Protokoll des Arbeitstreffens G-NMR am Frauenchiemsee

G-NMR: DFG Network of German NMR Centers

Sprecher

Prof. Dr. Harald Schwalbe

Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie
N160 / 3.OG / Raum Nr. 314
Goethe-University Frankfurt am Main
Max-von-Laue-Str. 7
60438 Frankfurt am Main, Germany

Telefon +49 69 798 29130
Telefax +49 69 798 28515
E-Mail schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de

www.g-nmr.de/

Datum: 12. September 2013

Teilnehmer

Part. #	Name	Institut
A1	Harald Schwalbe Marco Betz Clemens Glaubitz Jakob Lopez Frank Löhr Jan Ferner	BMRZ, Frankfurt
A2/ C5	Michael Sattler Gerd Gemmecker Bernd Reif Sonja Dames Sam Asami	BNMRZ, München/ Helmholtz München
B1	Jochen Balbach	Univ. Halle
B5	Christina Thiele (FGMR) Volker Schmidts Reinhard Meusinger Karin Jungk	Univ. Darmstadt
B6	Paul Rösch	Univ. Bayreuth
B7/ C6	Philipp Neudecker	Univ. Düsseldort/ Helmholtz Jülich
B9	Christian Richter	Univ. Frankfurt
B11	Erhard Haupt Thomas Hackl	Univ. Hamburg
C7	Peter Schmieder	Leibniz Berlin (FMP)

D	Christian Griesinger	MPI Göttingen
E1	Gerhard Althoff Christian Steffen	BRUKER Biospin
	Des Weiteren:	
	Walter Bauer	Univ. Erlangen
	Sebastian Kemper	Univ. Berlin
	Andrea Porzel	IPB Halle
	Matthias Görlach Oliver Ohlenschläger	FLI Leibniz
	Wolfgang Baumann	Leibniz Rostock
	Stefan Kuhn	nmrshiftdb2
	Burkhard Luy Claudia Muhle-Goll	KIT

Tagesordnungspunkte

PLENUM

1. Betrieb und Wartung von NMR-Infrastrukturen
    - Beschluss über Nutzerordnung (12:30-13:00) (H. Schwalbe)
2. NMR-Workshops und Summer Schools (13:00-13:30) (B. Reif)

BREAK-OUT SESSIONS

3. Einheitliche Standard-Proben mit standard operation procedures (13:00-14:00)
    - Liquid-State NMR (F. Löhr, G. Gemmecker)
    - Solid-State NMR (B. Reif, C. Glaubitz)
4. IT-Netzwerk für Technologie-Transfer (14:00-15:00)
    - Datenspeicherung, Austausch Software / Pulssequenzen (S. Asami, J. Lopez, M. Betz)
    - Unterrichtsmaterialien, Lehrkonzepte (Richter, Gemmecker)

Protokoll

(1) Nutzerordnung (Protokollführer Marco Betz)

Zu Beginn der Plenumsdiskussion nimmt Prof. Bauer im Namen dreizehn weiterer Kollegen kritisch Stellung bezüglich der Nutzerordnung (siehe Anhang Nr. 1). Aus der sich anschließenden Diskussion werden exemplarisch Fragen und Antworten dargelegt.

F: Würde der gesamte Wortlaut der Entwürfe aus Frankfurt für jeden gelten?

- Nein, nur die Preisabsprache bzgl. der Stundensätze bzw. Tagessätze, die als Kompensation für die Nutzung der NMR-Geräte gedacht sind.
    - Kein Sachbearbeiter der DFG hätte die Zeit, sich jeder aufwendigen Einzelkalkulation eines Antragsstellers zu widmen.

- Jede Forschungseinrichtung, die einen DFG-Antrag stellt, würde verpflichtet werden, bei sich intern eine Nutzerordnung zu hinterlegen - diese ist nicht der DFG vorzulegen. Es gilt das Vertrauensprinzip.
- Die DFG möchte sichergestellt wissen, dass der Zugang zu NMR-Technologie fair und unabhängig von der Person des antragstellenden Nutzers gewährleistet wird.

F: Was ist die Definition von intern und externen Benutzern?

- Jede Institution kann in der Benutzerordnung selbst festlegen, welche Gruppe zu den internen/externen Benutzer zählt.

F: Kann es intern den Preis „Null“ geben?

- Ja, es bleibt jeder NMR-Einrichtung selbst überlassen, wieviel intern z.B. Institutskollegen oder Kollegen aus anderen Fachbereichen verrechnet wird.
    - Beispielsweise könnten alle Professoren eines OC-Instituts von einer Abgabe befreit sein, weil sie sich bei der Erstanschaffung des NMR-Geräts beteiligt hatten bzw. sich bei laufenden Unterhaltskosten beteiligen. Deren Kollegen aus der Anorganik könnten allerdings zu einer Kostenverrechnung verpflichtet sein.
    - Rabattierungen für Nachwuchsgruppen und Kollegen 'die in einem Loch stecken' sind möglich
- Die Preise müssen nur für alle verbindlich wie auch transparent ersichtlich sein.
- Die festzulegenden Preise der einzelnen NMR-Zentren werden nicht in einem koordinierten Verfahren bestimmt, jede Institution legt es lokal fest.

F: Ist es notwendig, dass eine Nutzerordnung vorzuliegen habe, wenn ein Institut einen DFG-Beschaffungsantrag für ein NMR-Gerät stellt?

- Die Nutzerordnung mit ihrer Preisabsprache ist als ein Anreiz seitens der DFG zu verstehen, vorhandene NMR-Geräte besser gemeinsam auszulasten nutzen als einen weiteren Beschaffungsantrag zu stellen. Die gemeinsame Nutzung von Geräten erfordert wiederum eine Nutzerordnung.
- Anmerkung: Es ist für die eingesetzten Gutachter oftmals sehr zeitaufwändig, die Gesamtausstattung des Fachbereichs eines Antragsstellers zu recherchieren. Etwaige Leistungsansprüche können in Einzelfällen nicht gerechtfertigt sein.

F: Führt die Einführung einer Preistabelle nicht dazu, dass Fördermittel ungleichmäßiger über die unterschiedlichen NMR-Einrichtungen verteilt wird?

- Dies hängt mit der Bereitschaft aller DFG-Antragsteller zusammen, die Kosten für NMR-Gerätenutzung in ihre Anträge einzutragen.
    - Die Budgets einer Service-Technologie sind kompetitiv mit den anderen Technologien und sie werden an dem Verhältnis aus den Summen innerhalb einer Kategorie für das Folgejahr errechnet. Man bezieht sich hierbei auf die DFG-Anträge, nicht auf die Bewilligungen.
    - Deshalb ist die Aufteilung der Budgets aller benannten Service-Technologien nicht konstant, aber es ist ratsam sich jetzt dieser Förderungsmöglichkeit anzuschließen, weil sonst Fördermittel an NMR ‚vorbeigehen‘. Langfristig wird sich ein konstantes Verhältnis zu den anderen Service-Technologien ergeben.

- Daher sollte jede NMR-Einrichtung frühzeitig ihre Instituts- bzw. Universitätskollegen über diese neue Möglichkeit informieren.
- Hinweis: Bei der Antragsstellung eines Projekts, werden die Mittel nicht alleine abgelehnt werden können, sondern wenn, dann wird der gesamte Antrag abgelehnt.

F: Was kommt bei der Abrechnung in den Verwendungsnachweis, etwa die Materialien?

- Die interne Umbuchung geht in den Verwendungsnachweis ein.
  - Anmerkung, Beispiel: Ein Projektleiter hat ein Budget für NMR Synthese-Kontrolle in seinem Antrag bewilligt bekommen. Die NMR-Service Abteilung stellt ihm gemäß der jeweiligen Nutzerordnung vereinbarten Preise eine Rechnung, die sich auf die gemessene Zahl der Proben bzw. der verwendeten Messzeit entspricht. Der Projektleiter begleicht die Rechnung von seinem Projekt-Konto, das für den bewilligten DFG-Antrag eingerichtet worden ist. Diese Umbuchung geht in den Verwendungsnachweis.
  - Anmerkung: Wie die NMR-Service Abteilung das erhaltene Geld ausgibt, bleibt ihnen überlassen, das geht nicht in den Verwendungs-nachweis ein.

F: Wie lange würde die vorliegende Preisstruktur gelten?

- Es ist davon auszugehen, dass nach ca. 2-3 Jahren die zu beschließende Preisstruktur seitens der DFG evaluiert werden würde. Danach ergebe sich eine neue Preisabsprache innerhalb der deutschen NMR-Einrichtungen.

Nach der Diskussion erfolgt die Abstimmung. Die Preisstruktur, wie sie im Arbeitstreffen in Frankfurt, 26.03.2013, erstmalig vorgestellt wurde und über den MARS Newsletter 46/2013 vom 21.05.13 zur Diskussion gestellt wurde, wird mit 30 Ja-Stimmen, einer Gegenstimme und zwei Enthaltungen beschlossen.

(2) NMR-Workshops und Summer Schools (Protokollführer Clemens Glaubitz)

Prof. Reif und Prof. Glaubitz präsentieren Ideen, um die Ausbildung in magnetischer Resonanz auf allen Ausbildungsstufen zu verbessern.

Im Rahmen von BSc/MSc Studiengängen wird magnetische Resonanz in Fächern wie Physikalische. Chemie, Biophysik, Organische Chemie, analytischer Chemie etc. sowie in vielen Praktika vermittelt. Da diese Ausbildung sehr viele Facetten hat und für die Studierenden oftmals eine hohe Einstiegsbarriere besteht, wird ein Austausch über Lehrkonzepte und Lehrerfahrungen angeregt. Dies soll zunächst über einen Ein-Tages-Workshop „*Teaching Magnetic Resonance*“ geschehen. Jeder Teilnehmer ist eingeladen Konzepte, Praktika-Experimente oder allgemeine Erfahrungen darzustellen. Die Veranstaltung wird in Frankfurt wahrscheinlich im November 2013 stattfinden. Eine Einladung wird durch Clemens Glaubitz gesondert versandt.

Prof. Reif berichtet über Überlegungen eine nationale NMR Summer School für Doktoranden zu etablieren. Die Motivation hierfür ergibt sich insbesondere aus den Bedürfnissen der FK-NMR, aber das Konzept kann geöffnet werden. Es gibt bereits sehr gut etablierte Schulen für Lösungs-NMR (EMBO Summer School) oder auch für Festkörper-NMR. Letztere ist sehr theoretisch ausgerichtet und bietet sich eher für

fortgeschrittene Doktoranden an. Es gibt also einen Bedarf, neuen Doktoranden ein vereinheitlichtes Ausbildungskonzept anzubieten. Eine Möglichkeut wäre das Programm in mehrere Blöcke aufzuteilen. Am Anfang sollten theoretische Grundlagen vermittelt werden, danach würden grundlegende FK-NMR Experimente erläutert, die für alle Anwendungsbereiche wichtig sind (MAS, R2, R3, CP, Recoupling, REDOR, C/R, FSLG, DNP etc.). Zusätzlich wird es „hands-on sessions" mit SIMPSON geben, die durch Demonstrationen am Spektrometer unterstützt werden. Abgerundet wird der Kurs durch eine Einführung in wichtige Software (NMRpripe, Sparky, CCPN, XPLORE-CNS, CYANA). Bei Bedarf könnte der Kurs durch Parallelsessions auch auf Lösungs-NMR erweitert werden. Der zeitliche Umfang wäre bei 1-2 Wochen, was noch konkretisiert werden muss.

Als mögliche Termine wurden September / Oktober 2014 genannt.

Bernd Reif und Clemens Glaubitz werden ein genaueres Konzept erarbeiten, Kollegen ansprechen, die sich evtl. beteiligen möchten sowie Ort und Zeitpunkt konkretisieren.

(3.) Einheitliche Standard-Proben mit standard operation procedures -

Liquid-State NMR (Protokollführer Christian Richter und Frank Löhr)

Frank Löhr und Gerd Gemmecker stellen die Proben und Parameter für die Hochauflösenden NMR vor. (Anhang XX Powerpoint Präsentation)

Ziel ist es, dass jedes der beteiligten Institute die vorgeschlagenen Tests in regelmäßigen Abständen durchführt und die Ergebnisse auf dem G-NMR Intranet zur Verfügung stellt. Die Tests diene dazu Fehler an der Hardware festzustellen. Darüber hinaus können die NMR-Gruppen die *performance* ihrer Hardware untereinander vergleichen. Die Tests und Parameter wurden kurz vorgestellt. Die Folien sollen zeitnah als Anhang im MARS Newsletter versendet werden.

Für Routine Spektrometer sollten die Standardproben von Bruker verwendet werden. Für Bio-NMR Spektrometer sollen Ubiqutin Proben angeschafft werden. Momentan wurden von verschiedene Firmen Angebote eingeholt beim nächsten Treffen wird darüber entschieden wie viele Proben gekauft werden.

Burkhard Luy hat vorgeschlagen noch zu definieren welche Probe, Parameter und Eichkurve für die Temperaturkalibrierung verwendet werden soll. Darüber hinaus schlägt er vor, DOSY und 13C-HSQC an einer Probe mit natürlicher Häufigkeit in die Testexperimente aufzunehmen. Das DOSY dient dazu die Gradienten zu testen. Hierzu müssen Probe und Parameter noch definiert werden. Hierzu wird C. Richter Bruker befragen. Das HSQC wird an Routinespektrometer angewendet in organischem Lösemittel. Probe: Bruker Standard 50mM Cyclosporin in C6D6 und Bruker Standard HSQC (aus ATP). Es wurde auch Strychnin als Testprobe vorgeschlagen, die ist aber nicht Langzeitstabil.

Solid-State NMR (Protokollführer Clemens Glaubitz)

Als Ergebnis der letzten Diskussionsrunde am 26.3.2013 in Frankfurt wurden konkrete Standards für FK-NMR besprochen. Es herrschte Konsens, dass für Bio-FK-NMR kleine Peptide in kristalliner Form ideal sind. Es wurden folgende Vereinbarungen getroffen:

Es werden Angebote für die Herstellung von $U^{13}C$-$U^{15}N$-fMLF eingeholt. Dieser Standard ist im Moment nicht kommerziell verfügbar, aber aufgrund bestehender Erfahrungen ideal geeignet zum Aufsetzen und Testen komplexerer Experimente.

Weiterhin soll ein N-Ac-Val-Leu-OH beschafft werden, welches über verschiedene selektive Markierungen verfügt, mit denen an einer Probe Shimming, magischer Winkel, Entkopplung sowie NCC-Experimente überprüft und aufgesetzt werden können.

Details zur Verfügbarkeit und zu den Kosten für beide Standards werden den G-NMR Partnern mitgeteilt.

(4.) IT-Netzwerk für Technologie-Transfer

Datenspeicherung, Austausch Software / Pulssequenzen (Protokoll-Führer Marco Betz)

Sam Asami erläutert, dass der Austausch von elektronischen Dokumenten über das Web-Content-Management-System „Wiki“ auf der G-NMR homepage ermöglicht ist:

- http://wiki.g-nmr.de/
    - Das Benutzer- und Rechtemanagement muss allerdings noch angepasst werden
    - Alle User-Accounts müssen noch eingerichtet und an alle Personen des G-NMR Verteilers werden.

Jakob Lopez stellt das Web-basierte Daten-Management-System „LOGS“ vor.

- Es erfüllt die zentralen Anforderungen der „Guten wissenschaftlichen Praxis“, wie sie die DFG an die Wissenschaftsgemeinde stellt.
    - Rohdaten der wissenschaftlichen Forschung, hier NMR-Rohdaten, werden von ihrer Aufnahme mit individuellen Projekten, Forschern bzw. Forschungsleitern bis hin zur ihrer Publikation (z.B. Doktorarbeit bzw. Journal) verknüpft.
- Als einzige Voraussetzung benötigt der Wissenschaftler einen Web-Browser.
- Die NMR-Rohdaten wie auch Auswertungen werden auf einen Server eines Cloud-Speicherdienstes gesichert.
    - Der Datentransfer wie auch der Zugriff ist durch Verschlüsselung gesichert.
    - Nachträgliche Manipulation kann durch Mitführung eines Hash-Keys, der beim erstmaligen Hochladen generiert wird, festgestellt werden.

Die Teilnehmer diskutieren den Funktionsumfang des vorgestellten Systems. Besonders im Bereich der Routine-NMR sollte die Funktionalität angepasst werden. Es wird beschlossen, dass die Arbeitsgruppe „IT-Aspekte“ sich noch vor Ablauf des Jahres für einen Tag (Mittags beginnen, am nächsten Mittags beenden) trifft, um das vorliegende Konzept für die entsprechenden Anforderungen innerhalb G-NMRs anzupassen.

Unterrichtsmaterialien, Lehrkonzepte (Protokollführer Christian)

Es wird im November ein G-NMR Teaching Day geben, an dem jedes Institut sein Lehrkonzepte vorstellt und man sich auf eine einheitliche NMR Ausbildung in Deutschland einigt.

Im Rahmen von G-NMR sollen auch Unterrichtsmaterialien via Intranet ausgetauscht werden. Hier muss sichergestellt werden, dass Lösungen nicht zu Studenten weitergeben werden. Details werden ebenfalls bei dem Workshop besprochen werden.

Nächste Aufgaben

1. Bitte Doodle-Umfrage benützen für das Treffen der Arbeitsgruppe „IT-Aspekte“ - **http://doodle.com/yqxp7eyyss4sg2us**
2. Bitte Doodle-Umfrage benützen für den G-NMR „Teaching Day“ der Arbeitsgruppe „Lehrkonzepte“ in Frankfurt - **http://doodle.com/z7tgkrf8icat2g5b**
3. Wolfgang Bermel zu einem 1-tägigen Treffen „Standard Pulsprogramme + ~Libraries“ einladen
4. Doodle-Umfrage für den 2-wöchigen Workshop „Advanced NMR Methods“ im 3./4. Quartal 2014
    - Organisation starten
    - Mögliche Sprecher kontaktieren

Anhänge

1. Stellungnahme Wolfgang Bauer und Kollegen

Brief_Thiele_final_11 0913_03.pdf

2. Folien zur Agenda bzw. zur Diskussion Nutzerordnung

2013-09-12 G-NMR Meeting Frauenchiem

3. Folien des Vortrags: Workshops Biological NMR spectroscopy

2013-09-12 Biological NMR Workshops.pdf

4. Folien des Vortrags: Experimente und Standards für Lösungs-NMR

2013-09-12 G-NMR - Experimente_und_Sta