

# **G-NMR Network**

15.09.2016 Düsseldorf

# **Agenda**

- (1) DFG-Verlängerungsantrag (Sam Asami)
  - Kurzer Stand der bisherigen Laufzeit
  - Zukünftige Ziele
- (2) G-NMR School
  - Feedback G-NMR School 2016 (Christian Richter)
  - eLearning (Jan Ferner)
  - G-NMR School 2017? Format? (Gerd Gemmecker)
- (3) Status Arbeitsgruppen
  - Spektrometer Maintenance (Christian Richter)
  - Pulssequenzen (Sam Asami)
  - Festkörper (Johanna Baldus)
  - Small Molecules (Johannes Liermann)
- (4) NUS Workshop (Sam Asami)



## DFG Verlängerungsantrag für G-NMR

• Gestellt: 04/2015

• Bewilligt: 12/2015

 Zeitraum: 10/2015 – 10/2018 (Finanzierung für 2 Jahre)

- Was passiert nach 10/2018?
  - Gültig über G-NMR hinaus:
    - DFG-Nutzungskosten
    - G-NMR Schule (Details im Anschluss)



Sam Asami

# **Kernpunkte (umgesetzt / in Arbeit)**

Working group / Coordinator(s)	Meetings	Activities		
Regulations (details see 2.1)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee	Establishment of a cost-model to apply for research-related DFG funds with guidelines for Bylaws of	DFG	
J. Janssen (DFG) J. Graf (Heidelberg) H. Schwalbe (JWG-Uni) M. Sattler (TUM)	02.10.2014 Berlin	good practice in managing NMR facilities (user access, measurement time, book-keeping) Implementation at the DFG (link)	Dre	
IT aspects (details see 2.2, 2.3)	20.09.2012 Halle an der Saale 28.10.2013 Frankfurt am Main 02.10.2014 Berlin	Various challenges common to all NMR facilities, such as measurement time allocation,		
M. Betz (JWG-Uni) S. Asami (TUM) R. Haessner (TUM)		spectrometer monitoring and quality control were discussed, and possibilities of informatics support	G	
		to automate and improve the workflow.  A G-NMR website was	(	
		implemented as a communication and information platform, incl. an internal website for data-exchange.		
Solid-state NMR (details see 2.4)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee	Aims at lowering the access barrier to solid-state NMR by offering a solid-state NMR introduction in the	Festkör	
J.Becker-Baldus (JWG- Uni) C. Glaubitz (JWG-Uni)	02.10.2014 Berlin	G-NMR School and by establishing standard operating procedures to create a knowledge base on routine	in	
B. Reif (TUM)		hardware handling.  Also, a MAS probe benchmark was agreed on and already carried out in 6 research groups.	Benchm Grup	

G-NMR Webseite ✓

www.g-nmr.de

G-NMR Intranet

wiki.g-nmr.de

Festkörper NMR Einführung in G-NMR Schule





## Kernpunkte (umgesetzt / in Arbeit)

Teaching program (details see 2.5, 2.8)  C. Richter (JWG-Uni) C. Glaubitz (JWG-Uni) J. Ferner (JWG-Uni) G. Gemmecker (TUM) B. Reif (TUM)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee 21.11.2013 Frankfurt am Main 02.10.2014 Berlin 13.1015.10.2014 München	Teaching activities at various universities were reviewed. Recommendations were formulated regarding the level and format of NMR spectroscopy as part of the Bachelor education. These recommendations are included in the recommendation of the GDCh for the Bachelor Curriculum in Chemistry. A G-NMR Teaching School was initiated, to cover all aspects of biomolecular NMR spectroscopy. The 1st G-NMR School took place 13,-15,10,2014 in Munich.	Vorschlag für Chemie-Curriculum bzgl. NMR- Ausbildung  G-NMR Schule (jährlich etabliert seit 2014)
Solution-state NMR (details see 2.3, 2.6) W. Bermel (Bruker) F. Löhr (JWG-Uni) G. Gemmecker (TUM) M. Sattler (TUM) S. Asami (TUM)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee 15.01.2014 München 02.10.2014 Berlin	The working group discussed the efficient implementation and exchange of pulse sequences. A dedicated pulse sequence website was provided and linked on the G-NMR website.	Austausch über Implementierung von Pulssequenz-Datenbank Webseite für Austausch von Pulssequenzen wiki.g-nmr.de/pp
Industrial contacts (details see 2.7)  D. Mathieu (Bruker) H. Schwalbe (JWG-Uni) M. Sattler (TUM)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee 15.01.2014 München 02.10.2014 Berlin	Representatives of spectrometer manufacturers, pharmaceutical and biotech companies participated in discussions at the general assemblies and were strongly involved in working groups on liquid and solid state NMR pulse sequences, informatics and teaching aspects.	Industriekontakte

Sam Asami

### Ziele in der Verlängerungsphase: **G-NMR Schule**

#### 3.2.1. G-NMR School

**Details im Anschluss** 

- The G-NMR School will take place once a year in fall and alternatingly hosted by German NMR Centers (Munich, Frankfurt, Göttingen, Berlin). The next G-NMR school will be organized at BMRZ in Frankfurt.
- The NMR school will last 5 full days. In the first 3 days the fundamentals are conveyed. This is followed by 2 days where advanced topics are covered in parallel sessions. Advanced topics contain:
  - Protein and RNA NMR (organizers: Prof. Schwalbe, Prof. Sattler) 0
  - Small molecules (organizer: Prof. Ruth Gschwind
  - Inorganic chemistry (organizer: Prof. Dr. Schmedt auf der Günne)
  - Polymers (organizer: Prof. Dr. Kay Saalwächter)
  - Industrial applications (organizer: Dr. Wolfgang Jahnke)
- The first G-NMR School was financially supported by G-NMR. As the School must be selfsustaining in the future, we have to collect conference fees. In the questionnaire, the PI participants agreed that 200€ would be an acceptable registration fee to cover expenses for coffee breaks, conference dinner etc. Further, most speakers have volunteered to participate without traveling expenses being reimbursed.
- In order to improve the efficiency in teaching and being able to address a larger audience, we will implement e-Learning. In particular, we will record videos during the next G-NMR school on basic themes which will allow students to immerse into the topic after the G-NMR school or to prepare for an advanced course in the future.

Videos für e-Learning aufgenommen bei G-NMR Schule in Frankfurt 2016





## Ziele in der Verlängerungsphase: Lehre

#### 3.2.2.1. Teaching Curricula

The workshop 'teaching magnetic resonance' received significant interest from the community. Especially staff scientists, senior teaching staff and professors expressed and demand in such meetings, due to the specific challenges encountered in this area of education, as it can be approached from the chemistry, biochemistry or physics point of view. It is planned to organize further workshops with these specific aims:

- NMR on the computer: E-learning and teaching software, virtual experiments
- NMR on the spectrometer: Teaching hardware, exchange experience with practical NMR
- Teaching magnetic resonance at the M.Sc. level: We have assessed the training in NMR at the BSc level during the last funding period. The situation at the M.Sc. level seems much more heterogeneous due to many different, specialized Master's degree courses. We expect that a large variety of magnetic resonance training courses are offered at this level. Our aim is to create a catalogue of specialized magnetic resonance courses taught at German universities, which can help students to select the most appropriate Master's degree courses and to foster teaching collaborations between universities if students decide to switch or wish to study one term at another university.
- Teaching magnetic resonance in chemistry related bachelor degrees: Based on the recommendations for teaching of magnetic resonance in the Bachelor of Chemistry course of study, we will provide recommendations for related degrees (Biochemistry, Biophysics, Bioinformatics)









Sam Asami

# Ziele in der Verlängerungsphase: **Pulssequenzbibliothek**

#### 3.2.2.2. Pulse sequences

**Details im Anschluss** 

During the first funding period of G-NMR, the implementation and use of pulse sequences in research facilities and spectrometer manufacturers were reviewed to evaluate the challenges and potential solutions. The best elements and implementation will be included for developing a G-NMR pulse sequence library and a user-friendly setup tool will be provided. This pulse sequence database will be compiled in collaboration with expert scientists from academia and industry and can be the foundation for standardizing experiments and knowledge transfer. A dedicated website for collecting G-NMR pulse sequences was created and will be extended in the next funding period. Along these lines, uniformly <sup>15</sup>N and <sup>13</sup>C isotopically enriched ubiquitin standard samples were purchased and will be distributed among the G-NMR facilities to perform benchmark experiments (see Appendix, Supplement 4) and to validate pulse sequences in a standardized way. The results will be collected and made accessible on the G-NMR website, thereby allowing each facility to compare the performance of in-house probes to a pool of other tested probes. This allows to localize error sources in instruments and maintain a high quality standard among G-NMR facilities

G-NMR will further develop the in-house pulse sequence library and in collaboration with spectrometer providers and international colleagues (such as B. Brutscher) establish a comprehensive pulse sequence library that will be made available to G-NMR users and beyond.

In parallel to these activities, researchers will be encouraged to approach the NMR instrument manufacturers to implement their newly developed pulse sequences into the standard pulse sequence library provided by manufacturers. The companies will be approached by G-NMR to make a collaboration commitment.







# **G-NMR School**

9

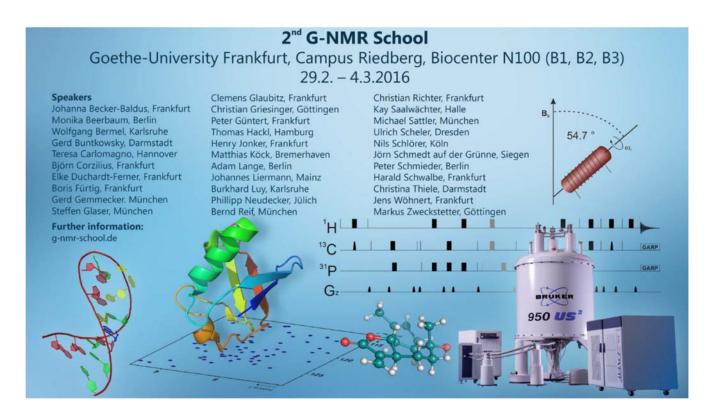
### 1<sup>st</sup> G-NMR School @ Bayerisches NMR-Zentrum (BNMRZ) München, 13-15 Oct 2014

- Program: 3 full days, focus on biomolecular NMR (including solution- and solid-state NMR methods)
- 120 participants: 96 students, 20 speakers

Next school: 29.02.-04.03.16 in Frankfurt/M. (5 full days)

- 3 days basics in NMR methodology
- 2 days with parallel sessions on small molecules, polymers, materials, biomolecular NMR







Christian Richter

### 2nd G-NMR School

- Programm
  - Montag bis Mittwoch: Allgemein NMR für Alle
  - Donnerstag & Freitag: Parallel Sessions
    - BioNMR
    - NMR an kleinen Molekülen
    - Festkörper NMR
  - Mehr Informationen unter: g-nmr-school.de
- 123 Teilnehmer
  - aus 55 Gruppen
  - 56 BioNMR
  - 36 NMR an kleinen Molekülen
  - 31 Festkörper NMR



## 2nd G-NMR School: 29.02. bis 04.03.2016





Christian Richter

# **G-NMR School: UniReport 3-2016 vom 03. Juni 2016**

## Bundesweite Ausbildung in NMR-Spektroskopie am BMRZ

150 Studierende trafen sich in Frankfurt, um in NMR-Spektroskopie für ihre Master- und Doktorarbeit ausgebildet zu werden.

findet diese einwöchige Schule im Rahmen des DFG-geförderten deutschen NMRum verschiedenste Aspekte der Durchführung von NMR-Experimenten gegenseitig zu optimieren zum 4. März) war in einem herstellen. 3+2-Format organisiert: In den Um die ersten drei Tagen wurden die physikalischen Grundlagen der NMR- Verfügung

schung, vertieft beschäftigen wollen. Der Workshop wurde von einem

n Frankfurt koordiniert, Simone Kobylka. Die Vorlesungen wurden von den besten NMR-Spektroskopikern in Deutschland gehalten, insgesamt waren mehr Nettwerks (G-NMR) statt, in dem als zwanzig verschiedene Dozenten 30 Gruppen an universitären und außeruniversitären Institutionen anwesend, um den Studierenden sich zusammengeschlossen haben, Rede und Antwort zu stehen. Weiterhin konnten die Studieren-den direkt am Spektrometer Experimente durchführen, angeleitet von und die Ausbildung der Studierenden und Doktoranden voranzutreiben. Der Workshop (29. Februar bis Firmen, die NMR-Spektrometer

Um die Vorlesungen auch ande-ren Studierenden elektronisch zur Verfügung zu stellen, wurden sie Spektroskopie in Lösung und im mit Hilfe von studiumdigitale Festkörper in Vorlesungen und Übungen erarbeitet. In den letzten der Goethe-Universität Frankfurt) beiden Tagen konnten sich die Teil- aufgenommen. Die Mitschnitte wernehmer aussuchen, mit welchem der vielen Anwendungsfelder der Nutzung von EVASYS wurde jede NMR-Spektroskopie (kleine Mole- der Vorlesung einzeln evaluiert, küle, Biomakromoleküle, Polymere, nichtlösliche Biomoleküle) sie sich, auch im Hinblick auf die eigene For-Teilnehmern von deutschen Universitäten konnten auch Studierenden aus Polen, Frankreich und Frankfurter Team organisiert, ins- der Tschechischen Republik bebesondere von Dr. Christian Rich-ter, Prof. Clemens Glaubitz und gut bewirten zu können, wurden

wir großzügig durch die Freunde und Förderer der Goethe-Universi-tät unterstützt. Dafür bedanken wir uns ganz herzlich! Mit diesem Workshop ist ein Format gefunden worden, um eine sehr gute NMR-Ausbildung in der Doktorandenzeit

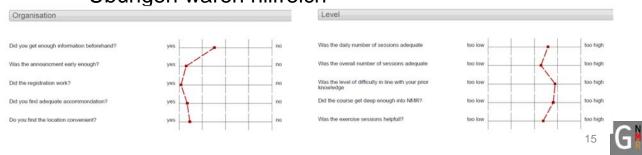
durchzuführen. Eine solche Ausbildung ist nur universitätsüber-greifend zu leisten, um den Bedarf an Expertenausbildung auf hohem Niveau wirklich gewährleisten zu





# 2nd G-NMR School: Feedback

- Online Evaluation:
  - 50 Teilnehmer, davon 90% Doktoranden
- G-NMR Schule allgemein:
  - Vorinformation: nur mittelmäßig,
  - Anzahl der Vorträge waren O.K.
  - Niveau der Vorträge war eher zu hoch
  - Übungen waren hilfreich



Christian Richter

# 2nd G-NMR School: Feedback Kommentare

- Allgemein NMR, ersten 3 Tage
  - Erwartungen an die Schule: → Sehr Unterschiedlich:
    - Einige wollten nur NMR-Grundlagen hören, die nicht an der eigenen Universität vermittelt werden
    - Andere wollten mehr Einblick in die NMR-Theorie haben, z.B. Relaxation
    - Praktische Umsetzung der NMR-Experimente
  - Ergebnis:
    - Starke Streuung der Ergebnisse → illustriert die Heterogenität der Teilnehmer
    - Viele Teilnehmer waren mit Themenauswahl und Umsetzung der Vortragenden sehr zufrieden
    - Für andere fehlte die Einführung in die mathematischen Grundlagen
    - · Oder es war zu viel NMR-Theorie
    - Vorlesungen waren zu lange
    - Mehr Übungen
- Parallel Session, Tag 4 & 5
  - Wurde durchweg positiv empfunden.
  - Mehr Plätze für die Übungen an den NMR-Spektrometern



# 2nd G-NMR School: Verbesserungsvorschläge

- Vorlesungen max. 1 Stunde + 5 min. Pause
- Mehr Einführung in jedes Thema
- Mehr Applikationen in den Vorträgen
- Mehr Übungen
- Mehr praktischen Kurse oder mehr Teilnehmer
- In der Anmeldung die Wissenseinteilung optimieren
- Einführungsvorlesung bevor die NMR-Schule startet → Online möglich?



Gerd Gemmecker

# G-NMR School: Berlin, 2017

- lokale Organisation:
- FMP Berlin (Hartmut Oschkinat)
- Ort:
   Max Delbrück Centrum, Berlin-Buch
- Termin: geplant für September 2017 (voraussichtlich 18.-22.09.2017 = 1 Woche vor FGMR)
- Format:5 Tage, mit Übungen / prakt. Teilen



# G-NMR School: eLearning

#### Aufbau

- Inhalt an der GDCh-Empfehlung angelehnt
- Besprechung im Seminar und Vorbereitung auf die n\u00e4chste Aufgabe
- Übungsblätter als PDF zum Download und Bearbeiten
- Offline-Aufgaben (1-2 pro Seminar) geben größeres und individuelleres Feedback, aber auch wesentlich größerer Aufwand

#### Erfahrungen (seit SoSe 2013)

- einfache Kontrolle der Ergebnisse (auch für große Studentenzahlen)
- einfache Analyse, wo die generellen Missverständnisse liegen
- Studenten bemerken den erhöhten Aufwand, loben aber die Verpflichtung zur Teilnahme

#### Ausblick

- Evaluation der Auswirkungen auf das weitere Studium (Umfrage geplant)
- Optimierung und Erweiterung des Aufgabenpools
- Austausch mit anderen Lehrenden und Plattformen



Christian Richter

# Status: AG "Spektrometer Maintenance"

- <sup>13</sup>C,<sup>15</sup>N markierte Ubiquitin Proben wurden gekauft und auf Anfrage an die Institute verteilt: Frankfurt, München, Berlin, Jena, Bayreuth, Darmstadt, Heidelberg (+ Bruker)
- Erstes Treffen der AG, 13.09.2016, FGMR Düsseldorf
  - Protokoll online
  - Zusammen mit Bruker: Implementierung von Skripten zur automatischen Durchführung des Sucrose-Tests unter optimalen Bedingungen
  - Alle vorgeschlagenen Experimente werden als Parametersätze für jede Feldstärke verteilt
  - Prüfen ob S/N-Werte in den vorgeschlagenen 2D Experimenten zuverlässige Daten geben

#### Outlook

- Skripte und Experimente werden via Email ausgetauscht
- Kleine Moleküle: Experimente und Testprobe definieren
- Nächstes Treffen FGMR-Tagung 2017 in Bayreuth



# Status: AG "Pulssequenzen"

- Bisherige Treffen: 03/2013 (Frankfurt), 01/2014 (München)
- Tool für vereinfachtes Setup von Lösungs-NMR Experimenten etabliert und in Verwendung am BNMRZ seit 2014
- Etablierung in weiteren Gruppen (NIH NCI)
- Austausch und Zusammenschluss mit weiteren Experten-Gruppen (B. Brutscher, Bruker)
- Treffen der AG "Pulssequenzen" geplant für Anfang 2017 im Rahmen des NUS Workshops

G

Johanna Baldus

# Status: AG "Festkörper-NMR"

- To lower the access barrier to solid state NMR a setup procedure has been suggested (see presentation at the meeting in Darmstadt, 10.09.2015)
- A protocol for comparing the sensitivity of probes in different labs has been established
  - (see <a href="http://www.g-nmr.de/dokumente/festkoerper-nmr.html">http://www.g-nmr.de/dokumente/festkoerper-nmr.html</a>)
  - 5 labs acquired data on 23 probes, the data is confidential but made accessible to the participating labs
  - We welcome and encourage other labs to join this effort



# **NUS Workshop**

- Geplant für Februar/März/April 2017
- Dauer: ~1.5 Tage
- Ort: TU München
- Inhalt: Hands-on Workshop über theoretische und experimentelle Aspekte von "non-uniform sampling", sowie Prozessierung
- Geplante Sprecher:
  - Vladislav Orekhov (Swedish NMR Centre/Uni Göteborg)
  - Wiktor Kozminski (Uni Warschau)
  - Haribabu Arthanari (Harvard Medical School, Boston)
  - Daniel Nietlispach (University of Cambridge, UK)
  - Wolfgang Bermel (Bruker, Karlsruhe)
- Details werden noch bekanntgegebenTreffen der Arbeitsgruppe "Pulssequenzen" geplant im Anschluss des Workshops

GN

### Nächstes G-NMR Treffen

39. FGMR Meeting 25.-28.9.2017 Bayreuth

