

# Protokoll des G-NMR-Treffens anlässlich der Fachgruppentagung „Magnetische Resonanz“ 2016 in Düsseldorf, 15.09.2016



## Teilnehmer:

Gerhard Althoff-Ospelt, Bruker Biospin GmbH  
Sam Asami, BNMRZ / TU München & HMGU München  
Jochen Balbach, Univ. Halle  
Erica Brendler, TU Bergakademie Freiberg  
Jan Ferner, BMRZ / Univ. Frankfurt/Main  
Gerd Gemmecker, BNMRZ / TU München & HMGU München  
Thomas Hackl, Univ. Hamburg  
Tilo Lübken, TU Dresden  
Daniel Mathieu, Bruker Biospin GmbH  
Reinhard Meusinger, TU Darmstadt  
Philipp Neudecker, Univ. Düsseldorf / FZ Jülich  
Christian Richter, BMRZ / Univ. Frankfurt/Main  
Volker Schmidts, TU Darmstadt  
Raphael Stoll, Ruhr-Univ. Bochum

## Tagesordnung:

- (1) DFG-Verlängerungsantrag
  - Kurzer Stand der bisherigen Laufzeit
  - Zukünftige Ziele
- (2) G-NMR School
  - Feedback G-NMR School 2016
  - eLearning
  - G-NMR School 2017
- (3) Status Arbeitsgruppen
  - Spektrometer Maintenance
  - Pulssequenzen
  - Festkörper
  - Small Molecules
- (4) NUS Workshop

## Protokoll (weitere Details zu den einzelnen Punkten siehe Anhang):

Nach einer kurzen Begrüßung durch Christian Richter stellte zunächst Sam Asami in einer Zusammenfassung die erfolgreich abgeschlossenen bzw. noch laufenden Aktivitäten aus der ersten Förderperiode (2012 – 2015) vor. Das G-NMR-Projekt hat sich erfolgreich bei der DFG um eine zweite Förderperiode beworben, die allerdings nur für zwei weitere Jahre gewährt wurde, d.h. 2016 – 2018.

Ein Schwerpunkt wird die Fortsetzung der bisherigen zwei erfolgreichen G-NMR-Schulen sein. Christian Richter stellte die beiden bisher abgehaltenen G-NMR-Schulen von 2014 (München) und 2016 (Frankfurt) vor und präsentierte eine Zusammenfassung der Ergebnisse der Evaluierung durch die Teilnehmer der letzten G-NMR-Schule.

Der Kritikpunkt „zu unterschiedliches Vorwissen der Teilnehmer“ wurde im Plenum diskutiert, als mögliche Lösungen wurden vorgeschlagen a) parallele Kurse auf Anfänger- und Fortgeschrittenem-Niveau (führt allerdings auch zu höherem Organisationsaufwand und Bedarf an Räumen und Dozenten); b) eine klarere Ansage des von den Teilnehmern erwarteten Kenntnisstands, ggf. mit Leseempfehlungen als Vorbereitung für die Schule (Keeler-Skript etc.); c) eine bessere zeitliche Sortierung der eher theorielastigen und der mehr praktisch orientierten Veranstaltungen, um bei Teilnehmer mit geringeren theoretischen Vorkenntnissen eine Überforderung und Demotivierung gleich am Anfang zu vermeiden.

Diese und weitere Anregungen aus der Evaluierung werden bei der Planung der nächsten G-NMR-Schule bedacht werden, die im Herbst 2017 am Max-Delbrück-Centrum in Berlin-Buch stattfinden wird (voraussichtlicher Termin 18.-22.09.2017)

Jan Ferner stellte den Stand zum Thema eLearning vor; es wurde ein Modell mit NMR-Übungsmaterial entwickelt, das bereits im Einsatz ist und weiter evaluiert und optimiert werden soll.

Als nächstes berichtete Christian Richter vom Treffen der Arbeitsgruppe „Spektrometer Maintenance“, das in dieser Woche während der FGMR-Tagung stattgefunden hat. Von den Teilnehmern wurden bereits zahlreiche Erfahrungen mit der erarbeiteten Test-Suite und den gemeinsam beschafften Ubiquitin-Proben gemacht und diskutiert. Allerdings ist es schwierig die Daten quantitativ auszuwerten und übersichtlich zusammenzufassen und zu vergleichen, da eine einfache Signal-zu-Rausch-Bestimmung aus Reihen von 2D-Spektren zu wenig reproduzierbaren Werten führt. Es ist angedacht zu testen, inwieweit dieses Problem durch eine echte 2D-S/N-Bestimmung behoben werden kann. Von den beschafften 10 Ubiquitin-Proben ist noch eine letzte verfügbar (Jochen Balbach hat daran Interesse angemeldet).

Gemeinsam mit Daniel Mathieu soll ein automatisches Skript erstellt werden, daß z.B. verschiedene Testmessungen mit der Sucrose-Standardprobe vollautomatisch optimieren und ausführen kann, um den Arbeitsaufwand für den Operator zu reduzieren und somit die Hürde für eine regelmäßige Durchführung zu erniedrigen. Des weiteren wurde diskutiert, mit welcher Probe eines kleinen organischen Moleküls eine erweiterte Testsuite – analog zur Ubiquitinprobe – inkl. von anwendungsnahen 2D-Spektren sinnvoll wäre (Cyclosporin A oder Strychnin?).

Sam Asami referierte kurz den Stand der AG „Pulssequenzen“; zu diesem Punkt konnte Daniel Mathieu das neue BioTop-Modul in TopSpin vorführen (enthalten im gerade freigegebenen neuen Release Topspin3.5.pl6). Bisher sind dort ca. 100 2D- und 3D-Protein-Experimente enthalten (in der nächsten Version sollen Experimente für RNA dazukommen). BioTop bietet dem Nutzer flexible Möglichkeiten inkl. wahlweiser automatischer Optimierung verschiedener Parameter (Pulslängen, spektrale Breiten, Wasser-Offset); daraus resultiert dann ein extrem vereinfachtes experiment-Setup, in dem nur noch sehr wenige Parameter vom Nutzer zu definieren sind (Anzahl der scans / dummy scans, TDs, NUS ja/nein, NOE-Mischzeit etc.). Nutzer haben auch die Möglichkeit, mit wenig Aufwand eigene Pulssequenzen dort einzubeziehen. Die Präsentation wurde mit großem Interesse aufgenommen und diskutiert.

Aus der AG „Festkörper-NMR“ gab es nichts Neues zu berichten, die Ausarbeitung eines Satzes von Test-Experimenten ist noch in Entwicklung.

Der Punkt „Bericht der IG ‘Small Molecules’“ wurde einvernehmlich gestrichen, da ein Großteil der Anwesenden gerade an deren Treffen teilgenommen hatte.

Sam Asami berichtete anschließend über den geplanten NUS-Workshop, in dem von ausgewiesenen Experten auf diesem Feld ein umfassender Überblick über Theorie und Anwendung gegeben werden soll. Der ca. 1 ½ tägige Workshop soll in München im Frühjahr 2017 stattfinden (voraussichtlich Anfang April), die Dozenten wurden bereits angefragt und haben prinzipiell zugesagt. Weitere Details dazu werden rechtzeitig per Rundschreiben bekanntgegeben werden.

Im Rahmen dieses Workshops ist auch geplant, daß sich die AG „Pulssequenzen“ dort trifft und ihr weiteres Vorgehen plant.

Unter „Verschiedenes“ wurde auf die Pläne der IG „Small Molecules“ eingegangen, mit der Fa. Bruker in einen konstruktiven Dialog zum Thema Service, Wartungsverträge/-kosten etc. einzutreten. Es bestand Einigkeit, daß dieses Thema natürlich genauso für alle Mitglieder von G-NMR wichtig ist. G-NMR wird daher mit der IG „Small Molecules“ in Kontakt bleiben, um hier auch parallel aktiv zu werden.

Zuletzt wurde von mehreren Teilnehmer erwähnt und bestätigt, daß die von der DFG gemeinsam mit G-NMR festgelegten Kostenpauschalen für NMR-Messungen von vielen Fachgutachtern offensichtlich aus den vorgelegten Anträgen gestrichen werden (im Bereich des Fachkollegiums Organ. Chemie z.B. sei das praktisch regelmäßig der Fall). Prof. Schwalbe wird gebeten, für G-NMR zu diesem Thema bei der DFG vorstellig zu werden und um Aufklärung bzw. Abstellen dieser Praxis zu bitten, die der ja mit der DFG vereinbarten Pauschalregelung zuwiderläuft.

Das nächste Treffen der G-NMR-Mitglieder ist während der nächsten Fachgruppentagung in Bayreuth geplant (25.-28.9.2017).

(Gerd Gemmecker)