

Spektreninterpretation

Am Rande der letzten Fachgruppentagung (u.a. durch den Vortrag von W. Robien) und bei anderen Gelegenheiten wurde und wird in letzter Zeit vermehrt über Fehlinterpretationen von NMR-Daten in wissenschaftlichen Publikationen diskutiert.

Wer sich dafür interessiert und eventuell Beispiele für Lehrveranstaltungen benötigt, sei auf die Webseite von Herrn Robien unter

http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/csearchlite/NMR_misinterpretation.html

hingewiesen. Hier sind einige markante Beispiele beschrieben. Herr Robien freut sich sicher auch über weitere Hinweise, über die sie vielleicht stolpern oder von denen Sie wissen.

Für die Feiertage.....

1) Interview

Für all diejenigen, die es noch nicht gefunden haben: es gibt ein spannendes und unterhaltsames Interview mit Prof. R.R. Ernst in der Reihe „Interviews with Scientists“ des „Vega Science Trusts“ unter

<http://vega.org.uk/video/series/1>

2) für Musikfreunde....

<http://faculty.washington.edu/crowther/Misc/Songs/music.shtml>

was soll das in MARS ? Reinhören in



Hooray For NMR Spectroscopy!

oder

The Nucleus I Like Best

mit Texten, Noten und Slides :-)

(vielen Dank an U. Weber für den Tip)

3) ...Videofreunde...

eher ernsthafte Natur sind die ersten Beispiele, besonders für den Umgang mit MRI:

Oxygen Cylinder in MR Scan Room
(<http://de.youtube.com/watch?v=1EJ2notNLo0&feature=related>)

oder

Chair gets stuck in an MRI machine
(<http://de.youtube.com/watch?v=4uzJPpC4Wuk&feature=related>)

MRI Explosion

(<http://de.youtube.com/watch?v=1R7KsfosV-o&feature=related>)

es gibt noch eine Reihe weiterer Beispiele, z.B. Patientenbett.

Eher zum Schmunzeln:

das Funny Proton

<http://de.youtube.com/watch?v=AMaMR0oeAqQ>

oder gar

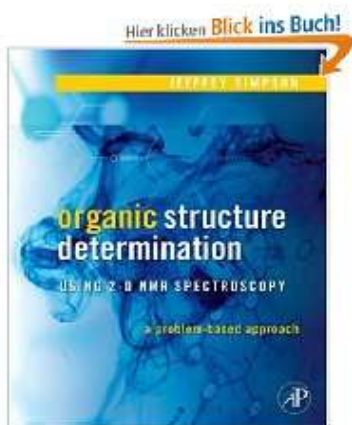
Every Proton of You

(http://de.youtube.com/watch?v=e6OL_uHKoh0)

oder eine Reminiszenz an EUROMAR 2006 in York

Spinning in the tube
(<http://de.youtube.com/watch?v=omRfCzLS1Ns>)

4) ...*Bücherfreunde*...



Es gibt eine neues Lehrbuch für etwa 50 – 60 €.

Als Instrumentation Facility Director des MIT hat der Autor offensichtlich viel Erfahrung im Umgang mit Walk-Up bzw. Open Access Organisationsformen und hat deshalb wohl ein Handbuch für eine entsprechende Nutzergruppe geschrieben. Der Schwerpunkt liegt ganz eindeutig auf der Sicht des theoretisch eher wenig interessierten Anwenders mit einer Fülle von praktischen Hinweisen, dafür aber nur mit einer Handvoll Pulssequenzen. Nach der üblichen, aber gut verständlich geschriebenen Einführung gibt es ein ganzes Kapitel (ca. 30 Seiten) über Experimental Considerations. Das umfasst z.B. Stichpunkte wie

- Sample Preparation
- Tube Selection
- Sample Purity
- Cleaning/Drying Tubes
- Optimal Solute Concentration

und einiges mehr.

Hier findet sich auch der interessante Hinweis (und eine der wenigen Formeln):

$$t = \frac{1}{\nu}$$

Es folgt ein Kapitel über Data Collection, Processing and Plotting mit sehr netten Abbildungen. Dieser Absatz dürfte auch sehr hilfreich für diejenigen sein, die ihre Daten zwar nicht selbst erzeugen, aber in elektronischer Form zur Weiterbearbeitung erhalten.

Es folgen Kapitel über Chemical Shifts, Symmetry and Topicity, Spin-Spin Couplings NOE und Dynamics.

Abgeschlossen wird das ganze durch zwei Kapitel zur Spektrenzuordnung mit Strategietips, unterteilt in Beispiele, bei denen die Substanz bekannt ist und das Spektrum interpretiert werden soll und Beispielen, bei denen nur die Spektren bekannt sind und daraus die Struktur abgeleitet werden soll.

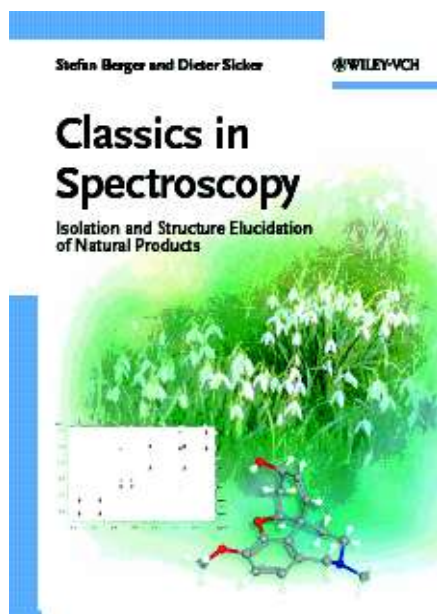
Untermuert wird das Ganze durch gut durchdachte und hervorragend aufbereitete, ungeschönte Übungsbeispiele zur Vertiefung im Selbststudium.

Alles in allem ein gelungenes Werk zu einem moderaten Preis, besonders für Studenten im etwas fortgeschrittenen Stadium z.B. zur Praktikumsbegleitung geeignet, aber auch begleitend zu Bachelor / Masterarbeiten sicher sehr hilfreich. Wer Experimente physikalisch verstehen will, wird eher enttäuscht werden und sollte eventuell zu dem kürzlich erschienenen Buch von Jacobsen oder den „Klassikern“ Keeler, Levitt o.ä. übergehen. Da wir in unserer Fachgruppen-Umfrage aber festgestellt haben, dass der Einfluss (und das Interesse am Verständnis für die Experimente) der NMR insbesondere in der Chemie eher zurückgedrängt wird, ist mit diesem Buch vielleicht die Möglichkeit gegeben, die Studierenden wenigstens zu einem vernünftigen Umgang mit einer (automatisierten) Black-Box Methode zu begeistern und die schlimmsten Fehlentwicklungen etwas unter Kontrolle zu bekommen.

4) ...*Bücherfreunde (II)*...

Wer das Gelernte an interessanten Molekülen anwenden und weiter vertiefen möchte, sollte sich einen weihnachtlichen

Buchgutschein für eine Neuerscheinung reservieren, die im ersten Quartal des neuen Jahres erscheinen soll. Unter dem Titel „Classics in Spectroscopy – Isolation and Structure of Natural Products“ setzt das Autorenteam Berger / Sicker ein sehr interessantes Konzept in eine spannende, informative aber gleichzeitig auch sehr unterhaltsame Lektüre um.



Unterteilt in sechs Substanzklassen werden dreissig Naturstoffe ausführlich beleuchtet. Dazu zählt neben der Beschreibung und photographischen Dokumentation der natürlichen Quellen auch etwas zur Geschichte und zum kulturellen sowie wirtschaftlichen Einfluss der Verbindungen. Aufgelockert wird das Ganze durch Gedichte und vielfältige Zitate in verschiedensten Sprachen (mit Übersetzung).

Zu jeder Verbindung werden die Isolation sowie die prinzipiellen Wirkmechanismen beschrieben. Die Verifizierung der Strukturen wird unter Zuhilfenahme verschiedener spektroskopischer Methoden und besonders auch NMR-Experimenten detailliert erläutert, so dass es eine Fülle hervorragender Beispiele für einschlägige Lehrveranstaltungen gibt.

Wer das Glück hatte ein Probekapitel zu lesen hat es sehr bedauert, nicht gleich das ganze Werk in Händen halten zu können.

Dieses Buch hat sicher für all diejenigen, die auch im Internetzeitalter gerne noch etwas Gedrucktes lesen, mit Sicherheit ein hohes Suchtpotential. 79€ (bzw. 139€ für die Hardcover-Version) sind sicher eine gute und bereichernde Investition.

Bitte um Material

Der Vorstand der Fachgruppe hat auf seiner letzten Sitzung in Regensburg einen Vorschlag aufgegriffen, zu dem wir um die Hilfe der Mitglieder bitten.

Es wurde angeregt, mit Unterstützung der GDCh-Graphikabteilung ein Fachgruppen-Poster zu erstellen, mit der die Fachgruppe bei Veranstaltungen auf sich aufmerksam machen kann und das nach einer gewissen Anlaufzeit eine Art Markenzeichen darstellen soll.

Wer sich künstlerisch / graphisch einbringen möchte, oder eine tolle Molekülgraphik + Spektrum, eine besonders schöne Vorlesungsfolie, eine bildlich aufbereitete Pulssequenz oder eingängige Beispiele von Alltagsproblemen (Bereich z.B. Medizin, Lebensmittel o.ä.) in ausreichender Auflösung für eine geeignete Vergrößerung hat und uns diese ohne Copyright-Probleme zur Verfügung stellen könnte / möchte, wendet sich bitte an erhard.haupt@uni-hamburg.de zwecks weiterer Kontaktaufnahme.

Als Anhaltspunkt können die Plakate bzw. Werbeanzeigen der GDCh zum Wissenschaftsforum oder anderen Veranstaltungen dienen.

Vielen Dank im Voraus für Ihre Unterstützung.