



2/2018 • 59. Ausgabe

# MARS

Mitteilungsblatt der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie  
der Gesellschaft Deutscher Chemiker

## Liebe Kolleginnen und Kollegen,

das Jahresende naht und wir können festhalten, dass in 2018 einiges „geboten“ war in unserer Community. Aber auch darüber hinaus ist uns jede Beteiligung von Ihrer Seite, z. B. bei den vorgeschlagenen Themenberichten aus aktuellen Feldern oder sonstige Anregungen, sehr willkommen.

Wir alle leisten täglich einen Beitrag dazu, dass das „Auge des Chemikers“ seine wissenschaftliche Aufgabe erfüllt. „Keine Synthese-Publikation ohne NMR-Daten“ bedeutet aber heute meist, dass die NMR in der präparativen Chemie nur noch als notwendiges Übel betrachtet wird. Dabei geht es bei unserer Arbeit um nicht weniger als die experimentellen Eckpfeiler eines wissenschaftlichen Papers: Ein Mechanismus sollte nicht nur postuliert, sondern auch durch solide experimentelle Daten belegt werden.

Die Relevanz der Methode wieder ins Bewusstsein zu rücken und die geringe Wertschätzung der „Synthetiker“ durch eine faire, wissenschaftliche Praxis zu korrigieren ist auch unsere Aufgabe – denn häufig verkaufen wir uns unter Wert. Wir müssen deutlicher als bisher unsere Beiträge kenntlich machen, wo wir durch unsere Service-Mentalität oft zu zurückhaltend sind.

In diesem Sinne wünschen wir erholsame Weihnachtsfeiertage und ein erfolgreiches Jahr 2019!

*Nils Schlörer und Johannes Liermann*

## Inhalt

Fachgruppentagung 2018 in Leipzig. . . . .	2
Diskussionstagung „Praktische Probleme“ 2018 in Mainz. . . . .	3
Initiative NFDI4Chem. . . . .	4
Diskussionstagung „Praktische Probleme“ in Halle . . . . .	4
Zum 75. Geburtstag von Hans-Heinrich Lim- bach. . . . .	5
Zum 80. Geburtstag von Heinrich Marsmann	6
Zum 80. Geburtstag von Siegmund Braun . . . .	7
Zum 85. Geburtstag von Horst Friebolin. . . .	8
Ein kleines Weihnachtsrätsel. . . . .	10

## 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, [nilschloerer@uni-koeln.de](mailto:nilschloerer@uni-koeln.de)).

Die nächste Ausgabe 1/2019 erscheint voraussichtlich Ende Januar 2019 (Redaktionsschluss 14. Januar 2019).

Aus der Fachgruppe

## Fachgruppentagung 2018 in Leipzig

Vom 10. bis zum 13. September fand das 40. FGMR-Treffen an der Universität Leipzig statt. Es wurde gemeinsam mit dem abschließenden Symposium des EPR-Schwerpunktprogramms durchgeführt. Daher war die EPR-Spektroskopie sehr prominent vertreten, und die Teilnehmerzahl belief sich auf knapp 300. Im gutbesuchten Tutorial sprachen Burkhard Luy, Michael Hansen, Gunnar Jeschke und Ville-Veikko Telkki zu allen Varianten des  $90^\circ$ -Pulses in NMR und EPR.

Die Eröffnungsfeier fand im Neuen Paulinum, der Universitätskirche und Aula der alten Leipziger Universität, am Augustusplatz neben Gewandhaus und Oper gelegen, statt. Die alte Paulinerkirche war am 30. Mai 1968 gesprengt, nach einem Entwurf des niederländischen Baumeisters Erick van Egeraat in neuem Glanz wiedererrichtet und im Jahre 2017 wiedereröffnet worden. Zur Konferenzöffnung spielte Prof. Dieter Michel, ein NMR-Spektroskopiker der Leipziger Physik, auf der Jehmlich-Orgel Stücke von Bach und Homilius. Bei der Eröffnungsfeier wurde die Bloch-Vorlesung von Manuel Etzkorn aus Jülich über NMR-Strukturansätze an komplexen Systemen gehalten. Die drei Ernst-Preise gingen an Katja Barth (Frankfurt), Mira Schwab (Darmstadt) und gemeinsam an Andreas Seegerer und Philipp Nitschke (Regensburg).

Die wissenschaftlichen Vorträge fanden im Hörsaalgebäude im neuen Uni-Campus im Herzen der Stadt statt. Die Plenarvorträge umfassten das gesamte Gebiet der Magnetresonanz: von Theorie (Martin Kaupp), Flüssig-NMR (Christian Griesinger), Festkörper-NMR (Eike Brunner, Jürgen Haase, Marina Caravetta), Spin-Dynamik (Christiane Timmel) und Hyperpolarisierung (Henrike Heise), EPR (Josef Granwehr, Mark Sherwin, Sabine Van Doorslaer, Daniella Goldfarb) zu MRI (Jürgen Hennig, David Norris). Horst Kessler, Mitgründer und langjähriger Vorsitzender der FGMR, sprach



Die Teilnehmer nach der Eröffnungsveranstaltung im Neuen Augusteum.

zum 40. Geburtstag der Fachgruppe und erinnerte an den Beginn sowie die enormen Fortschritte.

Parallelsitzungen fanden in drei Sälen statt, die Sessions waren thematisch sortiert. In der Halle zwischen den Hörsälen waren Poster aufgestellt und die Tische der Aussteller errichtet. Während der Postersessions fand sich ein buntes fröhliches Treiben in dieser großen Halle. Zum Konferenzdinner wurde in Auerbachs Keller geladen. Hier, genau an diesem Ort, wie Goethe in seinem „Faust“ berichtet, traf der große Gelehrte Faust auf den Mephisto, der dort Studenten in Pudel verwandelte und Wein aus Holztischen fließen lassen konnte. Auch zum Konferenzdinner erschien Mephisto, der sich zu Fragen der Magnetresonanz durchaus interessiert gab. Schließlich eröffnete er das Buffet und überließ die hungrige Menge in den Gewölbekellern ihrem Schicksal.

Bei der Abschlussveranstaltung erhielt Prof. Derek Marsh (MPI Göttingen) aus den Händen von Prof. Thomas Prisner die Silbermedaille der Internationalen EPR-Gesellschaft. Die drei Posterpreise gingen an Yuri Golitsyn (Halle), Thomas Hett (Bonn) und Linda Jütten (Köln).

Jörg Matysik, Uni Leipzig

## Veranstaltungen

# Diskussionstagung „Praktische Probleme“ 2018 in Mainz

Ein fester Termin im Kalender der anwendungsorientierten NMR-Labors im akademischen und industriellen Bereich war stets die Diskusstagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“, die erstmals 1980 von Joachim Buddrus, Wolfgang Dietrich und Reiner Radeaglia in Dortmund organisiert wurde. Später fand sie zunächst von 1998 bis 2010 wechselnd in Erlangen

Firmen Bruker, JEOL, Magritek, Merck, SpinDoc und Signals auch sechs Sponsoren, ohne deren finanzielle und inhaltliche Unterstützung die Tagung in dieser Form nicht möglich gewesen wäre.

Auf vielfachen Wunsch stand mit den Tutorials über die Bestimmung von homo- und heteronuklearen Kopplungskonstanten ein neues Format auf dem Programm, in dem Burkhard Luy und

Benjamin Görling ihr breites praktisches Wissen zum Thema an das Publikum weitergeben konnten. Das vielseitige Vortragsprogramm fand seinen Höhepunkt mit den Beiträgen von Rainer Häßner und Waldi Bauer, die beide 2018 in den Ruhestand eingetreten sind und dementsprechend in Ihren Vorträgen ein Resümee ihres



Teilnehmer der Tagung „Praktische Probleme“ 2018 in Mainz. (Foto: Katrin Limberg)

und Bochum und anschließend bis 2017 insgesamt 14mal in Erlangen statt, wo sie sich unter der charmanten Leitung von Walter „Waldi“ Bauer zu einem regelrechten „Familientreffen“ der Anwender von NMR-Spektrometern aller Gerätehersteller entwickelte.

Leider stand die traditionsreiche Tagung 2017 vor dem Ende, da Waldi Bauer, inzwischen im Ruhestand, nicht mehr als Organisator zur Verfügung stand. Damit wollten wir (nes und jl) uns nicht abfinden und fanden in Andrea Porzel sehr bald eine Mitstreiterin. Zusammen organisierten wir eine Neuauflage der Tagung, die am 20. und 21. März 2018 an der Universität Mainz stattfand.

Trotz der relativ kurzen Vorbereitungszeit fanden nicht nur 80 angemeldete Kolleginnen und Kollegen den Weg zur Tagung, sondern mit den

Schaffens zogen.

Die erfolgreiche Tagung schloß letztlich mit vier Workshops, deren inhaltliche Breite mit den Themen Benchtop-NMR, Software, elektronischer Sturkturrevision und sogar Benchtop-EPR überaus beachtlich war.

Daher freuen wir uns schon sehr auf ein Wiedersehen in Halle an der Saale, wo die Tagung 2019 wieder stattfinden wird – nähere Informationen auf Seite 4 in dieser Ausgabe.

jl



Forschungsdaten

## Initiative NFDI-4Chem

Das Thema Umgang mit (NMR-)Daten spielt wie der generell fällige Übergang von der analogen zur digitalen Bearbeitung von experimentellen Ergebnissen im chemischen Labor in den letzten Jahren auch im forschungspolitischen Umfeld (endlich) eine wichtigere Rolle. So gab der Rat für Informationsinfrastrukturen (RFII) zwei Jahre nach seiner Gründung in 2016 die Empfehlung ab, den Umgang mit Forschungsdaten deutschlandweit moderner zu gestalten und bei zukünftigen Wissenschaftlern die Einbindung digitaler Workflows von vornherein zu berücksichtigen.\*

Da diese Mammutaufgabe einer Nationalen Forschungsdaten Infrastruktur (NFDI) sich über sämtliche Bereiche der Wissenschaften erstrecken soll (neben den Naturwissenschaften z.B. auch Geistes-, Ingenieurwissenschaften und Jura) wurde in diesem Jahr mit der Einrichtung sogenannter Fachkollegien begonnen, die bisher für die entsprechenden Bedürfnisse der Geowissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Chemie in Angriff genommen wurden.

Zunächst sollen unter Schirmherrschaft der Technischen Informationsbibliothek (TIB) Hannover Arbeitsgruppen gebildet werden, um bis zum Beginn der aktiven Förderung durch das Ministerium Konzepte für das jeweilige Fachgebiet zu entwickeln. Für die Chemie kamen bisher zwei „kick-off“-Treffen zustande, bei denen interessierte Teilnehmer aus unterschiedlichsten Bereichen (vom Bibliothekswesen über die „datenproduzierenden“ Bereiche Synthese und Strukturanalytik bis zu Wissenschaftsorganisationen) Vorschläge für Themenfelder sammeln und eine Organisationsstruktur erarbeiten sollten. Ein erstes Thesenpapier wurde im August veröffentlicht.†

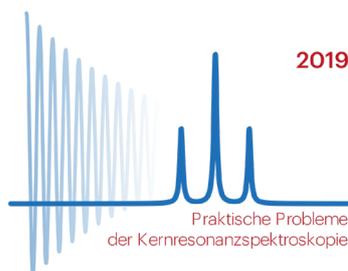
Die NMR-Spektroskopie, die für die experimentellen Forschungsdaten bei Publikationen

neben der Röntgenstrukturanalyse und Massenspektrometrie eine herausragende Rolle innehat, ist entsprechend ihrer Bedeutung bisher bei dem Vorhaben gut repräsentiert. Es ist daher zu hoffen, dass im Zusammenspiel von Fachgruppe, GDCh und bereits jetzt am Forschungsdatenmanagement beteiligten Initiativen sinnvolle Konzepte für diese längst fällige Reform beim Umgang mit wissenschaftlichen Daten auf den Weg gebracht werden.

nes

Veranstaltungen

## Diskussionstagung „Praktische Probleme“ in Halle



Die traditionelle, anwendungsbezogene Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie“ (siehe MARS 1/2018, S. 9) findet

2019 in Halle an der Saale statt und wird dieses Mal von Andrea Porzel am renommierten Institut für Pflanzenbiologie (IPB) ausgerichtet. Sie umfasst neben Vorträgen ein zweiteiliges Tutorial zur Heterokern-NMR, mehrere Workshops und bietet genügend Raum für den Austausch zwischen NMR-Spektroskopikern aus Hochschulen, Behörden und der Industrie. Ein Treffen der IG Kleine Moleküle ist ebenfalls fester Programmpunkt. Wie in der Vergangenheit wird keine Tagungsgebühr erhoben, wegen begrenzter Raumkapazität bitten wir jedoch um eine Anmeldung über die Tagungshomepage.

nes

### ■ 41. Diskussionstagung Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie

19./20. März 2019

Halle an der Saale

<https://www.ipb-halle.de/pp-nmr-2019>

\* Pressemitteilung der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz GWK: <https://www.gwk-bonn.de/fileadmin/Redaktion/Dokumente/Pressemitteilungen/pm2018-13.pdf>

† <https://doi.org/10.5281/zenodo.1404200>

Nachgefragt

## Zum 75. Geburtstag von Hans-Heinrich Limbach



*Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?*

Vor 50 Jahren im Rahmen meiner Diplomarbeit im Arbeitskreis von Herbert Zimmermann, Physikalische Chemie in Freiburg. Ein gebrauchtes 100 MHz-CW-

Spektrometer war angeschafft worden, aber niemand kannte sich damit aus. Nach Ausprobieren aller Schalter und Drehknöpfe, dem Studium des Manuals und einiger Literatur konnte ich dann meine Diplomarbeit und Doktorarbeit zu Thema Wasserstoffbrücken und Protonenaustausch durchführen.

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

Das mit der besten Wette mit Molekülen und ihren Kernspins.

*Haben Sie ein Lieblingsexperiment?*

Tiefemperaturexperimente an Flüssigkeiten bis zu 90 K und an Festkörpern bis zu 10 K mit überraschenden Spektren. Danach die Erweiterung zu immer komplexeren Systemen, von Übergangsmetallhydriden zu Metallnanopartikeln, von einfachen Säure-Base Wasserstoffbrücken zu mesoporösen Festkörpern und Proteinen.

*Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?*

Die alten Spektrometer der Eisenzeit, mit Magnetfeld in Richtung x-Achse: Varian HA 100, Bruker CXP 100, Nino Yannonis 60 MHz Festkörperspektrometer.

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

Er sitzt lieber vor einem NMR/ESR-Gerät statt in Laser- oder Syntheselaboren zu stehen, macht nur ab und zu Gymnastik unter Magneten, führt Aufgaben lieber nacheinander statt parallel durch, liebt Moleküle und ihre Spins und spielt mit ihnen.

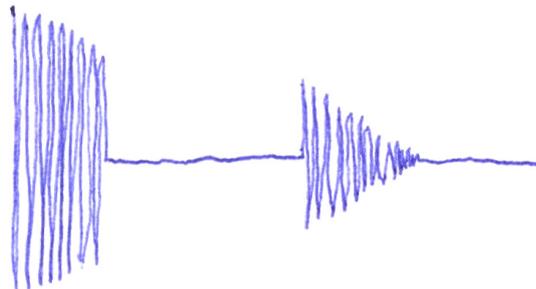
*In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?*

Konkrete Empfehlungen sind oft nach kurzer Zeit schon überholt. Meine Empfehlung an junge Leute: auch auf die Gefahr hin, euch mal zu verirren, sucht euch selber euren Weg durch das Lebenslabyrinth.

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

Für mich die Ultra-Hochfeld NMR Spektroskopie mit Larmorfrequenzen heute sogar schon bis zu 1.5 GHz. Wär hätte in der „Eisenzeit“ an eine solche Entwicklung gedacht?

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



Was ist mit diesem FID einer Wasserprobe los?\*

*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Ich war als Schüler ein Altsprachler, der wissen wollte, was so im Kopf ist, habe daher Chemie/Physikalische Chemie als Querschnittsfach in Bonn und Freiburg studiert. Mein ursprüngliches Ziel habe ich natürlich verfehlt. Ein langer Weg von einer Station zur anderen, Brühl-Bonn-Freiburg-San Jose-Berkeley-Berlin-Freiburg-Toulouse und dazwischen Arbeit mit vielen jungen Menschen aus vielen Ländern und in vielen Ländern. Hans-Heinrich Limbach (Berlin) wurde am 15. März 75 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!

\* Antwort: Früher ein beliebtes Spiel zur Demonstration der Kernresonanz: Die Probe wurde, nach sorgfältigem Shimmen, während des FID kurzzeitig aus dem Eisenmagneten gehoben und wieder fallen gelassen.



Nachgefragt

## Zum 80. Geburtstag von Heinrich Marsmann



*Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?*

In meiner Diplomarbeit 1963 in Göttingen am anorganischen Institut sollte ich die Verteilung von Phosphorsäureestern anhand von deren  $^{31}\text{P}$ -Kernresonanz untersuchen. Da sich die Lieferung des Hochauflösungsteils zum KIS 25 hinzog, übernahm ich zwischendurch die Aufgabe von meinem Betreuer Prof. Schwarzmann in der Messung der Breitlinienresonanz für meine Kollegen. Ich glaube diese Methode ist inzwischen ausgestorben, erlaubte damals die verschiedenen Protonenspezies in amorphen Oxid/Hydroxid-Materialien zu erkennen.

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

Wir sind alle Glücksspieler. Wenn ein Experiment gelingt, daß irgendwie an der Grenze von Maschine und Theorie liegt, sind wir glücklich. So war es für mich sehr kribbelnd, ob ein  $^{29}\text{Si}$ -Signal auf der damals noch sehr einfachen 60 MHz-Maschine zu erreichen sei.

*Haben Sie ein Lieblingsexperiment?*

Die Sache, daß man mit sehr kleinen Kopplungskonstanten, die sonst kaum nachweisbar sind, einen noch sehr ordentlichen Populationstransfer erreichen kann.

*Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?*

Mein altes Bruker Avance 300.

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

Eine große Frustrationstoleranz: Immer noch einmal probieren.

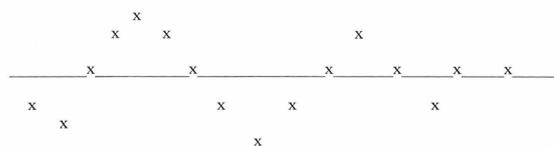
*In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?*

Die gesunde Skepsis gegenüber Daten und die Kenntnis der Grundlagen, die hinter diesen schönen Bildern liegt.

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

Es gibt Fortschritte in allen Richtungen und man kann eigentlich keine ausschließen: Einmal die enorme Leistung der Automatisierung, die letzten Endes dazu geführt hat, daß auch Laien schnell Ergebnisse bekommen. Zum anderen die enorme Steigerung der Empfindlichkeit durch die Kryotechnik und digitale Aufnahmetechnik.

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



*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Geht nicht, Ich lebe noch!

*Heinrich Marsmann (Paderborn) wurde am 22. September 80 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!*

Nachgefragt

## Zum 80. Geburtstag von Siegmund Braun



Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?

Vorlesungen an der Uni Göttingen von Wolfgang Lüttke\* über Physikalische Methoden in der Organischen Chemie und speziell von Hans Strehlow (PC) über

NMR, wo ich auch erstmals Messungen erlebte. In meinem Regal steht noch heute als Souvenir sein Buch!†

Was war das spannendste NMR-Experiment für Sie?

Spannend waren für mich nach  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -Messungen die an  $^{15}\text{N}$ -Kernen, zuerst an markierten Verbindungen, später auch an unmarkierten (Stefan Berger, damals Uni Marburg).

Haben Sie ein Lieblingsexperiment?

Es war die HMBC-Methodik in immer weiter verbesserten Varianten, die über die  $^2J_{\text{C,H}}$ - und  $^3J_{\text{C,H}}$ -Kopplungen detaillierte Auskunft über die Verknüpfungen der Atome in einem Molekül ermöglicht.‡

Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?

Es war immer das jeweils neueste. Viel wichtiger war für mich: wo in der NMR-Community finde ich Gerät und Know-how für mein Problem, z. B. in den Anfängen Messungen von  $^1\text{H}$ -

NMR-Spektren mit  $^2\text{H}$ -Entkopplung (Herbert Dreeskamp, Christian Schumann, Uni Stuttgart, bei 60 MHz; Harald Günther, Josef Pawliczek, Uni Köln, bei 100 MHz wg. Signal-Überlagerung), frühe  $^{15}\text{N}$ -Messungen in Marburg, später 500 MHz-Messungen in Frankfurt, als wir nur ein 300 MHz-Gerät hatten (Harald Schwalbe, Gottfried Zimmermann).

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

Ein hohes Maß an Gewissenhaftigkeit und Selbstkritikfähigkeit. Nicht nur die Wechselwirkung zwischen Materie und Hochfrequenz im Blick haben, sondern selbst in Wechselwirkung treten, d. h. Austausch und Kooperationen pflegen, Fortbildung betreiben. „Austausch und Weiterbildung sind tragende Säulen unserer Community!“ (MARS 1/2018, S. 1).

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

Sich die Grundlagen erarbeiten und je nach Herkunft und Interesse (AC, BC, MC, OC, PC, TC...) neugierig sein, Kontakt zu entsprechender Arbeitsgruppe aufnehmen!

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

Keine Ahnung, da waren wir auf Wandertouren und Weltreisen.

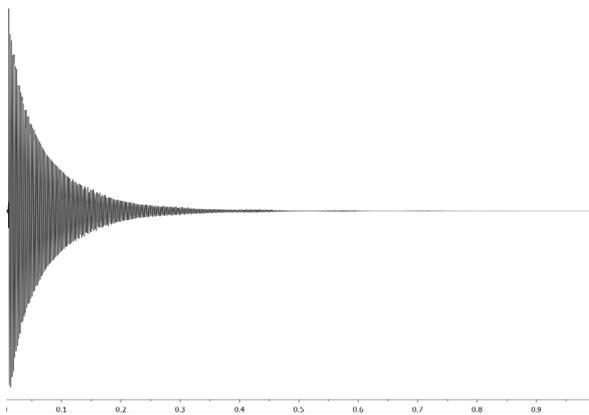
\* Anm. der Redaktion: Kurz vor Veröffentlichung erreichte uns die Nachricht, dass Herr Professor Wolfgang Lüttke am 30. Oktober 2018 verstorben ist.

† H. Strehlow, *Magnetische Kernresonanz und chemische Struktur*, Steinkopff, Darmstadt, 1962

‡ G. E. Martin, A. S. Zektzer, *2D NMR Methods for establishing Molecular Connectivity*, Wiley-VCH, New York, 1988; S. Berger, S. Braun, *200 and More NMR Experiments*, Wiley-VCH, Weinheim, 1998



Zum Schluss: Zeichnen Sie bitte einen FID für uns!



Geht doch gar nicht, einen so schönen FID kann man nur messen, er stammt von Possmann-Äbbelwoi (Messung von Reinhard Meusinger, Darmstadt).

*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Schule und Abitur in Marburg, Chemie-Studium an der Uni Göttingen, Promotion im Juli 1970 bei Wolfgang Lüttke. Nach Anfrage von Klaus Hafner (OC, TU Darmstadt, Brief vom 20. Februar 1970) bei Prof. Lüttke nach einem potentiellen Nachfolger für die vakante Stellung des NMR-Laborleiters hat es sich für mich gut gefügt: ich war dort von 1970 bis 2002 tätig.

*Siegmar Braun (Darmstadt) wurde am 22. September 80 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!*

Nachgefragt

## Zum 85. Geburtstag von Horst Friebohn



*Wie und wann sind Sie zur NMR gekommen?*

Mit NMR als Methode kam ich 1959/60 als Doktorand bei Reinhard Mecke am Physikalisch-Chemischen Institut der Uni Freiburg in Berührung. Wir

hatten dort am Institut für Elektrowerkstoffe der Fraunhofer-Gesellschaft, dessen Direktor Prof. Mecke war, eines der drei ersten NMR-Spektrometer in Deutschland, ein Varian DP60. Dieses Instrument hatte keinen „Lock“, keinen Auto-Shim und keinerlei Komfort. Dies war aber ein Vorteil für mich, denn ich konnte am Gerät noch einiges für meine Tieftemperaturmessungen anbauen und ergänzen. Ich profitierte gerade in der Anfangszeit sehr von den Erfahrungen von Gerhard Englert, der das Gerät seit Anfang (1959) betreute. Ein weiterer glücklicher Umstand war, dass Siegfried Kabuß in der Organischen Chemie bei Arthur Lüttringhaus mit seiner Dissertation begann. Mit ihm entwickelte sich eine fruchtbare Zusammenarbeit für die folgenden 20 Jahre.

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

Messungen bei sehr tiefen Temperaturen (bis  $-150$  Grad) waren noch Neuland und erforderten Entwicklungen auf apparativem und messtechnischem Gebiet. Manche Reparatur musste bei Varian in den USA durchgeführt werden, was viel Zeit und Geld kostete. Gerade ersteres war im Laufe einer Doktorarbeit wenig erfreulich.

*Haben Sie ein Lieblingsexperiment?*

Die Untersuchungen zu Konformation und Dynamik von Sechs- und Siebenringen, unser Hauptanwendungsgebiet, erforderte unsere vol-

le Konzentration. Als weiteres Arbeitsgebiet kamen später Untersuchungen an Polysacchariden hinzu, da ich ans Institut für Makromolekulare Chemie gewechselt war. Dort begann ich mit Gunda Keilich, Dietmar Ziegler und Egon Siefert das Studium von Enzymreaktionen, direkt im Spektrometer.

*Haben Sie ein Lieblingsspektrometer?*

Auf dem Gerätesektor hat sich in den folgenden Jahren sehr viel getan. Das DP60 war aber mein Lieblingsspektrometer, an dem wir eben am besten experimentieren konnten.

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

Experimentierfreudigkeit, was natürlich auch Mut zum Risiko beinhaltet, denn Reparaturen und Ersatzteile sind teuer und stets mit zeitlichen Verzögerungen verbunden.

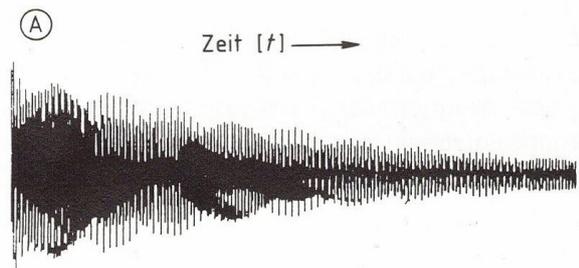
*In der NMR gibt es kaum noch Universalgenies, die das ganze Feld in seinen mittlerweile zahlreichen Facetten durchdringen. Welche Bereiche der NMR würden Sie heutigen Studenten besonders ans Herz legen?*

Vor allem die Grundlagen der NMR-Spektroskopie, Strukturaufklärung organischer Moleküle, heute auch mit 2D-Methoden.

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

2D-NMR-Spektroskopie und NMR an anderen Kernen als  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$ . Ganz wesentlich sind hier die Möglichkeiten, Computer einzusetzen, z. B. bezüglich Empfindlichkeit. Dadurch sind ohne Eingriffe in die Reaktion Mechanismen studierbar: Beispiele Enzymreaktionen, Strukturen von Polymeren (z.B. Polysacchariden).

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



Ein solches Multipllett, meist ein Quartett einer CH-Gruppe in einer CH-CH<sub>3</sub> Gruppe verwendeten wir vor ca. 50 Jahren, um die Homogenität des Magnetfeldes zu optimieren.

*Ihre Kurzbiographie in zwei Sätzen?*

Ich begann ungefähr 1960 mit NMR im Rahmen meiner Dissertation bei R. Mecke am Institut für Physikalische Chemie mit dem Studium der konformativen Beweglichkeit von Sechs- und Siebenringen. Die Synthese der Ringe, auch von solchen mit Sauerstoff oder Schwefel im Ring, wurden von S. Kabuß (Doktorand bei A. Lüttringhaus) durchgeführt. Promotion 1963. 1963-1968 habe ich die Arbeiten am Institut für Makromolekulare Chemie fortgesetzt und mit der Habilitation abgeschlossen. Von 1968-1970 war ich im NMR-Labor (Hauptlabor) der BASF, ab 1968 Universitätsdozent an der Universität Heidelberg. Seither Professor in der Organischen Chemie der Universität Heidelberg. Seit 1998 im Ruhestand

*Horst Friebolin (Heidelberg) wurde am 15. September 85 Jahre alt. Wir gratulieren sehr herzlich!*



Zum Schluss

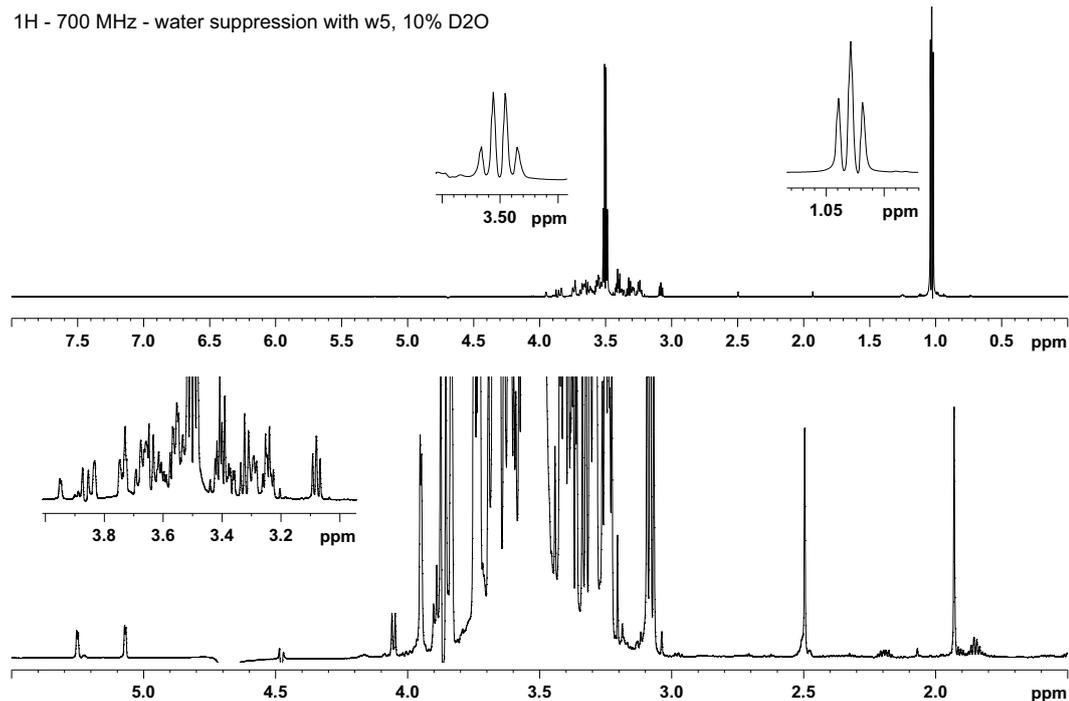
## Ein kleines Weihnachtsträtsel

Zum Schluss nicht nur dieser Ausgabe, sondern auch des Jahres ein jahreszeitlich passendes NMR-Rätsel. Welches Getränk verbirgt sich hinter den abgebildeten Spektren? Die Lösung verraten wir in der nächsten Ausgabe!

Mit herzlichem Dank an Sebastian Kemper (TU Berlin) für die Spektren.

jl

<sup>1</sup>H - 700 MHz - water suppression with w5, 10% D<sub>2</sub>O



<sup>1</sup>H - 700 MHz - water suppression with w5, 10% D<sub>2</sub>O

