

Symposium Heidelberg

Das Symposium der Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie der GDCh und der Chemischen Gesellschaft zu Heidelberg unter dem Titel:

"Entwicklung, Stand und Zukunft der NMR-Spektroskopie"

aus Anlass des Eintritts in den Ruhestand von *Herrn Dr. Tony Keller* (Bruker-Biospin GmbH, Rheinstetten) rückt näher:

Termin:
Freitag, 23. Mai, 2008, 14:30
Universität Heidelberg
Hörsaalzentrum Chemie

Namhafte Vertreter des Fachgebietes werden Geschichte, Gegenwart und Zukunft der NMR-Spektroskopie beleuchten. Weit mehr als hundert Anmeldungen zeigen das grosse Interesse an der Veranstaltung und lassen einen regen Meinungs austausch erwarten. Wer sich jetzt kurzfristig noch zur Teilnahme entscheidet möchte sich bitte umgehend auf der Webseite

www.gdch.de/strukturen/fg/nmr/fgtk.htm registrieren, besonders um auch den fleissigen OrganisatorInnen die Planung zu erleichtern und sie vor Überraschungen zu bewahren.

Eine Teilnahmegebühr wird nicht erhoben.

(hus, ethk)

Fachgruppentagung 2008

Die Vorbereitungen zur Fachgruppentagung in Regensburg sind in vollem Gange. Inzwischen ist das Programm fertig, sind alle invited speakers benannt und die Vortragstitel zum grössten Teil

bekannt. Die aktuellen Angaben entnehmen sie bitte der Webseite unter

<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/fg2008/index.htm>

Die meisten Informationen finden Sie auch nochmal im aktuellen Flyer (Anhang), der Ihnen bereits zugegangen ist.

Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass in fast allen Sessions Slots für 15 minütige Kurzvorträge freigehalten wurden. Bitte informieren Sie besonders unsere jüngeren Kolleginnen und Kollegen und ermuntern sie sie, diese Gelegenheit zur Darstellung ihrer Forschungsergebnisse zu nutzen. Die Auswahl der eingereichten Beiträge erfolgt möglichst zeitnah nach Ende der deadline durch die jeweiligen Chairs.

Phosphor, Fluor und NMR – Gerhard Hägele 70

Diesen Steckenpferden bleibt Gerhard Hägele wohl auch nach seinem 70ten Geburtstag am 14.04.2008 treu.

Nach dem Besuch des Lessing-Gymnasiums in Mannheim schloss sich von 1954 bis 1958 zuerst die Lehre und Arbeit als Laborant bei der Firma Th. Goldschmidt in Mannheim an. 1958 bis 1960 folgte das Studium an der Textilingenieurschule in Krefeld mit dem Abschluss zum Ing.grad. und ein einjähriger Aufenthalt als Laboratoriumsingenieur bei der Firma Aktiebolaget G-MAN in Trelleborg, Schweden.

Das Chemiestudium an der RWTH Aachen von 1961 bis 1967 schloss er mit einer Arbeit über „Phosphor- und Protonenresonanzspektroskopische Untersuchungen an einigen Organophosphorverbindungen“

ab und der weitere wissenschaftliche Weg war damals eigentlich schon vorgezeichnet. Die Promotion 1969 über „Infrarot- und kernresonanzspektroskopische Untersuchungen an t-Butylphosphorverbindungen“, genau wie die Diplomarbeit betreut durch Wilhelm Kuchen, wird als Koreferent von Robert Kosfeld begutachtet. Die Arbeit entsteht in einer sehr beschäftigten Zeit, da Kuchen und Hägele parallel von Aachen aus mithilfe, die Chemie an der Universität Düsseldorf zu etablieren. Ein 60 MHz NMR-Spektrometer wird in Düsseldorf 1969 beschafft und soll von Hägele betreut werden, den es aber vorzieht mit einem DFG-Stipendium für ein Jahr zur Vertiefung seiner NMR-Kenntnisse zu Robin Harris nach Norwich zu gehen, bevor er diese Betreuung übernimmt..

Am 27.06.1972 habilitiert sich Gerhard Hägele mit „Kernresonanzspektroskopischen Untersuchungen an Organophosphor-Fluor-Verbindungen“. Mit der Beschaffung des 90MHz Spektrometers im gleichen Jahr wird der Grundstein für ein breit gestreutes Spektrum an NMR-Arbeiten gelegt. Wir Studenten und Doktoranden stimmten und spielten Fußball oder Squash im stetigen Wechsel, immer getragen von dem Gedanken, den goldenen Schuss zu setzen. In der NMR war das Ziel, das bestaufgelöste ^{19}F - $\{^1\text{H}, ^{31}\text{P}\}$ -Spektrum aufzunehmen, zu digitalisieren und per Lochkartenleser in ein Programm zur Simulation zu stecken. Und das alles mit einem Eisenmagneten, Analogschreiber und einem „Computer“, der nur entweder messen oder eine FT rechnen konnte, nicht aber beides, außer durch Neuprogrammierung mittels Lochstreifen ! Waren das Zeiten ...

Gerhard Hägele behält bei all diesen Arbeiten immer die praktische Anwendung in der chemischen und pharmazeutischen



Industrie im Auge - vielleicht die logische Folge seines bemerkenswerten und außergewöhnlichen Ausbildungsweges. Schwerpunkte seiner Arbeit werden unter anderem biologisch relevante Aminophosphonsäuren und die titrationsgesteuerten NMR-Messungen, die als Vorläufer der LC-NMR gesehen werden können. Bei den NMR-spektroskopischen Arbeiten stehen immer wieder auch die Didaktik und das Verstehen der Spektren im Vordergrund. Seine systematisch aufgebaute Programm-bibliothek um DAISY (Düsseldorfer Analyse- und Iterations-System) zur rechnerischen Analyse komplexer, oft symmetrischer, NMR-Systeme hat weltweite

Verbreitung gefunden. In zahlreichen Vorträgen im In- und Ausland bei Freunden von Kanada über Südafrika bis in den Iran, von Polen bis Australien und Neuseeland versucht er, die Anwendungsmöglichkeiten der NMR-Spektroskopie aufzuzeigen.

Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie wünscht weiter viele magisch-magnetische Momente in guter Gesundheit !

(eng)



<http://nmrwiki.org>

The modern NMR-scientist or –user is aware of several web-based information platforms providing information about publications, conferences, vendors etc., like for instance

→ The NMR Information Server (<http://spincore.com/nmrinfo>)

→ Wiley's spectroscopyNOW
(<http://www.spectroscopynow.com>)

→ The FG NMR of the GDCh
(<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de>)
and similar services of other national organizations.

However so far knowledge and specific information was not collected on a single side, hence filling my web-browser's favorite 'NMR' folder with some 100 links.

In November 2007 a new web-resource entered the scene: the NMRWiki. Like Wikipedia it is a knowledge base whose content and design is the collaborative effort of many volunteers.

Once registered everybody can create entries which after a -so far not explicitly clear refereeing process- will be published. The creator of this resource hopes that it will build up specialist knowledge related to NMR, EPR and MRI similar to Wikipedia. On the page the motivation is described as:

NMRWiki aims at:

organizing reference, training, bibliography, other information about Magnetic Resonance Methods

facilitating networking of NMR/ESR/MRI specialists

promoting NMR/ESR/MRI research and business

*NMRWiki could contain **training information, lectures, software manuals, repository of pulse sequences, organized bibliography information etc.***

I think this is a great idea but of course greatly depends on the efforts of the NMR society. So far not much is there, but on the other hand the side is only public since November

TOPICS

- Introductory and historical material (Lectures, Tutorials and Primers, all external links)

- Instrument Manuals & Reference (Links to Bruker and Varian manuals and tutorials)
- Experiments (6 entries, 1 link)
- Research Topics (10 topics)
- Software: (nmrPipe, CARA, Sparky, Atnos/Candid, QUEEN, etc.)
- Data&Reference: BMRB SDBS NMRShiftDB Solvents, more...
- Journals: JBNMR, JMR, MRC
- Unsorted literature (drop bibtex references there)

MRI Topics

- Basics of MRI online book by Joseph P. Hornak, Ph.D.
- K-space formulation of MRI, a tutorial by Stan Sykora.
- e-MRI Online MRI course.
- MRI Equipment

EPR Topics

- Introduction to EPR @ New Mexico State University
- EPR Equipment (1)

Links to Organizations and Societies, Vendors, Service providers, Blogs, Fun

Jülich, 25th of April Peter Blümler
ecoNMR @ Research Center Jülich

Hinweis

Bitte beachten Sie auch die Ausschreibung im Anhang.

Zu guter Letzt

Klausurfrage:

Wie bekommt man aus den Messwerten ein NMR-Spektrum ?

Antwort:

Durch ein geeignetes Programm zur Auswertung von NMR-Spektren



Fachgruppe
Magnetische Resonanz



**CHEMISCHE GESELLSCHAFT
ZU HEIDELBERG** gegr. 1890

Symposium

Entwicklung, Stand und Zukunft der NMR-Spektroskopie

Freitag, den 23. Mai 2008

Hörsaalgebäude der Chemischen
Institute der Universität Heidelberg
Im Neuenheimer Feld 252
69120 Heidelberg

Weitere Informationen
finden Sie im Internet unter:
www.gdch.de/strukturen/fg/nmr/fgtk.htm



Verwaltung des
Organisch-Chemischen Instituts
— Keller-Symposium —
Im Neuenheimer Feld 270
69120 Heidelberg

Dr. h.c. Tony Keller

Bruker Biospin GmbH Rheinstetten

Dr. Tony Keller leitete Jahrzehnte die Geschichte der Firma Bruker-Biospin, die weltweit für Forschung und Routine an den Hochschulen und in der Industrie Spektrometer entwickelte und herstellte. Da Bruker-Spektrometer in fast jedem NMR-Labor benutzt werden, kam jeder NMR-Spektroskopiker mit Tony Keller in Berührung. Fachlich kompetent beriet er seine Kunden, Sonderwünsche wurden berücksichtigt, Schwierigkeiten gemeinsam gelöst.

Auf seine Initiative geht das jährlich im Herbst in Ettlingen stattfindende Benutzertreffen zurück. Dies hat sich schnell zum Treffpunkt aller mit der NMR-Spektroskopie befassten Wissenschaftler und Techniker Spektroskopiker entwickelt, die in diesem Forum Gedanken und Erfahrungen untereinander und mit den Mitarbeitern der Firma Bruker austauschen können.

Am 31.12.2007 trat Dr. Tony Keller in den Ruhestand. Seine für die NMR-Spektroskopie erbrachten Leistungen waren für die Verantwortlichen der Fachgruppe Magnetische Resonanz der GDCh und der Chemischen Gesellschaft zu Heidelberg Anlass, zu seinen Ehren dieses Symposium zu veranstalten.

Warum dieses Symposium gerade in Heidelberg stattfindet, hat seinen Grund darin, dass Dr. Tony Keller, wenn es ihm irgendwie möglich war, an den Treffen des bis 1998 existierenden Arbeitskreises NMR HD aktiv teilnahm und so hinausgehend über die geschäftlichen auch persönliche Beziehungen zu Heidelberg entstanden.

Horst Friebolin

Programm

14.30 Begrüßung und Eröffnung

Prof. Dr. **L. H. Gade**, Heidelberg
Dekan der Fakultät für Chemie
und Geowissenschaften

Prof. Dr. **S. Berger**, Leipzig
Vorsitzender der Fachgruppe
Magnetische Resonanz

Festvorträge

Vorsitz: Prof. Dr. **H.-U. Siehl**, Ulm

14.45 Prof. Dr. **R. R. Ernst**, ETH Zürich
*Die Anfänge der NMR-Spektroskopie in Zürich
und die besonderen Beiträge von Tony Keller*

15.35 Prof. Dr. **M. Sattler** EMBL Heidelberg
*NMR-Spektroskopie, eine vielseitige Methode
zur Untersuchung biologischer Strukturen*

16.15 - 16.45 Kaffeepause

Vorsitz: Prof. Dr. **H. Kessler**, TU München

16.45 PD Dr. **B. Luy**, TU München
*„Gummibärchen-NMR“: Gestreckte Gele
zur Messung dipolarer Restkopplungen
in (fast) allen Lösungsmitteln*

17.15 Dr. **W. Bermel**, Bruker Biospin
*¹³C-detektierte Experimente -
von Peptiden zu Proteinen*

Abendessen im Hörsaalgebäude



Absender:

Am Symposium und dem Abendessen

nehme ich teil mit

weiteren Person(en).

Ort, Datum

Unterschrift



Gesellschaft
Deutscher Chemiker

Fachgruppe Magnetische
Resonanzspektroskopie

30th Discussion Meeting

Magnetic Resonance in
Biology and Chemistry

Invitation
Call for Papers

Regensburg, Germany
September 22 - 25, 2008

<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/fg2008/index.htm>



Committees / Addresses

Scientific Committee

M. Baldus (Göttingen), S. Berger (Leipzig), S. Grzesiek (Basel), R. Gschwind (Regensburg), E.T.K. Haupt (Hamburg), G. Jeschke (Mainz), H.R. Kalbitzer (Regensburg), H. Kessler (München), H. Kogler (Frankfurt), W. Kremer (Regensburg), N. Müller (Linz), T. Prisner (Frankfurt), O. Zerbe (Zürich)

Local Organizing Committee

H.R. Kalbitzer, R. Gschwind, E. Lang, W. Gronwald, M. Spörner, R. Bader, C. Munte, W. Kremer, G. Horn (Regensburg)

Scientific Program

Prof. Dr. Dr. Hans Robert Kalbitzer
Universität Regensburg
Institut für Biophysik und Physikalische Biochemie
D-93040 Regensburg
Phone +49-941-943-2594
Fax +49-941-943-2479
E-Mail hans-robert.kalbitzer@biologie.uni-regensburg.de

Registration and further Information

Electronically only via <http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/fg2008/index.htm>

Speakers

Speakers who have already agreed to lecture:

K. Akasaka	L. Helm	W. Robien
K. Albert	T.A. Holak	C. Schmidt
F. Allain	D. Huster	J. Senker
S. Appelt	R. Konrat	H.-J. Steinhoff
K.-P. Dinse	C. Mayer	A.S. Ulrich
V. Dötsch	B.H. Meier	P. Vasos
H. Eckert	B. Meyer	H.-M. Vieth
A. Geyer	N. Müller	S. Weber
C. Griesinger	T. Müller	G. Wider
S. Grzesiek	M. Parkinson	D. Willbold
D. Gudat	K. Prüßmann	O. Zerbe
P. Güntert	R. Riek	

Tutorial Ligand Screening, Metabolomics, and Drug Design

(Organizers: H.R. Kalbitzer, W. Kremer, T. Maurer, B. Meyer)

There will be a pre-conference tutorial session (September 22th). Organizers are Prof. Dr. H.R. Kalbitzer (Regensburg), PD Dr. W. Kremer, (Regensburg), PD Dr. T. Maurer, (Ingelheim), and Prof. Dr. B. Meyer (Hamburg). The tutorial will introduce the participants into "NMR methods for ligand screening, metabolomics, and drug design".

The tutorials are addressed to students and scientists working in industry or universities and are free of charge.

Topics

- **Biological NMR**
- **Chemical Analysis**
- **Chemistry**
- **Computational Methods**
- **Exotica**
- **Imaging/In cell NMR**
- **Membrane and Proteins**
- **Methods**
- **Macromolecular NMR**
- **Nanostructures**
- **Organometallics**
- **Paramagnetic Systems**
- **Protein Interactions**
- **Solid State**
- **Techniques**

Submission of Papers

Everyone wishing to present a poster contribution should submit an abstract. About 50% of all oral presentations will be selected from the poster abstracts. Please mind the deadlines for the submission of the following papers:

	<u>Deadlines</u>
Posters	August 1 st , 2008
Early registration	August 1 st , 2008
Late registration	August 18 th , 2008
Manuscript for Ernst Grants	July 1 st , 2008

The guidelines for abstracts can be found in the internet:

<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/fg2008/index.htm>

General Information

Registration fees

Fees for registration must be paid **after having received the invoice** to the following account:

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER Dresdner Bank AG Frankfurt am Main Routing Number (BLZ) 500 800 00 Account No. (Kto.Nr.) 4 900 200 00
--

- GDCh-members and members of EuCheMS-member societies € 150.-
- GDCh-members, unemployed and retired € 75.-
- Non-GDCh-members € 200.-
- Students (with a valid student card) € 55.-
- Students (GDCh-members) € 35.-
- Student members GDCh FG Magn. Reson. € 0.-
- GDCh Goldmembers € 0.-
- Daily tickets GDCh-members € 75.-
- Daily tickets non-GDCh-members € 100.-
- after August 1st late registration fee + € 20.-
- Tutorial sessions € 0.-
- Conference Dinner (drinks not included) € 30.-

Registration fees -excl. daily tickets- includes a ticket for public bus for the whole period of time of the conference.

Location

The Conference will be held at the lecture halls H36 and H37 in the building of physics of the University of Regensburg, Universitätsstr. 31, D-93053 Regensburg. <http://www.uni-r.de>

Travel Information

By car: Highway-Cross (Autobahnkreuz) Regensburg → Autobahn A3 (Direction Passau) → Exit Kinikum (100a) → Universität/Fachhochschule → Josef-Engert-Straße → Parkplatz Chemie **or** Exit Klinikum (100a) → Universität/Fachhochschule → Galgenbergstraße → Albertus-Magnus-Straße → Parking Garage

By train:

The busses No. 6 (Klinikum) and No. 11 (Burgweinting) go to the university (During the day every 8-12 minutes). They leave from the bus station in "Albertstraße" approx. 300 m from the train station. The stop at the university is called "Universität/Mensa" and is both announced and appears on a display in the bus.

Airport: The nearest airports are the Franz-Josef-Strauß Airport Munich or the Airport Nuremberg.

Conference office

The conference office will be located near by the lecture halls. Opening hours:

Monday, September 22, 2008	12.00 - 18.00 hrs
Tuesday, September 23, 2008	08.30 - 18.00 hrs
Wednesday, September 24, 2008	08.30 - 17.00 hrs
Thursday, September 25, 2008	08.30 - 16.00 hrs

Phone	+49-941-943-7000
Fax	+49-941-943-7010

Social Events

Reception, September 23, 2008, 19.30 hrs

On Tuesday evening at 19.30 hrs, the Mayor of Regensburg invites the participants of the conference to a reception in the old town hall. The old town hall is situated at the Rathausplatz No. 1 in the center of Regensburg. Participants will be guided through the Imperial Hall, a gothic banqueting hall which was the meeting place of the Perpetual Imperial Diet from 1663 onwards. This is open to all participants even if you wish not to take part in the conference dinner. Free of charge.

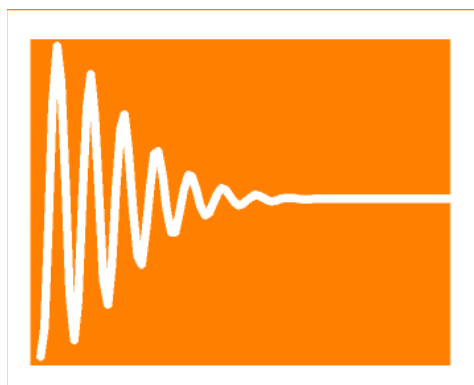
Conference Dinner, September 23, 2008, 20.30 hrs

The conference dinner will be held on Tuesday at Fürstliches Brauhaus of Thurn und Taxis, Waffnergasse 6-8, 93047 Regensburg. Price per Person: € 30.- (drinks not included) Registration requested.

Guided City-tour, September 24th, 2008

Sight seeing tour in the amazing old town city of Regensburg, which belongs to world cultural heritage. Free of charge.

Tätigkeitsbericht 2007



Magnetische Resonanzspektroskopie

Mitglieder: 430

Vorsitzender: Prof. Dr. Stefan Berger

Homepage: <http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/>

Die von Dr. E. Haupt gepflegte Homepage der Fachgruppe (<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/>) ist derzeit im Umzug begriffen und wird künftig über die GDCh-Hauptseite erreichbar sein. Hohe Zugriffszahlen auf diese Seite belegen das Interesse an der magnetischen Resonanz in der Bundesrepublik und außerhalb. Zusätzlich zu dieser Webseite verteilt die Fachgruppe regelmäßig über e-mail als pdf-file den „MARS-Newsletter“, welcher sich großer Beliebtheit erfreut. Der MARS-Newsletter wird ebenfalls von Dr. E. Haupt gestaltet und erschien im Berichtsjahr 2007 in fünf Ausgaben.

Etwa 250 Mitglieder der GDCh-Fachgruppe Magnetische-Resonanz-Spektroskopie trafen sich in der Woche vom 26. bis 29. September 2007 in Göttingen. Wie immer wurde das offizielle Tagungsprogramm von einem Tutorial begleitet, welches diesmal dem Thema "Magnetic Resonance in Biophysical Applications" gewidmet war und offenbar eine große Zahl von Teilnehmern ansprach. Am Donnerstagmorgen begann dann die von Prof. C. Griesinger und PD. Dr. M. Baldus organisierte Jahrestagung mit Vorträgen der diesjährigen Ernst-Preisträger:

1. Bela Bode, Universität Frankfurt (AK Prof. Prisner)
2. Kyril Kobzar, TU München (AK Dr. B. Luy)
3. Christian Beier, Universität Osnabrück (AK Prof. Steinhoff)

Alle drei Preisträger präsentierten ihre Arbeiten in sehr guter Form. Eine Postersession mit über 70 Postern rundete den Tag ab.

Der zweite und dritte Tag der Tagung wurden mit Sitzungen zur Analytischen Chemie, NMR Computations, Medical Imaging, ESR in Biology und Material Sciences verbracht.

Am Ende der Tagung fand in gemeinsamer Sitzung die Verleihung der Posterpreise statt, bei der drei herausragende Poster geehrt wurden (Melanie Falb (Göttingen), Eugenio Daviso (Leiden) und Christian Gröger (Regensburg)).

Neben der Jahrestagung fanden auch 2006 weitere lokale und regionale Veranstaltungen und Arbeitstreffen unter Beteiligung der Fachgruppe oder deren Mitglieder statt, wie beispielsweise das Treffen über „Praktische Probleme der NMR“ in Bochum vom 15.-

16.1.2007 und zwei „Mitteldeutsche Resonanztreffen“ in Leipzig am 25.6. und am 26.11 (Prof. S. Berger) mit jeweils drei Vorträgen.

Die nächste Jahrestagung der Fachgruppe findet vom 22.- 25.9. 2008 in Regensburg gemeinsam mit den Fachgesellschaften der Schweiz und Österreich statt (<http://fgmr.chemie.uni-hamburg.de/fg2008/index.htm>). Das Tutorium steht unter dem Thema "Ligand Screening, Metabolomics and Drug Design".

Zum Schluss ein besonderer Hinweis: Die Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie veranstaltet am 23.5. um 14.30 in Heidelberg ein Symposium "Entwicklung und Stand der NMR-Spektroskopie" zu Ehren von Herrn Dr. Tony Keller. Anmeldung unter: <http://www.gdch.de/strukturen/fg/nmr/fgtk.anmeldung.htm>. Alle Freunde der Kernresonanz sind herzlich aufgefordert, an dieser Veranstaltung teilzunehmen.

Professur

Bes. Gr. W2/W3

Beamtenverhältnis auf Lebenszeit

für das Fachgebiet

Instrumentelle Analytik

Kennziffer : P 294/08

Bewerberinnen und Bewerber sollten durch hervorragende Leistungen auf einem aktuellen Gebiet der instrumentellen Analytik (NMR, MS und „hyphenated techniques“ mit der Chromatographie) international ausgewiesen sein. Erwartet wird die Bereitschaft, die bestehenden Forschungsaktivitäten des Fachbereichs und der Universität Bremen sinnvoll zu ergänzen sowie zur kooperativen Forschung innerhalb der Universität und mit Forschungsinstituten außerhalb der Universität beizutragen. Mit der Stelle ist die Leitung der Service-Labore für NMR-, MS- und Röntgenstrukturanalyse verbunden.

In der Lehre ist das Fach Analytische Chemie sowohl in der Bachelor- als auch in der Masterausbildung zu vertreten. Außerdem wird eine Beteiligung an der Ausbildung in einem der anderen klassischen Kernfächer der Chemie erwartet.

Bitte richten Sie Ihre Bewerbungen mit den üblichen Unterlagen bis zum 31. Mai 2008 unter Angabe der obigen Kennziffer an die

Universität Bremen

Dekan des Fachbereichs 2

Postfach 33 04 40

28334 Bremen