Pharmacopoea Europaea, Ph. Eur.) und das Amerikanische Arzneibuch (U.S. Pharmacopeia, USP) gehalten. Besonders im Bereich der pharmazeutischen Analytik sind besondere Anforderungen nach Richtlinien für „gute Arbeitspraxis“ (GxP) Compliance einzuhalten. Neben System Suitability Tests, Gerätequalifizierungen wie Design Qualification (DQ), Installation Qualification (IQ), Operation Qualification (OQ) und Performance Qualification (PQ) sowie Ringversuchen stehen besonders die Fragen nach einer adäquaten Methodvalidierung im Raum. Im letzteren Falle gehen die Meinungen stark auseinander, im optimalen Falle ist die qNMR als Primärmethode als valide anzusehen (ähnlich einer Waage), andere Bestrebungen gehen dahin, qNMR Validierungen an die bestehenden sehr umfangreichen chromatographischen Vorgaben, z. B. nach International Conference on Harmonisation (ICH) anzulehnen. Auch das Thema Datensicherheit und Rohdatenablage spielen eine besondere Rolle. Zurzeit gibt es vereinzelt Diskussionsgruppen u.a. auf europäischer Ebene oder in den USA als Teil des PANIC Meetings, eine konzertierte Handlung ist aber nicht in Sicht. Die Konzentrierung aller qNMR-Gruppen ist das Zukunftsziel.

Um dieser Tendenz Rechnung zu tragen, wurde am 10. Juni 2016 ein eintägiges qNMR Meeting in Köln einberufen. Mit 37 nationalen und internationalen Teilnehmern von Behörden, aus Industrie und Universitäten kann die Tagung als voller Erfolg gesehen werden. Das breit aufgestellte Programm (Link am Ende des Artikels) umfasste neben der Präsentation des aktuellen Standes der qNMR, auch den wissenschaftlichen Austausch über ISO17025, Validierung, Ringtest, Quantifizierungsmöglichkeiten und statistische Methoden. Hierbei wurde entschieden, dass nicht die Gründung einer neuen qNMR Gruppe, son-



Die Teilnehmer des ersten qNMR Meetings in Köln

dern die verstärkte Zusammenarbeit aller qNMR Gruppen auf internationaler Ebene erfolgen soll. Im Rahmen dessen soll eine öffentliche Diskussionsplattform erschaffen werden, um den Know-how-Transfer zu unterstützen und die Kooperation zur Harmonisierung zu verbessern.

Der erste Schritt ist hierbei die Erstellung eines qNMR-Handbuchs, um spezifische Begriffe zu definieren, das Verständnis der qNMR in der Industrie und bei Behörden zu vertiefen und das Vertrauen in diese Technik zu steigern. Zur Erstellung des Handbuchs sind alle NMR-Experten herzlichst eingeladen, ihr Expertengebiet in Form eines Kapitels darzustellen. Bei Interesse melden Sie sich bitte bei [info@spectralservice.de](mailto:info@spectralservice.de) mit dem Betreff „qNMR Handbuch“.

Dass das Thema „qNMR“ eine große Bedeutung in der Analytik darstellt, beweisen die zahlreichen Meetings und Konferenzen. Die nächsten qNMR Meetings werden im Oktober 2016 in Washington unter der Leitung der U.S. Pharmacopeia, im Februar 2017 als PANIC Meeting in South Carolina und im Frühjahr 2017 als Fortsetzung des qNMR Meetings bei der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin stattfinden.

Weitere Informationen sowie die Präsentationen können unter [www.spectralservice.de/index.php/qnmrmeeting.html](http://www.spectralservice.de/index.php/qnmrmeeting.html) eingesehen werden.

Elina Zailer (Spectral Services, Köln)

Nachgefragt

## Zum 85. Geburtstag von Gisbert Großmann



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Über Umwege. Nach Diplom und Promotion an der Leningrader Universität bin ich mehrere Jahre an der TU Dresden Assistent auf dem Gebiet der Radiochemie gewesen.

Nach Auflösung der Fakultät Kerntechnik, wurde ich Oberassistent in der Anorganischen Chemie. In der zweiten Hälfte der 60iger Jahre nahm ich an mehreren Weiterbildungsveranstaltungen teil, die vom Arbeitskreis „Hochfrequenzspektroskopie“ der Physikalischen Gesellschaft der DDR angeboten und von Physikern der Universitäten Leipzig und Jena durchgeführt wurden. Entsprechend meiner anorganischen Spezialisierung in Leningrad auf dem Gebiet der Magnetochemie an Oxiden einiger Übergangsmetalle, interessierte mich zunächst die EPR mehr als die NMR. Als dem Leiter der Anorganischen Chemie in Dresden, Prof. Hans-Albert Lehmann, 1970 ein Festkörper-Breitlinien-Kernresonanzspektrometer aus den Werkstätten der Akademie der Wissenschaften angeboten wurde und er mir vorschlug, dieses mit einer kleinen Arbeitsgruppe „Magnetische Kernresonanz“ im Forschungskollektiv „Phosphorchemie“ zu übernehmen, war die weitere Entwicklung vorgegeben.

Breitlinienuntersuchungen wurden an anorganischen Phosphoramiden begonnen, jedoch nach zwei Jahren abgebrochen, weil sich dipolare Nah- und Fernwechselwirkungen so stark überlappen, dass eine Trennung der Effekte nicht gelang. Da zu dieser Zeit kein hochauflösendes Multikern-NMR-Spektrometer zur Verfügung stand, wurde das Breitlinienspektrometer zum Studium solcher Effekte in Flüssigkeiten und Lösungen benutzt, die mit großen Änderungen der chemischen

Verschiebung einhergehen. Einen Tag im Monat konnte mein Mitarbeiter Dr. Berthold Thomas im NMR-Labor von Dr. Zschunke in Halle am 60 MHz-Spektrometer von Varian messen.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Das Lieblingsspektrometer war bis zur Wende immer das mühsam erkämpfte Gerät. Das Breitlinienspektrometer zu lieben war nicht einfach, musste man doch jeden Morgen das NMR-Signal aufs Neue suchen. Außerdem wusste man, dass es für unsere Zwecke in der Welt weitaus geeignetere Geräte gab. Gemeinsam mit Dr. Dieter Scheller, der im Institut für Physikalische Chemie in Dresden am Eigenbau eines NMR-Spektrometers mitgewirkt hatte, ist es schließlich 1976 gelungen, ein Bruker-Spektrometer WH 90/DS zu erhalten, das vorwiegend für  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$  und  $^{31}\text{P}$  genutzt wurde, aber gelegentlich auch für weitere Kerne. So hat z. B. Dr. Berthold Thomas mit  $^{15}\text{N}$ - und  $^{31}\text{P}$ -Messungen an Cyclophosphazenen die Grundlage für seine Habilarbeit gelegt.

Dieses Spektrometer stand meiner erweiterten Arbeitsgruppe „NMR-Spektroskopie“ für die Aufnahme von Spektren für alle Arbeitsgruppen der Chemie und anderer Fakultäten der TU sowie anderer Dresdner wissenschaftlicher Institute und einiger Betriebe der chemischen und pharmazeutischen Industrie in der Umgebung und natürlich für unsere eigenen Untersuchungen zur Verfügung. Dank der Akkumulationstechnik wurde es rund um die Uhr und über die Wochenenden betrieben.

Das WH 90 war mein Lieblingsspektrometer bis wir schließlich Anfang 1988 ein Bruker-Gerät MSL 300 für Flüssigkeiten und Festkörper in Betrieb nehmen konnten. Damit konnten viele weitere Möglichkeiten der NMR genutzt werden, viele neue Pulsprogramme, die Aufnahme von 2D-Spektren und die schnelle Probenrotation für die Aufnahme von hochaufgelösten Festkörperspektren waren möglich geworden. Natürlich gab es auch damals wie bei allen komplizierten Geräten Ausfälle und notwendige Reparaturen. In den meisten Fällen konnte Dr. Scheller die Ursache finden und die Fehler beseitigen. In besonderen Fällen hat uns Bruker durch kostenlose Lieferung von Ersatzteilen unterstützt.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Am WH 90 war das die Suche von  $^{13}\text{C}$ -Satelliten in  $^1\text{H}$ -entkoppelten  $^{31}\text{P}$ -Spektren von symme-



trischen Diphosphonaten, um die P-P-Kopplungskonstanten durch Analyse des AA'-Teils eines AA'-X-Spin-Systems zu erhalten.

Am MSL 300 war das die Aufnahme polykristalliner phosphororganischer Verbindungen mittels  $^{31}\text{P}\{\text{H}\}$  CP-MAS-Technik, um durch Analyse der Seitenbandintensitäten die Hauptachsenwerte des Tensors der chemischen Verschiebung zu erhalten und schließlich durch Umrechnung in absolute Abschirmung die Hauptachsenwerte der  $^{31}\text{P}$ -kernmagnetischen Abschirmung zu ermitteln. Da aber die Lage der Hauptachsen des Tensors im Mokekülkoordinatensystem aus diesen Experimenten nicht ermittelbar ist, habe ich Kontakte zu theoretischen Chemikern gesucht, die Programme zur Berechnung der Abschirmung entwickelt haben. Nach der politischen Wende konnte Dr. Fleischer bei Prof. Kutzelnigg in Bochum erste Berechnungen für uns durchführen, und meine Mitarbeiterin Dr. Kerstin Krüger konnte Erfahrungen mit dem IGLO-Programm sammeln und für unsere Zwecke nutzen.

Nachdem Dr. Radechia in Berlin einen Artikel über die graphische Darstellung des Tensors veröffentlicht hatte, waren solche Darstellungen, von ihm als „Ovaloide“ bezeichnet, zu meinem Hobby geworden.

*Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?*

Aus Mitteln eines DFG-Projektes konnte ich bei Bruker einen speziellen Goniometer-Probenkopf zur Messung von  $^{31}\text{P}\{\text{H}\}$ -Spektren an Einkristallen bauen lassen. Von Prof. Michalski aus Lodz hatte ich einige genügend große Einkristalle einer Phosphorverbindung erhalten. Nun bestand die Möglichkeit, die Lage des  $^{31}\text{P}$ -Tensors dieser Verbindung experimentell zu bestimmen. In Zusammenarbeit mit Dr. Zahn vom Physikalischen Institut der TU Dresden wurde die Kristallstruktur ermittelt und der Kristall im Kristallhalter fixiert. Für Dr. Scheller und mich kam nun der spannendste Moment, ob und wie dieser neue Probenkopf funktioniert. Als nach wenigen Scans ein schöner FID sichtbar wurde, waren wir erleichtert und noch mehr, nachdem die elektromechanisch kontrollierte Drehung des Kristalls senkrecht zur Richtung des Magnetfeldes funktionierte und so schließlich nach summarischer Drehung um  $180^\circ$  die erste Kurve der chemischen Verschiebung um eine der drei Achsen des Kristalls entstanden war!

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

Aus dem Rauschen des Spektrums noch einige richtige Signale zu finden. Aber wichtiger ist vielleicht, die Bereitschaft zur Zusammenarbeit mit klassischen Chemikern zu pflegen.

*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?*

Die zur Strukturaufklärung organischer Verbindungen und biologischer Objekte nötigen 2D- und 3D-Techniken.

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

Die Automatisierung des Shimmens, der Aufnahme, der Spektrenverarbeitung und des Probenwechsels, sowie der Übergang zur elektronischen Digitaltechnik scheinen mir enorm wichtige Errungenschaften zu sein, obwohl das alles schon mehr als zehn Jahre zurück liegt.

*Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!*

Diesen Wunsch kann ich Ihnen ohne technische Hilfsmittel, zur Zeit im Urlaub bei Studienfreunden in St. Petersburg befindlich, nicht erfüllen. Die Feinmotorik der Hände ist nicht mehr wie in jungen Jahren.

*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Diplom 1956 bei Doz. Dr. Arija, Leningrader Universität, Promotion 1959 nach einem Jahr in Dresden ebenfalls in Leningrad, 1956-57 und 1959-62 Assistent an der Fakultät Kerntechnik der TH Dresden, 1962-69 Oberassistent in der Anorganischen Chemie der TU Dresden, 1969 Habilitation an der TU Dresden, 1969-81 Dozent für Allgemeine Chemie TUD, 1981-92 Außerordentlicher Professor im Wissenschaftsbereich Struktur- und Radiochemie, später Institut für Analytische Chemie, nach der Wende hat Prof. Gerhard Hägele aus Düsseldorf Verbindung mit mir aufgenommen und mich aktiv in vielen Fragen unterstützt, er hat mir geholfen, mich unter den neuen Bedingungen zurecht zu finden, durch seine Vermittlung konnte ich an vielen Universitäten und in einigen chemischen Großbetrieben Westdeutschlands Vorträge halten, schließlich haben

## Nachgefragt Zum 70. Geburtstag von Klaus Albert



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Teilnahme an einem Experimental-Kurs zur Bedienung des NMR-Gerätes Varian A 60 unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Harald Suhr im Jahre 1971.

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Durchführung von CIDNP-Messungen.

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Durchführung von Durchfluss-NMR-Messungen.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Nein. Für Hochauflösungs-, Bildgebungs-, Festkörper- und Suspensions-NMR-Untersuchungen habe ich verschiedene Hochauflösungs- und Festkörper-NMR-Spektrometer der Firma Bruker benutzt.

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

Die Liebe zur Interpretation komplexer Spektren.

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?

Die Interpretation von hochauflösenden NMR-Spektren mit Hilfe der  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie.

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

Die Entwicklung von Probenköpfen (z. B. von Solenoid-Messköpfen) zur Detektion kleinster Substanzmengen.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Chemiestudium an der Universität Stuttgart und der Eberhard-Karls-Universität Tübingen. Von 1996 bis 2011 Leitung der NMR- und ESR-Abteilung des Institutes für Organische Chemie der Eberhard-Karls-Universität Tübingen.

Klaus Albert (Tübingen) wurde am 27. März dieses Jahres 70 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

Fortsetzung von S. 6

wir gemeinsam im April 1991 einen Workshop „NMR-Spektroskopie an Phosphorverbindungen“ mit Teilnehmern aus beiden Teilen Deutschlands organisiert, 1993 Neuberufung auf C4-Professur TUD, 1996 Emeritierung, 2012 letzte wissenschaftliche Publikation.

Gisbert Großmann (Dresden) wurde am 24. Februar dieses Jahres 85 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!



Nachgefragt

## Zum 70. Geburtstag von Ludger Ernst



*Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?*

Das war in meinem 3. Studiensemester (Sommer 1966) in der OC-Grundvorlesung von Professor Gerhard Quinkert. Ich war stark davon beeindruckt, was

die Moleküle durch die Spektren über ihre Struktur verraten.

*Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?*

Das eindimensionale  $^{19}\text{F}$ -Experiment (mit  $^1\text{H}$ -Entkopplung) an einem symmetrischen Difluorocyclophan, durch das meine damalige Mitarbeiterin aus den  $^{13}\text{C}$ -Satelliten eine überraschend große F,F-Kopplung durch den Raum nachgewiesen hat. Und spannend waren auch meine ersten 2D-Spektren Anfang der 1980er Jahre.

*Haben Sie ein Lieblingsexperiment?*

Nein. Das liebste Experiment ist jeweils dasjenige, welches hilft, die anstehende Frage zu beantworten. Meistens ist dazu die Kombination mehrerer Experimente nötig. Bei der Strukturermittlung sind das naturgemäß Korrelationsexperimente.

*Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?*

Ich kann natürlich nur unter den „eigenen“ auswählen. Das ist eindeutig das 600er mit Kryokopf. Braucht man mehr, wenn man keine Proteine und keine Polynucleotide untersucht?

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

Ich modifiziere Ihre Frage ein bisschen: „Was sollte einen typischen NMR/ESR-Spektroskopiker ausmachen?“ Er sollte dieselben Eigenschaften besitzen, die ich von einem typischen Chemiker erwarte, d. h. er plant seine Experimente gründlich, führt sie sorgfältig und reproduzierbar durch und lässt auch bei der Auswertung (Analyse, Zuordnung, Interpretation) und Dokumentation äußerste Sorgfalt walten. Da mangelt es leider oft, selbst in (vermeintlich) renommierten Zeitschriften.

*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?*

Die Grundlagen der Methode und einen Querschnitt durch die Anwendungen. Spezialisieren innerhalb der NMR können sie sich später noch.

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

Vielleicht die Einführung des Non-uniform Sampling (NUS) in die NMR oder die Single-scan nD NMR (L. Frydman).

*Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!*

\_\_\_\_\_ t

*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Im Alter von 20 Jahren wurde ich mit dem NMR-Virus infiziert. Obwohl ich inzwischen die 70 erreicht habe, war bislang keine Therapie erfolgreich.

*Ludger Ernst (Braunschweig) wurde am 4. April dieses Jahres 70 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!*



## Nachgefragt Zum 75. Geburtstag von Frank H. Köhler



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Zur NMR bin ich während der Promotion gekommen. Es ging um eine präparative Arbeit, während der sich in der aktuellen Literatur für mich als Metallorganiker neue, vielversprechende Einblicke in Molekülstrukturen auftaten, z. B. Hetero-, insbesondere Metallkerne, deren Kopplungen zu konventionellen Kernen, Moleküldynamik, chemische Gleichgewichte...

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Besonders spannend war anfangs der 1970er Jahre, ob sehr breite, weit verschobene  $^{13}\text{C}$ -NMR-Signale ohne Isotopenanreicherung detektierbar sind. Das war von Verbindungen mit ungepaarten Elektronen (extremes Beispiel: Nickelocen) zu erwarten, erwies sich aber stets als harter Kampf mit Störungen der Basislinie und der Signalanregung in einem großen spektralen Fenster. Solche Probleme bestanden bis vor kurzem.<sup>1</sup>

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Nein.

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Nein.

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

Typisch für einen NMR/EPR-Spektroskopiker scheint mir zu sein, dass er sich nicht nur damit befasst, was im Lehrbuch für Instrumentelle Ana-

lytik steht, sondern dass er Gerätefehler auch mal selbst sucht und behebt. So jemand modifiziert sein Gerät sogar gelegentlich. Typischerweise ist er auf gute Kontakte nicht nur zu anderen bastelnden Spektroskopikern angewiesen, sondern besonders zu vermeintlichen Laien aus der Synthetik, um listige Experimente zu ersinnen.

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?

Wenn der universale Anspruch schon so schwer in die Praxis umzusetzen ist, dann kann sich der heutige NMR/EPR-interessierte Student für eigenes wissenschaftliches Arbeiten immerhin in Grenzbereichen tummeln: Biophysik, Chemie der Materialien, heterogene Katalyse...

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

Bahnbrechend – vor allem was die Breite der gebrochenen Bahn betrifft – war wohl die enorme Steigerung der Empfindlichkeit der NMR-Methode besonders durch DNP und Cryo-Probenköpfe.

Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?

Als gebürtiger Thüringer, schulisch in Schleswig-Holstein geprägt, während des Chemiestudiums von München beeindruckt und als Postdoc an der Ecole Normale Supérieure in Paris stationiert, war meine Devise: eine gute Portion Delokalisierung ist spannend. Zwischenzeitlich wurde es mit der Habilitation und der Professur an der TU München statischer, bis durch Gastprofessuren in Paris, Straßburg und Osaka wieder die Ferne lockte.

Frank H. Köhler (München) wurde am 27. Mai dieses Jahres 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

<sup>1</sup> Inorg. Chem. 2013, 52, 12634-12644, DOI: 10.1021/ic401830f

