

MARS Ausgabe 71

01/2026

GDCh



Inhalt

Editorial

47. Praktische Probleme der NMR-Spektroskopie (PPNMR) an der Universität Göttingen

Zum 70. Geburtstag von Ulrike Holzgrabe

NMRium – process, analyze and teach NMR spectra with no installation

NMR-Stammtisch Rhein-Main-Neckar

Zum Schluss (mit Aufruf)

Editorial

Liebe MARS-Leserinnen und -Leser,

Kennen Sie das? Sobald man eine Webseite aufruft, ein Dokument in einer Software öffnet oder in den Messenger auf dem Handy guckt – schon ist die AI hilfsbereit zur Stelle. Selbst, wenn man sie gar nicht benötigt oder einsetzen will: Mit sanftem Widerstand drängt sie sich in fast allen Bereichen auf, die über eine digitale Anbindung verfügen.

Natürlich soll dies keineswegs eine generelle Abwertung der Fähigkeiten der „Künstlichen Intelligenz“ sein. Es ist ja auch zu verlockend, wenn man in kniffligen Situationen, in denen schon in der Vergangenheit Google&Co bereitwillig ihre Hilfe anboten, die von AI generierten Vorschläge gleich zuoberst serviert bekommt. Jede und jeder von uns hat damit sicher schon einschlägige Erfahrungen gemacht.

Bei einigen dürfte auf Grund dieser Entwicklung bereits leichtes Unbehagen entstanden sein, denn es ist ja noch keineswegs klar, was die AI mit den derzeit dominierenden LLMs auf unserem Feld leisten kann und wozu ihr forcierter Einsatz führen wird. Während bei Vorliegen von ausreichenden Informationen (etwa ^1H plus Korrelations-Experimente) eine Zuordnung mittels solcher Hilfsmittel durchaus möglich und sinnvoll erscheint, muss man sich z.B. bei der bloßen Vorstellung von Versuchen (nicht nur) aus dem Umfeld des wissenschaftlichen Nachwuchses, ohne tieferes Verständnis der Materie aus eindimensionalen Protonenspektren eine Zuordnung „dengeln“ zu lassen, wohl schon jetzt warm anziehen.

Allein dieses Thema würde sicher schon eine eigene MARS-Ausgabe rechtfertigen, wir haben uns aber stattdessen für dieses Heft zunächst noch etwas anderes, nicht weniger Fesselndes, ausgedacht, wofür wir dringend Ihre **Mithilfe benötigen**. Damit und mit dem Rest der Ausgabe hoffen wir, im Sommerloch und während der allgemeinen, derzeit etwas dystopischen Stimmung, für etwas Entspannung zu sorgen.

Ihre MARS-Redaktion

47. Praktische Probleme der NMR-Spektroskopie (PPNMR) an der Universität Göttingen

Am 17. und 18. März 2026 fand im schönen Göttingen an der Fakultät für Chemie die 47. Diskussionstagung „Praktische Probleme der NMR-Spektroskopie“ statt. Die Tagung dient traditionell dem Austausch und der Vernetzung von NMR-Laborleitern sowohl an Universitäten als auch in der Industrie und Behörden. Dieses Mal waren wieder rund 100 Teilnehmer aus ganz Deutschland, Österreich und sogar dem Vereinigten Königreich angereist.

Den ersten Tag eröffneten zwei Tutorials zum Thema „Residual Dipolar Couplings“. Han Sun vom FMP Berlin und Volker Schmits von der TU Darmstadt brachten den Zuhörern theoretische Grundlagen, die Praxis der Probenvorbereitung sowie Methoden zur Auswertung nahe.

Anschließend gab es Gelegenheit die neue Mensa am Nordcampus kennenzulernen.

Das eigentliche Vortragsprogramm eröffneten wir, die Gastgeber, mit einer kurzen Geschichte der Stadt und Universität, gefolgt von 8 Vorträgen in den beiden Sessions „Hardware“ und „Heterokerne“. Die Pause dazwischen zeigte, wie hoch der Austauschbedarf unter den Teilnehmern war: erst durch energischen Einsatz einer Kuhglocke konnte die „Herde“ von Teilnehmern wieder in Richtung Hörsaal bewegt werden :) Den ersten Tag beendete das Treffen der AG „Kleine Moleküle“, moderiert von Nils Schlörer. Es entwickelte sich eine lebhafte Diskussion, die abends in geselliger Runde beim Tagungsdinner im Restaurant „Bullerjahn“ im Keller des alten Rathauses (und teilweise in der Göttinger Kneipenszene) fortgesetzt wurde.

Der Vormittag des zweiten Tags war dicht gepackt mit insgesamt 10 Vorträgen in den Sessions „Software und Lehre“, „Theorie“ und „Praxis“. In den Pausen dazwischen gab es



Bild: Xiaobai Wang

Gelegenheit zu einem kurzen Rundgang durch die NMR-Abteilung der Fakultät für Chemie bevor wir zur Mittagspause (und fast pünktlich) das offizielle Vortragsprogramm abschliessen konnten. Nachmittags fanden noch drei Workshops der Firmen JEOL, SciY und Spin-Doc statt, wobei die Informationen „aus dem Nähkästchen" von Bert Heise sicherlich nochmal ein Höhepunkt und würdiger Abschluss waren.

Wir, die Gastgeber, hatten große Freude an der Organisation der Tagung, die ohne die zahlreiche tolle Unterstützung nicht hätte stattfinden können: Wir haben zu danken dem erfahrenen Programmkomitee (Johannes Liermann, Nils Schlörer, Christian Richter und Sebastian Kemper) sowie allen Vortragenden für das spannende und abwechslungsreiche Programm. Ein großer Dank geht an das fantastische lokale Helferteam (Christiane Siebert, Martin Weitemeyer, Till Frese, Claudia Stückl, Györgyi Sommer-Udvarnoki, Michelle Kobold) sowie an das Hausmeister- und Werkstattteam. Und nicht zuletzt danken wir den zahlreichen Spendern, die es uns ermöglicht haben die Tagung ohne Tagungsgebühren und mit einem würdigen Dinner durchführen zu können. Wir freuen uns auf ein Wiedersehen im nächsten Jahr bei Nils Schlörer in Jena!

Franziska Traeger und Michael John

Zum 70. Geburtstag von Ulrike Holzgrabe

Wie und wann sind Sie zur Magnetresonanz gekommen?

Ich habe vor meinem Pharmaziestudium auch Chemie studiert und lernte die NMR als Strukturaufklärungsmethode zunächst kennen.

Was bedeutet Magnetresonanz für Sie in einem Satz?

NMR kann sowohl zur Strukturaufklärung, aber zur Qualitätssicherung von Arzneistoffen im regulatorischen Sinne genutzt werden.



Bild: privat

Was sind Ihre Lieblingsbeschäftigungen außerhalb der Magnetresonanz?

Wenn ich auf die Forschung der letzten 45 Jahre blicke, dann habe ich einerseits immer gerne neue Antiinfektiva entwickelt und andererseits mich um die Qualität von Arzneistoffen gekümmert, letzteres in Zusammenhang meiner Arbeiten mit regulatorischen Behörden. Beides kann für die Bevölkerung lebensrettend sein.

Was hat Ihnen an Ihrer Arbeit am meisten Spaß gemacht?

Es war mir immer eine große Freude, den Qualitätsanalytikern klarzumachen, dass man neben dem Goldstandard der HPLC die NMR-Spektroskopie einsetzen kann und diese viel mehr Informationen geben kann als nur HPLC-Peaks.

Was würden Sie heutigen Studierenden besonders ans Herz legen?

Unbedingt über den Tellerrand zu schauen und Ungewöhnliches zu wagen, wie z.B. NMR in der Qualitätsanalytik von Arzneistoffen.

Was ist in Ihren Augen die wichtigste Errungenschaft auf dem Gebiet der Magnetresonanz?

Ich finde faszinierend wie man mittels NMR-Spektroskopie Arzneistoffentwicklung vorantreiben kann, indem man die Bindung von kleinen Arzneistoffen an großen Proteinen (Zielstrukturen) aufklären kann.

Kurzbiographie in Stichpunkten

Prof. Dr. Ulrike Holzgrabe, geb. Ashauer (Jg. 1956) studierte von 1974-79 Chemie in Marburg und von 1978-1981 Pharmazie in Marburg und Kiel. Es folgten Approbation 1982, Promotion 1983 und Habilitation in Pharmazeutischer Chemie 1989 in Kiel. 1990 Rufe auf

C3-Professuren nach Bonn und Berlin. 1990-1999 C3-Professorin und 1997-1999 Prorektorin an der Universität Bonn. 1998 Rufe auf C4-Professuren nach Tübingen, Münster und Würzburg. 1999-2022 Lehrstuhlinhaberin in Würzburg. 2004 Ruf auf eine C4-Professur in Berlin, abgelehnt, 2008 Angebot auf die Präsidentschaft des BfArM, abgelehnt. 2009-2011 Dekanin der Fakultät für Chemie und Pharmazie, und von 2018 bis 2021 Vizepräsidentin für Studium und Lehre der Universität Würzburg. Seit 2022 Seniorprofessorin.

Ulrike Holzgrabe (Würzburg) ist am 25. Januar 70 Jahre alt geworden. Wir gratulieren sehr herzlich!

NMRium – process, analyze and teach NMR spectra with no installation

NMRium is an application for processing and analyzing NMR spectra that requires no installation. You open it on any computer, drag your data into the window, and you are ready to work. It can be used online, or, for confidential or proprietary data, installed under license behind the company firewall, either on the intranet or on a secured cloud. Its intuitive design suits beginners and experts alike, which makes it particularly well suited for students learning to process and, above all, to assign spectra.

No installation — just drag and drop

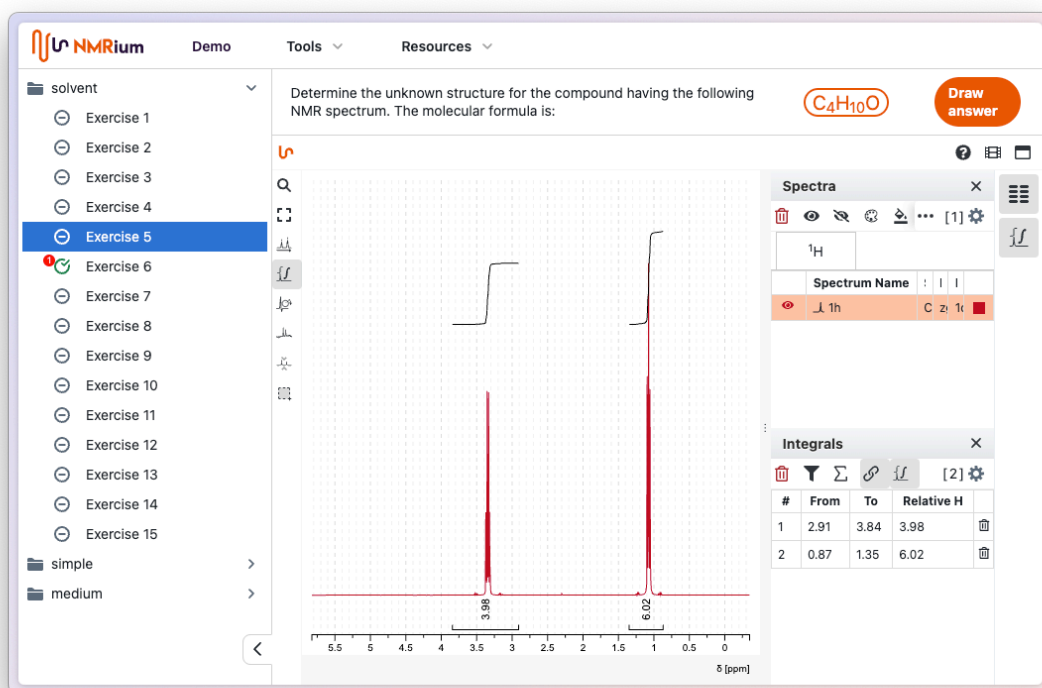
Loading data is as simple as dropping a file or a whole folder onto the “Drag and drop here” area; `.zip` and `.gz` archives are decompressed automatically. NMRium reads the common formats directly — JCAMP-DX (`.dx`, `.jdx`, `.jcamp`), Bruker, JEOL (`.jdf`), Varian, and the NMRium archive (`.nmrium.zip`). NMRium is also the processing software bundled with the high-field spectrometers from QUAD Systems (Zurich), so their data opens the same way. Loading a raw FID automatically applies apodization, zero filling, Fourier transform and phase correction, so a usable spectrum appears within seconds ([details](#)).

A complete toolbox — a genuine alternative for everyday work

NMRium covers the whole workflow one would otherwise reach for a desktop program to do: from the FID, apodization, zero filling, Fourier transform and phase correction; on the spectrum, baseline correction, peak picking, integration, multiplet analysis, and assignment of signals to a chemical structure. It also handles 2D data (COSY, HSQC, HMBC), lets you draw or import the molecule, can be embedded into an electronic lab notebook, and saves the whole session — the original raw data together with the processing and annotations — into a single portable `.nmrium.zip` file ([overview](#)). Because the original data travels with every step of the analysis, the work stays fully reproducible and ready for a FAIR future.

Built for teaching

NMRium includes a teaching mode built around interactive exercises for structure elucidation. Students work on real 1D and 2D data (^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC) and propose a structure at their own pace, with immediate feedback by comparison with the answer. Several exercise collections are ready to use straight away (for example a set prepared at JGU Mainz), and teachers can assemble their own and share them with a single link ([teaching](#), [documentation](#)).

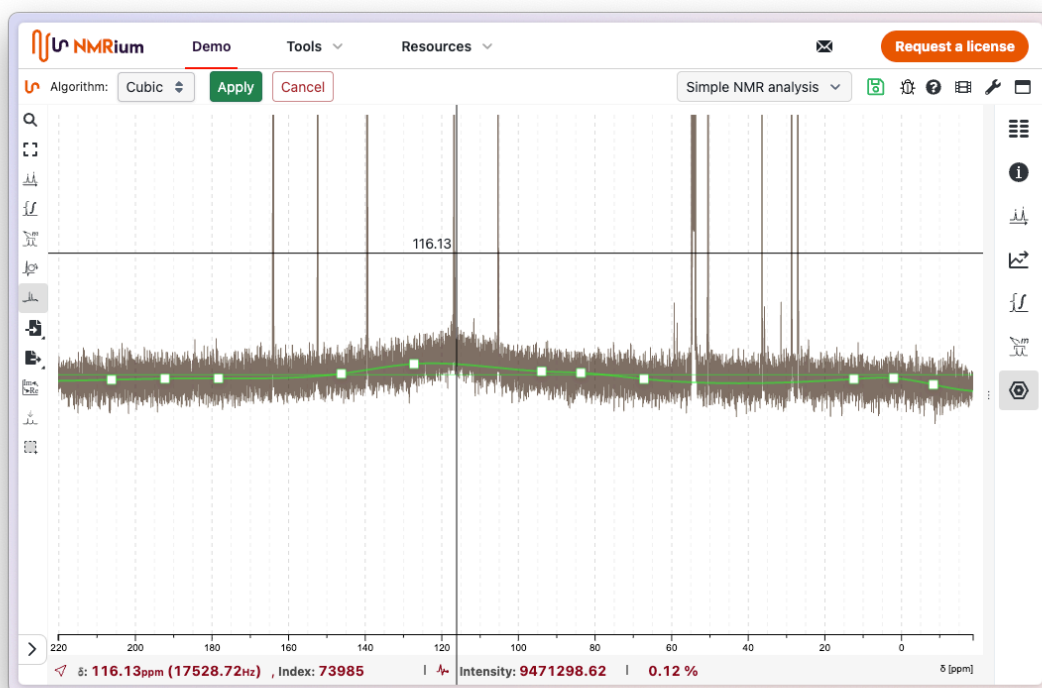


Interactive structure-elucidation exercise (source: docs.nmrium.org)

To finish, two of the latest additions are worth a closer look: an enhanced baseline correction and the fitting of individual peak shapes, both shown in the animations below.

Enhanced baseline correction

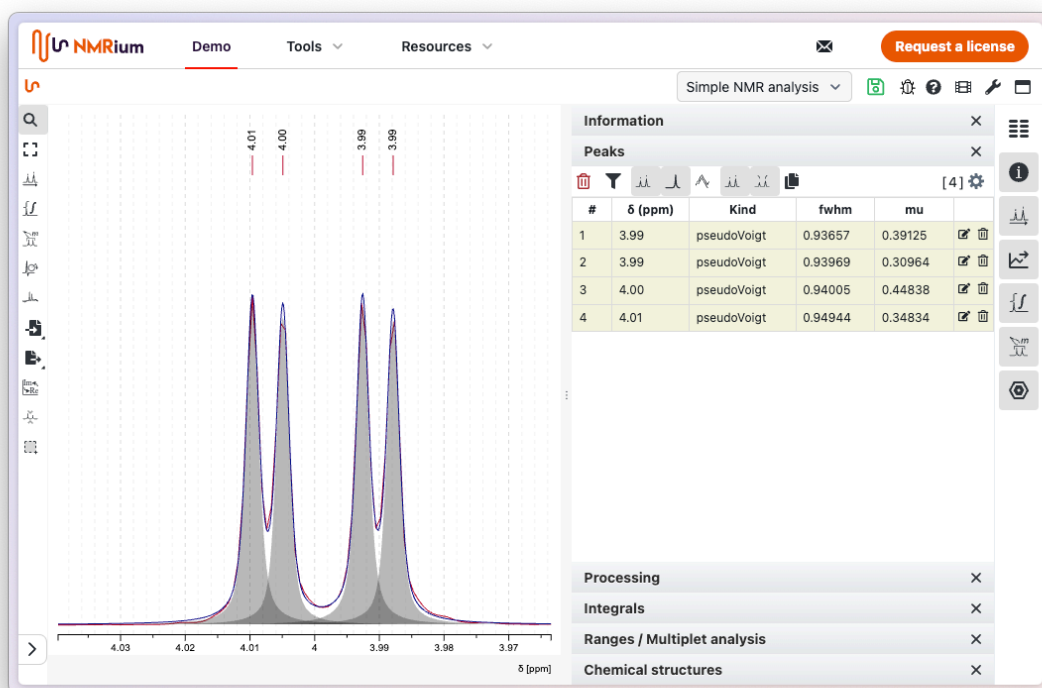
A clean baseline is the basis of any reliable integration. The reworked baseline correction uses an intuitive anchor concept: after activating “Baseline correction”, you place anchors by clicking in flat, signal-free regions. Each anchor can be moved by dragging and deleted just as easily (hover and press Backspace), so you keep full control over the points that define the baseline. Five algorithms are available (Cubic, Polynomial, Whittaker, Bernstein, airPLS), and pressing “c” centers the view around zero before you click “Apply” ([documentation](#)).



Baseline correction with movable anchors (source: docs.nmrium.org)

Determining peak shape and surface

A lesser-known but very useful feature analyzes the exact shape of individual peaks. NMRium performs a deconvolution, fitting Gaussian, Lorentzian or pseudo-Voigt line shapes to the data. You zoom into the region, click “Optimize peaks” and obtain for each peak its fitted width (fwhm) and mixing factor (μ). “Peaks sum” overlays the reconstructed trace and “Peaks shapes” shows the individual curves — giving access not only to the precise line shape but also to the surface of each, even overlapping, peak ([documentation](#)).



Fitting individual peak shapes by deconvolution (source: docs.nmrium.org)

So the best thing is simply to try it yourself: go to www.nmrium.com, drop in your own spectra and see how far you get in a few minutes. The online use is free for teaching and other academic, non-commercial work. You can subscribe to the newsletter there to follow new features, and the full documentation can be found at docs.nmrium.org.

Luc Patiny

Luc Patiny is CSO at Zakodium and holds a PhD in chemistry. He also teaches organic chemistry, structural analysis and cheminformatics at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL).

NMR-Stammtisch Rhein-Main-Neckar



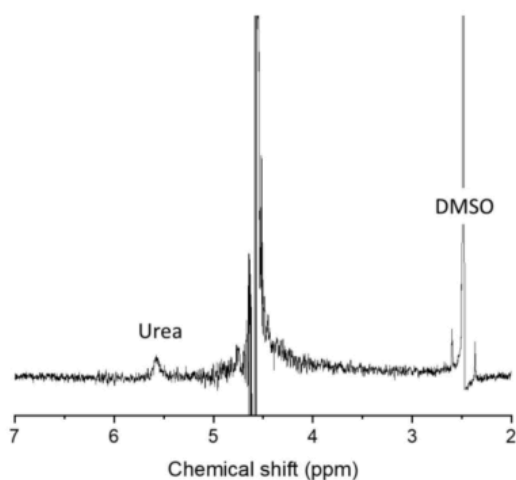
Bild: V. Schmidts

Die NMR-Community aus Berlin und Potsdam ([wir berichteten](#)) war das Vorbild für den NMR-Stammtisch Rhein-Main-Neckar, der sich seit 2024 inzwischen zum achten Mal abwechselnd in Frankfurt, Darmstadt und Mainz getroffen hat. Zuletzt im wunderschönen Biergarten Darmstadt, wie auf dem Bild zu sehen.

Wer Interesse hat, teilzunehmen, kann sich gerne beim NMR-RMN-Mailverteiler (die Abkürzung für Rhein-Main-Neckar ist tatsächlich NMR rückwärts) unter diesem [Link](#) registrieren. Der nächste Termin voraussichtlich der 20. August in Mainz.

jl

Zum Schluss (mit Aufruf)



Supplementary Fig. 10 | ^1H NMR spectroscopy of Cu/Zn hybrid catalyst. We also detected the urea product by ^1H NMR spectroscopy. To suppressing water peak, we did not use D_2O and used pure DMSO as the reference solution that was mixed with catholyte after electrolysis.

Bessere Wasserunterdrückung gewünscht? Dann am besten auf D_2O verzichten!

Wahrscheinlich kennen Sie das alle: Man liest eine NMR-Publikation und stößt auf Spektren oder Interpretationen, die man mindestens „interessant“ nennen darf. Ein schönes Beispiel sehen Sie in der Abbildung. Wie die Bildunterschrift genau zu verstehen ist, konnten wir leider nicht ermitteln. Wir finden aber, dass das Weglassen von D_2O für eine verbesserte Wasserunterdrückung höchst kreativ ist.

Haben Sie auch schöne NMR-Bespiele aus der Literatur, die Sie gerne an dieser Stelle im MARS sehen möchten? Dann freuen wir uns über Ihre Nachricht an liermann@uni-mainz.de!

jl