G-NMR: Establishing a Network of German NMR Centers

Projekt-Besprechung in Halle an der Saale
20. September 2012

www.g-nmr.de

DFG Gerätezentren

In vielen Wissenschaftszweigen spielt der Zugang zu anspruchsvollen Technologien eine bedeutende Rolle. Häufig kann dabei auch eine gemeinsame Nutzung von Ressourcen – etwa in Gerätezentren – eine effektive Auslastung und einen sinnvollen wissenschaftlichen Service bieten. Allerdings stößt die Etablierung von Zentren häufig auf Hürden, die mit den **erforderlichen finanziell und personell intensiven Strukturierungsprozessen** einhergehen. Gleichwohl kann die Einrichtung von **Gerätezentren bei entsprechenden Nutzungs- und Managementkonzepten** zu einer insgesamt verbesserten Forschungsinfrastruktur beitragen.

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) möchte diese Entwicklung aufgreifen und eine Förderlinie initiieren, um **die Etablierung von Gerätezentren und die gemeinsame, auch externe Nutzung dort angebotener/verfügbarer Technologien zu forcieren, die Professionalität des Betriebs zu fördern und somit Modelle für zeitgemäße Konzepte und Strukturen zu entwickeln. Diese Maßnahmen sollen auch genutzt werden, ein Datenportal aufzubauen, welches Auskunft über Nutzungsmöglichkeiten solcher Zentren für interessierte externe Wissenschaftler anbietet.**

Als zentrale Maßnahme dieser Förderlinie ist eine Ausschreibung zur modellhaften Unterstützung geeigneter Gerätezentren oder Netzwerke von nationaler oder internationaler Bedeutung vorgesehen. Ausgehend von einer wissenschaftlich soliden Basis und einer Bereitschaft der beantragenden Institution zur Übernahme in nachhaltige Strukturen sollen diese in der Entwicklung eines professionellen, wissenschaftsadäquaten Managements und einer fundierten Nutzerunterstützung gefördert werden – etwa durch die Anfinanzierung entsprechender Stellen, **die Finanzierung von Workshops, die Ausarbeitung von geeigneten Nutzerordnungen oder Jahresberichten usw.**

G NMR
www.g-nmr.de

DFG

Programm

1. Ziele des G-NMR Programms (H. Schwalbe, M. Sattler)

2. IT-Aspekte
   - 2.1. Intranets (M. Betz)
   - 2.2. Spektrometer-Monitoring (C. Richter, M. Hähnke)
   - 2.3. Datenspeicherung (J. Lopez)

3. DFG-Nutzungsordnungen (J. Janssen, H. Schwalbe)
   - 3.1. Vorstellung von Pauschalen in anderen Gebieten z.B. MRI und Light Microscopy

4. Großgeräte-Förderung (J. Janssen)

5. Lehrkonzepte (C. Richter, M. Sattler)

6. NMR Pulssequenzen (G. Gemmecker, M. Sattler)

www.g-nmr.de

1. Ziele des G-NMR Programms (H. Schwalbe, M. Sattler)

Technologie- bzw. Wissenstransfer und ‘Gute Laborpraxis’ innerhalb der deutschen NMR community

- **Erarbeitung gemeinsamer Konzepte zum Betrieb bzw. der Wartung von NMR-Infrastrukturen**
- **Austausch von Software und Pulssequenzen**
- **Einheitliche Standard-Proben mit *standard operation procedures* für biomolekulare NMR**
- **NMR Workshops oder *summer schools***
- **Austausch von Unterrichtsmaterialien und -konzepten**

www.g-nmr.de

Projektpartner

Group A: Core organizing partners	A1: BMRZ in Frankfurt, PI: H. Schwalbe, C. Glaubitz, V. Dötsch, P. Güntert, J. Wöhnert
	A2: Bavarian NMR Center (BNMRZ) , PI: M. Sattler, B. Reif, S. Glaser
Group B: German University NMR Centers	B1: Univ. Halle, PI: J. Balbach, K. Saalwächter
	B2: Univ. Regensburg, PI: R. Geschwind, H.R. Kalbitzer
	B3: Univ. Leipzig, PI: D. Huster
	B4: Univ. Lübeck, PI: T. Peters
	B5: Univ. Darmstadt, PI: M. Reggelin, C. Thiele
	B6: Univ. Bayreuth, PI: P. Rösch
	B7: Univ. Düsseldorf, PI: D. Willbold
Group C: NMR Service units at Universities	B8: Univ. Heidelberg: J. Graf
	B9: Univ. Frankfurt: C. Richter
	B10: Technische Univ. München: W. Eisenreich
	B11: Univ. Hamburg: T. Hackl

Projektpartner

Group D: German non- University Centers	C1: MPI Göttingen: C. Griesinger C2: AWI Bremerhaven: M. Köck C3: Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden: U. Scheler C4: Helmholtz-Zentrum Karlsruhe: A. Ulrich C5: Helmholtz-Zentrum München: M. Sattler C6: Helmholtz-Zentrum Jülich: D. Willbold
Group E: Industry	E1: NMR manufacturing Companies: Bruker, Agilent E2: NMR units at Industry: BASF, Bayer, Merck, Novartis, Sanofi
Group F: Fachgruppe Magnetische Resonanz der GDCH	F: Vorsitzender der Fachgruppe Magnetische Resonanz: Dr. E. Haupt
Group G: Funding bodies	G: DFG, MPG, Helmholtz, Leibniz

3. DFG-Nutzungsordnungen (J. Janssen, H. Schwalbe)

3.1. Vorstellung von Pauschalen in anderen Gebieten z.B. MRI und Light Microscopy

www.g-nmr.de

Nutzerordnung

In G-NMR soll erarbeitet werden:

- **Definition der Kosten von NMR-Messungen**
- **Nutzungsbedingungen von Geräten / Probenköpfen bezogen auf bestimmte Experimente**

Weitere, wichtige Fragestellungen:

- **Wie wird Messzeit beantragt, (begutachtet), abgerechnet?**
- **Die gute wissenschaftliche Praxis bei der Verwendung von NMR-Daten**
  - **Bei NMR-Service: Definition von (co~) authorship**
  - **Wem gehören die Daten ⇒ IPRs?**
  - **Datenzugang und ~Speicherung**

3. DFG-Nutzerordnungen (J. Janssen, H. Schwalbe)

3.1. Vorstellung von Nutzerordnung in anderen Gebieten z.B. MRI und Light Microscopy

Ausgangslage: Mitnutzungsregelung der DFG (Merkblatt für Sachbeihilfe):

Die DFG kann Betriebs- und Folgekosten für Großgeräte übernehmen, die durch **projektspezifischen Mehrbedarf** bedingt sind. Diese Kosten sollten möglichst pauschaliert sein. Es sollte eine Nutzerordnung vorgelegt werden. Abschreibungs- und Reinvestitionskosten für Neuanschaffungen (AfA-Kosten) können nicht, auch nicht anteilig, übernommen werden. Zusätzliches Personal kann in den pauschalen Mitnutzungskosten nur anteilig entsprechend der Notwendigkeit geltend gemacht werden, das Gerät über den Normalbetrieb hinaus für ein Forschungsprojekt in Betrieb zu halten. Der Grundbedarf des jeweiligen Großgerätes muss aus der Grundausstattung finanziert werden. Mehrverbrauch, der durch den Betrieb des Großgerätes für ein spezielles Forschungsprojekt entsteht, kann unter den pauschalen Kosten abrechenbar sein. Wartungskosten zur Aufrechterhaltung des Betriebs des Großgerätes sollten nicht in den pauschalen Mitteln enthalten sein.

DFG-Leitlinien für Nutzungsordnungen

- Die Nutzungsordnung ist für alle Nutzer verbindlich.
- Das Gerätezentrum ist im Internet oder Intranet der Uni erkennbar (incl. Kontaktperson).
- Sowohl technische als auch wissenschaftliche Ansprechpersonen sind benannt.
- Welche Leistungen bietet das Gerätezentrum an? Wer kommt als Nutzer in Frage?
- Inwieweit werden Nutzer vom Personal des Gerätezentrums betreut/unterstützt?
- Beschreibung der Nutzungszeitvergabe / Buchungssystem.
- Klare Regelungen, wie und von wem über die Vergabe von Nutzungszeit entschieden wird.
- Die Nutzungskosten können Nutzergruppen unterscheiden (interne / externe), aber innerhalb einer Gruppe einheitlich. Die „Preisliste“ sollte Teil der Nutzungsordnung sein (ggf. als Anhang).
- Wenn noch keine Pauschalen für die Nutzung bei der DFG festgelegt wurden, müssen die Nutzungskosten aufgeschlüsselt werden.
- Der verantwortliche Leitende des Nutzungsbetriebs muss die Nutzungsordnung unterschreiben.

Des Weiteren erscheint wünschenswert:

- Die Voraussetzungen / notwendige Vorbereitung für die Nutzung werden beschrieben.
- Verantwortlichkeiten (z.B. für Sicherheitsbestimmungen) werden definiert
- Die verfügbaren Geräte werden genannt/beschrieben.
- Datenverarbeitung und -weitergabe und mögliche Archivierung werden beschrieben.

Hinweise:

- Ein Gerätezentrum im obigen Sinn muss nicht zwingend eine bestimmte Größe oder Anzahl von Geräten beinhalten.
- Bei sehr teurer Gerätschaft ist auch vorstellbar, dass ein Teil der Nutzungszeit im Rahmen eines (zentralen) Service vergeben wird; nur dieser Anteil muss durch Nutzungsordnung geregelt sein.

http://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/programme/wgi/nutzungsordnungen_geraetezentren.pdf

3. DFG-Nutzerordnungen (J. Janssen, H. Schwalbe)

3.1. Pauschalierte Kosten in MRT, opt. Bildgebung

Community verständigt sich auf Kostensätze, DFG-Gremien verabschieden für DFG akzeptable Pauschalen

Pauschalen können nur Teile der Vollkosten beinhalten

Beispiele:
MRT: bis zu 150 €/h bis 3T; 375 €/h bei 7T; 150 €/h bei Tier-MRT

ALM: bis zu 15 €/h für Weitfeld-Mikroskope; 25€/h für LSM; 50€/h für besonders leistungsfähige Geräte; zusätzlich 25-50€/h für wissenschaftl./techn. Support möglich

http://www.dfg.de/formulare/55_04/55_04_de.pdf

3.1. Vorstellung von finanziellem Rahmen: Bsp.: 3T MRI

Die folgende Tabelle ist auf Basis einer Kernarbeitszeit (250 Tage a 8h) erstellt.

Betriebskosten	**Anfallende Kosten**	**Kosten DFG/BMBF... Projekt**		**Kosten für sonstige wiss. Projekte (4)**	**Kosten für Kooperationsprojekte mit industriellen Partnern (5)**
		MR	Andere		
Energie, Wasser, Verbrauchsmaterial, sonstiges	10 €/h = 20.000	-	-	10 €/h= 20.000,.	10 €/h= 20.000,.
Unterhaltskosten (Wartung, Reparaturen, Ersatz- und Verschleißteile, Prüfgebühren),	115.000	-	-	115.000	115.000
Verbrauchsmaterial (KM, Injektionsbesteck ...)	20.000			20.000	20.000
Wiss.Ang zum Betrieb	55.000			55.000	150.000
Forschungs-TA	45.000			45.000	90.000
Finanzierungskosten	-	-	-	-	400.000
Summe reine Geräte Nutzung **Zusätzliche Kosten**	245.000 =130,00 €/h	-	-	245.000 =130,00 €/h	795.000 = 400,00 €/h
Zusatzbeschaffungen zur up-to-date Haltung (Spezialspulen, Geräte Stimulation/ Überwachung, spezielle Aufnahme/ Auswertesoftware etc.)	180.000	180.000	180.000	180.000	180.000
Methodenentwickler	110.000	55.000	110.000*	110.000	300.000
Programmierer für Auswertesoftware	110.000	55.000	110.000*	110.000	300.000
Datenauswertung	90.000	-	90.000*	90.000	120.000
		-			
Summe Nutzung gesamt	735.000 370 €/h	290.000 150 €/h	490.000 250 €/h	735.000 370 €/h	1.695.000 850 €/h

www.g-nmr.de

4. Großgeräte-Förderung an Hochschulen in DE (J. Janssen)

	Forschungs-Großgeräte	Geräte in Forschungs-bauten	Großgeräte der Länder	Drittmittel (am Beispiel DFG Sachbeihilfe)
Ziel	Grundausstat-tung Forschung	Grundausstat-tung Forschung	Grundausstat-tung Forschung, Lehre, Kranken-versorgung	Projektförderung, keine Grundaus-stattung
Finanzierung	50% DFG 50% Land	50% Bund 50% Land	100% Land	100% DFG
Antragsteller	Hochschule	Hochschule	Hochschule	Wissenschaftler
Mindest-summen	200 T€ Unis 100 T€ FHs	200 T€ Unis 100 T€ FHs	200 T€ Unis 100 T€ FHs	keine
Volumen p.a.	170 Mio. €	30-50 Mio. €	150-200 Mio. €	10-15 Mio. €
Strategische Aspekte	Bottom-up	Bottom-up	Bottom-up	Ausschreibungen möglich
Bewilligung	~80-90%	~80-90%	~80-90%	~20-30%

G NMR
www.g-nmr.de

DFG

2. IT-Aspekte
    - 2.1. Intranets (M. Betz)
    - 2.2. Spektrometer-Monitoring (C. Richter, M. Hähnke)
    - 2.3. Datenspeicherung (J. Lopez)

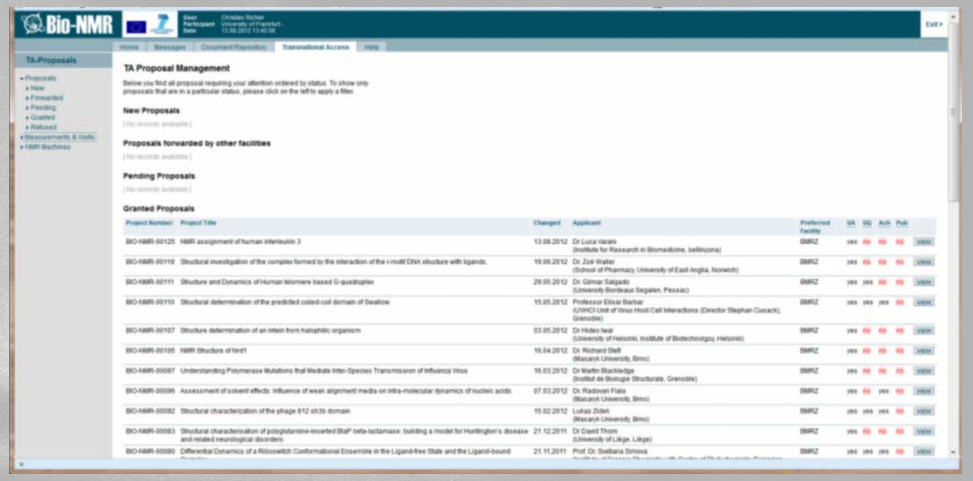
www.g-nmr.de

G-NMR IT Infrastruktur

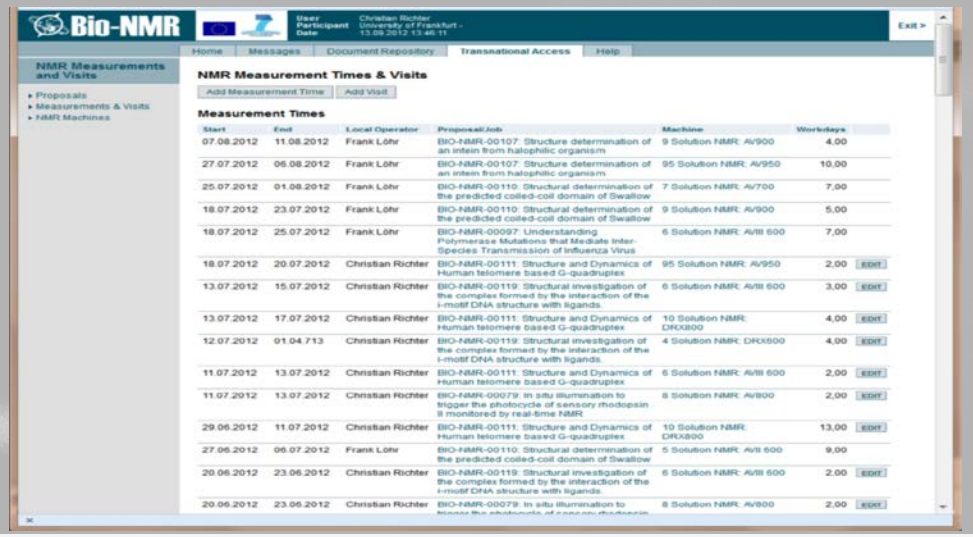
- **Messzeitverwaltung – (potentiell vom Antrag über Begutachtung) zur Messzeit-Vergabe**
- **Aufzeichnung, Verwaltung bzw. Zugang zu den NMR-Daten**
- ***Remote access***
- **IT Plattform zum Austausch von Unterrichtsmaterialien**

Beispiel Intranet aus Bio-NMR

- Projektdatenbank



- Messzeitverwaltung



Qualitätskontrolle der NMR Spektrometer

im Service und in Forschung

- Regelmäßige Durchführung und Dokumentation (z.B. halbjährlich)
- Gewährleistung gleichbleibender Gütefaktoren der Geräte

Proben:

- 0.3 - 3 % $CHCl_3$ in Acetone-d_6
- 0.1 % Ethylbenzene in $CDCl_3$
- ASTM (60 % C_6D_6 / 40 % p-Dioxane)
- 10 % Ethylbenzene in $CDCl_3$
- Sucrose
- [^{13}C;^{15}N]-Ubiquitin
- ([^{2}H;^{13}C;^{15}N]-MBP), optional

Qualitätskontrolle der NMR Spektrometer

Routine NMR-Spektrometer in der Automation

- Verwendung von Bruker Standard Tests
  - WS: Wasserunterdrückungstest an 2mM Succrose, Shim + ^{1}H-Puls
  - Lsrh: Lineshape mit Rotation, Shim
  - Lsnh: Lineshape ohne Rotation, Shim + Störungen
  - SNH: Protonempfindlichkeit
  - SNA: Kohlenstoffempfindlichkeit ohne Entkopplung
  - SNC: Kohlenstoffempfindlichkeit mit ^{1}H-Entkopplung
- Messungen unter Verwendung von IconNMR
- Auswertung und Dokumentation via **Python-Scripte**
- Beispiel, AV400:

```
2011-02-11   ws    WaterHump: 31.8/57.4 Resolution: 16%     S/N: 135.30:1 P1: 7.86us
2011-02-14   lsrh  Hump: 3.1/6.4 Resolution: 0.27
2011-02-12   lsnh  Hump: 4.9/10.6     Resolution: 0.54
2011-02-11   snh   S/N(2ppm): 563.3:1  S/N(200Hz): 602.7:1
2011-02-11   sna   S/N: 119.7:1  P1: 13.2us
2011-02-11   snc   S/N: 107.6:1  P1: 13.2us   PCPD2: 90us   Pl12: 17.7dB Pl13: 22.5dB
```

Protein Test-Experimente

Biologische NMR-Anwendungen

(1 mM [u-$^{13}C/^{15}N$] Ubiquitin in 50mM HEPES pH=7, 10% D_2O)

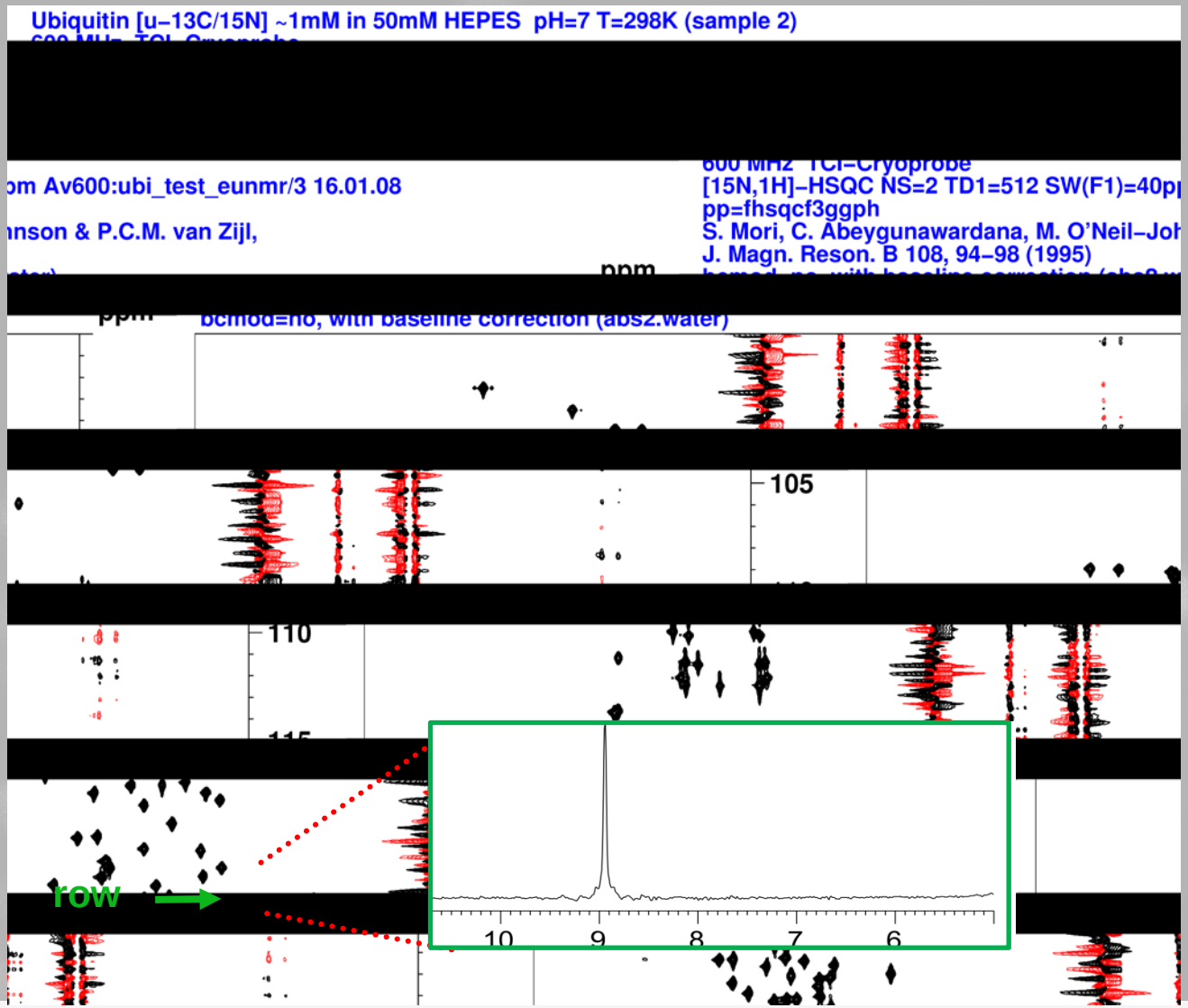
- 2D [^{15}N,^{1}H]–HSQC
- 2D [^{13}C,^{1}H]–HSQC
- 2D [^{13}C,^{1}H] plane of 3D HNCO
- 2D [^{1}H,^{1}H] plane of 3D NOESY–[^{13}C,^{1}H]–HSQC

  nur bei ≥ 700 MHz
- 2D [^{13}C,^{1}H] plane of 3D (H)CC(CO)NH-TOCSY

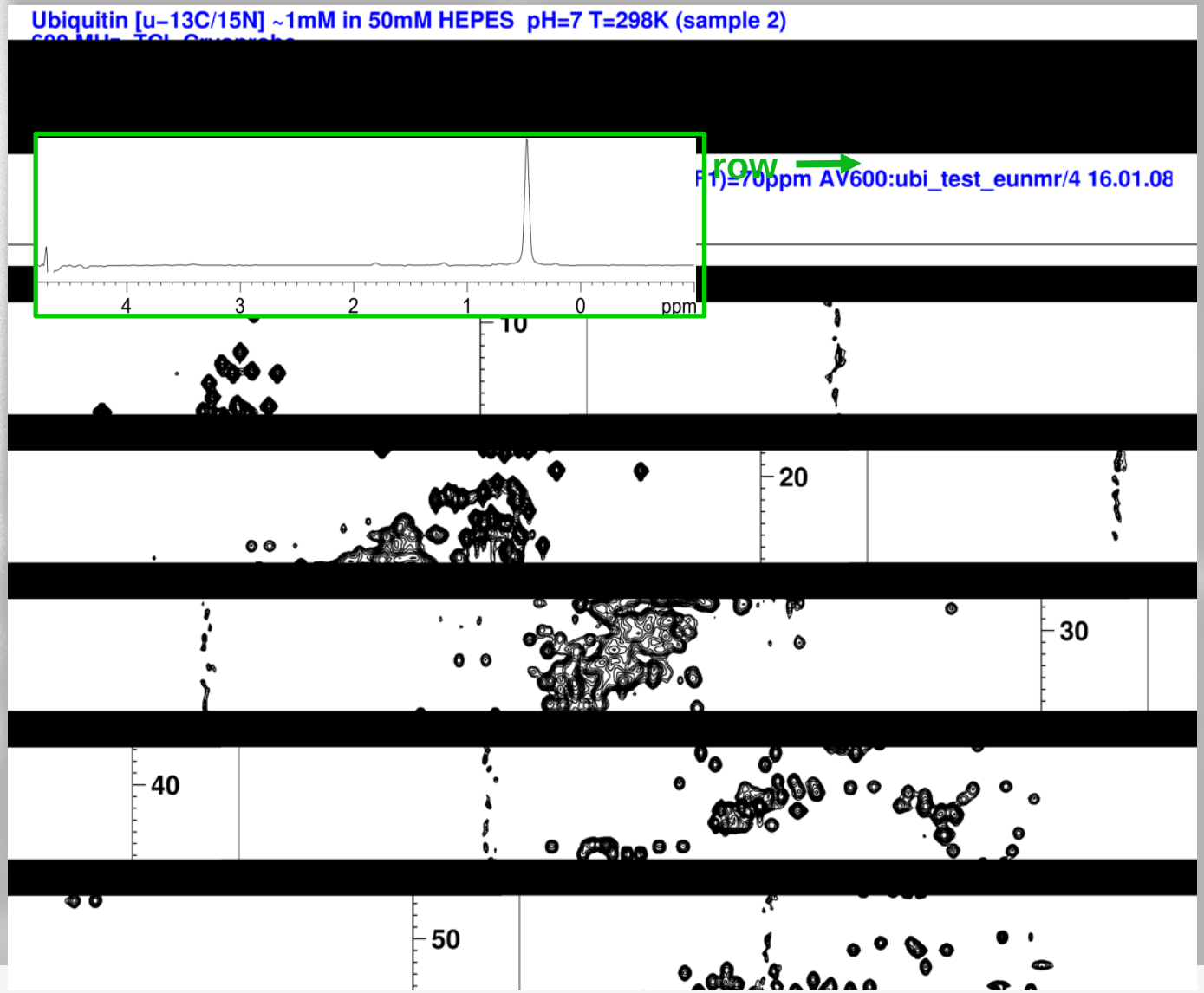
  nur bei ≤ 800MHz
- optional: 2D ^{13}C-detected CON

  nur für entsprechende Probenköpfe

[^{15}N,^{1}H]-FHSQC, Spektrum von Ubiquitin

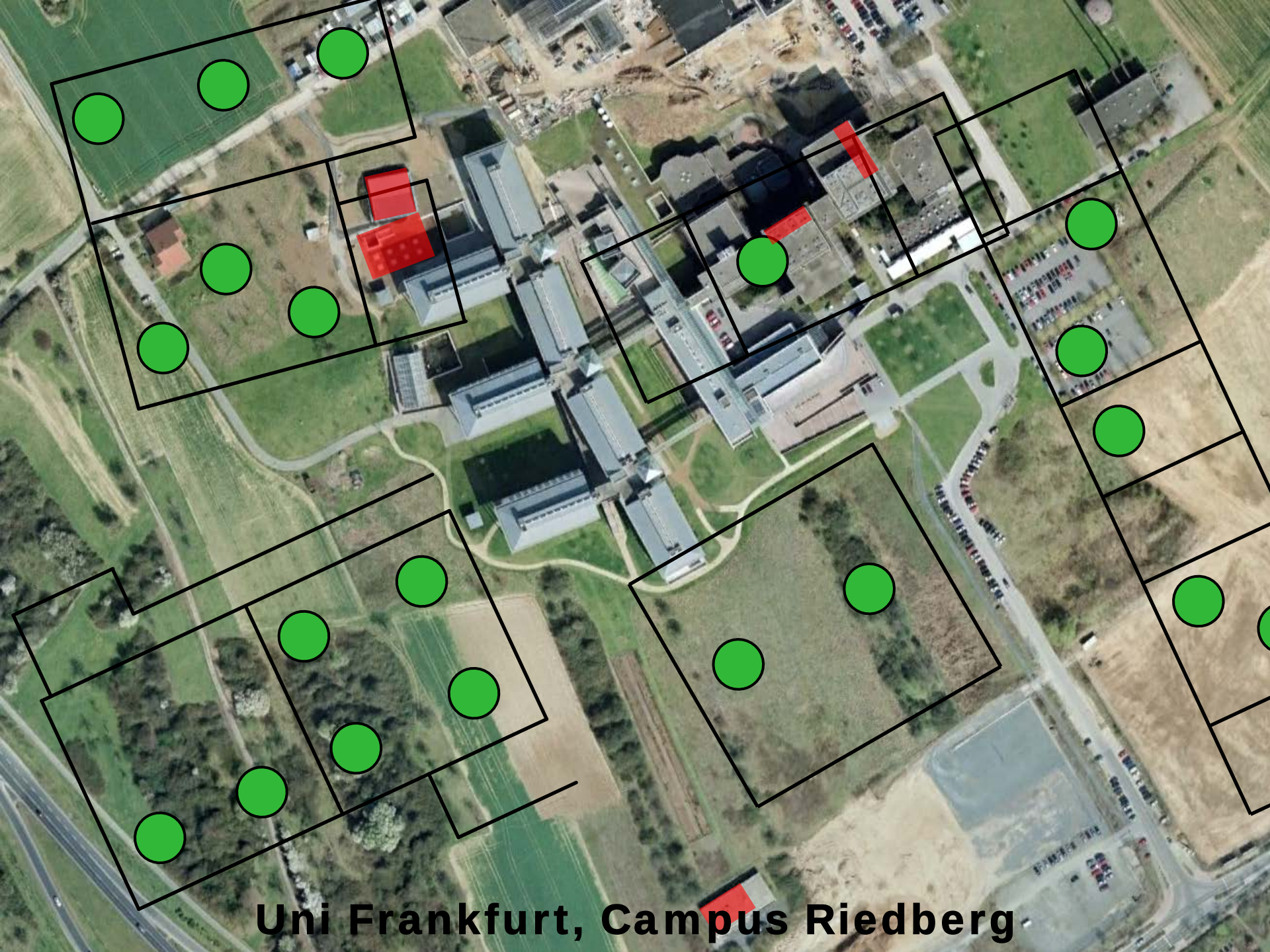


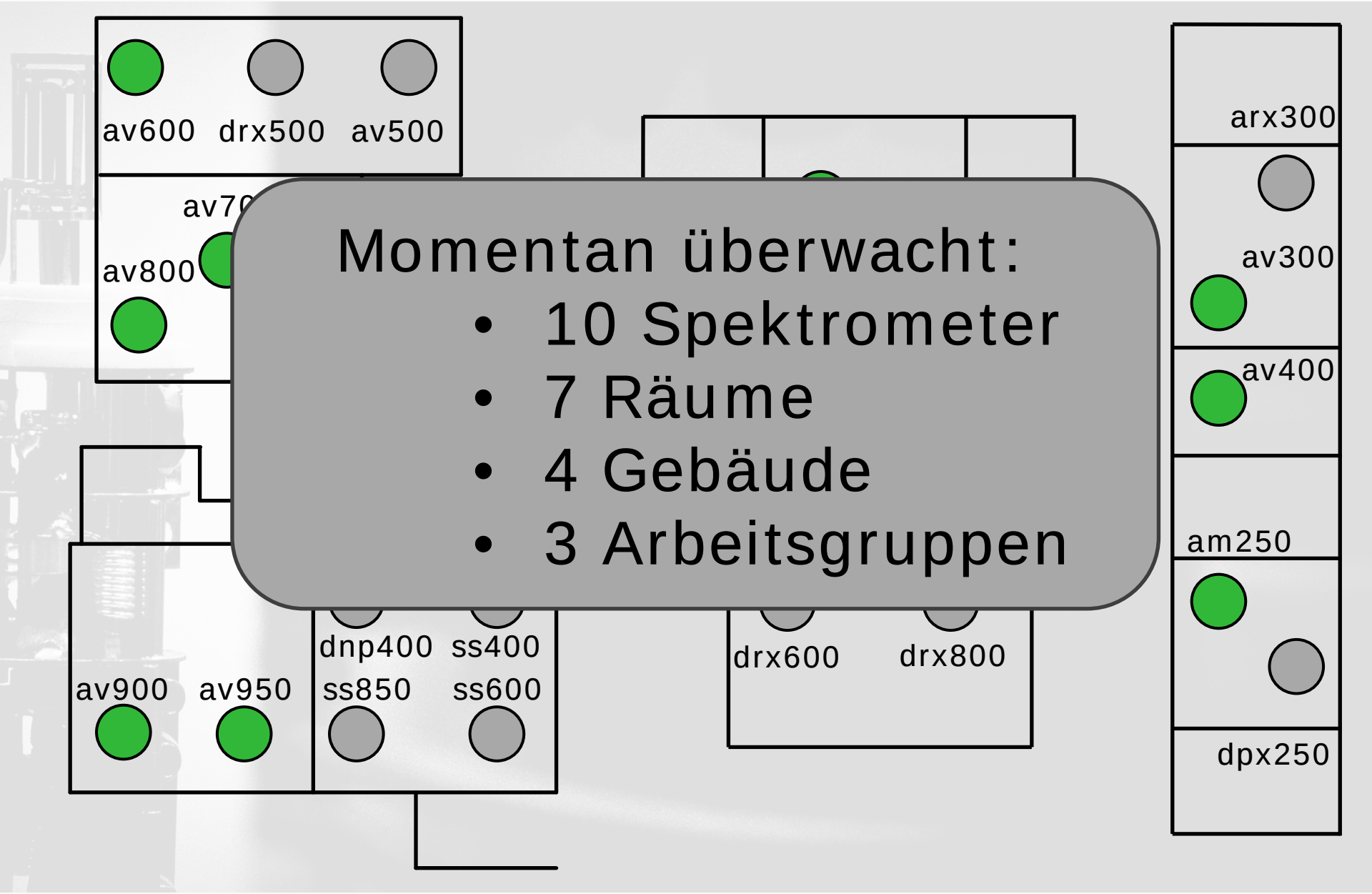
[^{13}C,^{1}H]-HSQC, Spektrum von Ubiquitin



2. IT-Aspekte
    - 2.1. Intranets (M. Betz)
    - 2.2. Spektrometer-Monitoring (C. Richter, M. Hähnke)
    - 2.3. Datenspeicherung (J. Lopez)

www.g-nmr.de


Uni Frankfurt, Campus Riedberg


av600
drx500
av500
av800
arx300
av300
av400
am250
dpx250
dnp400
ss400
ss850
ss600
av900
av950
drx600
drx800
Momentan überwacht:
• 10 Spektrometer
• 7 Räume
• 4 Gebäude
• 3 Arbeitsgruppen

Überwacht werden:

- Aktueller Akquisitionsstatus der Spektrometer
  Benutzer, Experiment, Beginn, Ende etc.

- Wartungsinformationen der Spektrometer
  Helium, Feld, Temperaturen, Diskspace etc.

- Infrastruktur
  Fileserver, Netzwerkzugriff, Temperaturen etc.

- Topspin-Lizenzen
  Anzahl, Ausnutzung

Aktueller Akquisitionsstatus der Spektrometer:

Schwalbe Group Spectrometer Acquisition Status

Server Room Status
Spectrometer Acquisition Status
Topspin License Status
Munin Server Monitoring Tool

	spectrometer	user scheduled *	measuring **	experiment	current experiment *** was started at	will be finished at	sample temperature	cryo status
	AV950	Bob	Bob	hsqct1etf3gpsi3d	13:37, Mi. 12.09.	08:04, Do. 13.09.	301,71	cold
	AV900	Alice	Alice	trhncocagp3d	11:34, Di. 11.09.	08:08, Fr. 14.09.	326,54	cold
	AV800	Eve	Eve	noesygpph	14:23, Mi. 12.09.	19:15, Mi. 12.09.	296,14	cold
	AV700	Kurt					300,71	cold
	AV600	Sam	Sam	zgpr	11:01, Mi. 12.09.	12:16, Mi. 12.09.	300,71	cold
	AV599	Dean	Dean	hncacbgpwg3d	11:01, Mi. 12.09.	17:23, Do. 13.09.	282,11	cold
	DRX600	Richard					n.a.	-
	AV400	schwalbe	hs	cosygpppqf	12:44, Mi. 12.09.	15:42, Mi. 12.09.	n.a.	-
	AV300		service	zgig30	12:55, Mi. 12.09.	13:37, Mi. 12.09.	n.a.	-
	AM250						n.a.	-

* scheduled for today, starting at 10:00
** users are identified by dataset location
*** only the currently running experiment is observed, experiments queued by multizg are not!

Palantir temperature monitoring device and server status indicators by Martin Hähnke, Fabian Hiller and Daniel Mathieu 2009 - 2012

Messzeitverteilung:

< previous week | home | next week >

Measurement time: 10.09.2012 - 16.09.2012

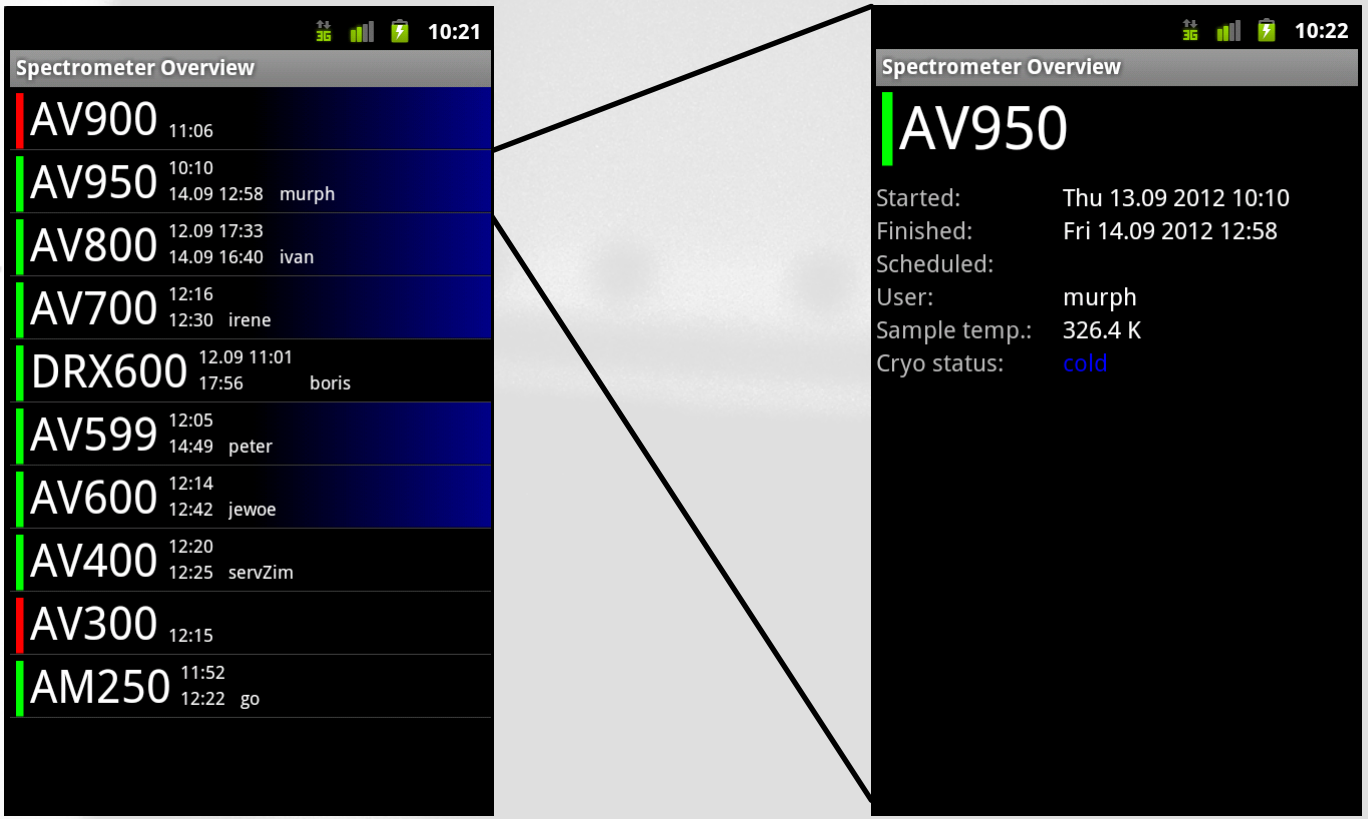
Alice	Bob	Eve	Kurt	Richard

	Monday	Tuesday	Wednesday	Thursday	Friday	Saturday	Sunday
AV401							
DRX600							
AV600							
AV599							
AV700							
AV800							
AV901							
AV950							
WW600							
WW800							

Trash

Save

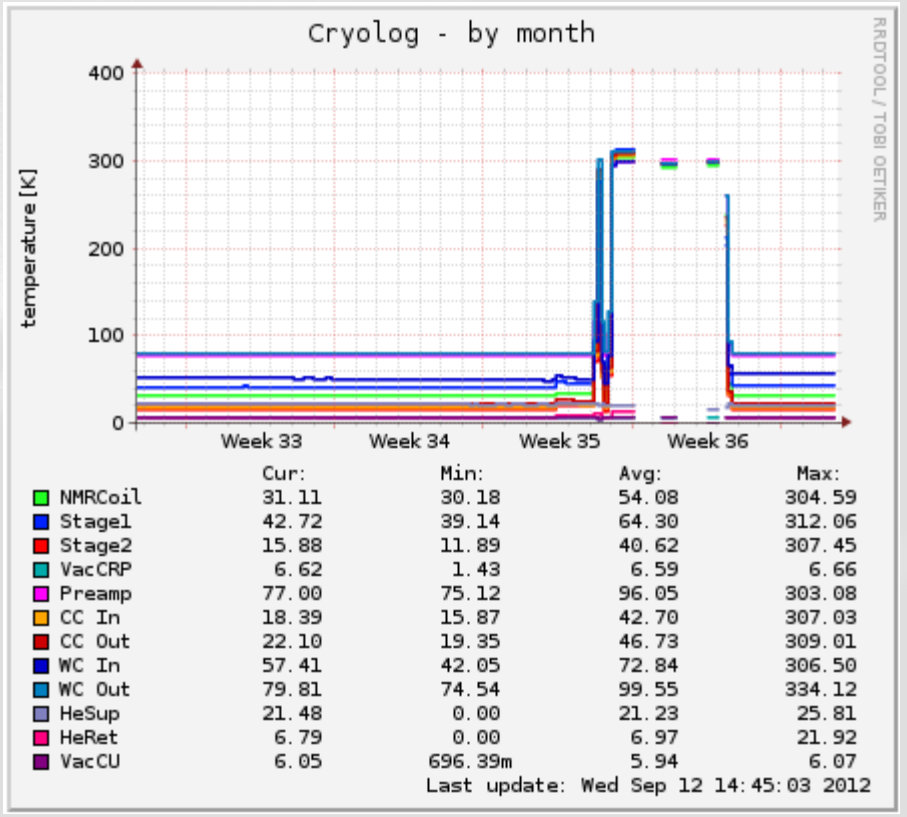
Aktueller Akquisitionsstatus der Spektrometer:



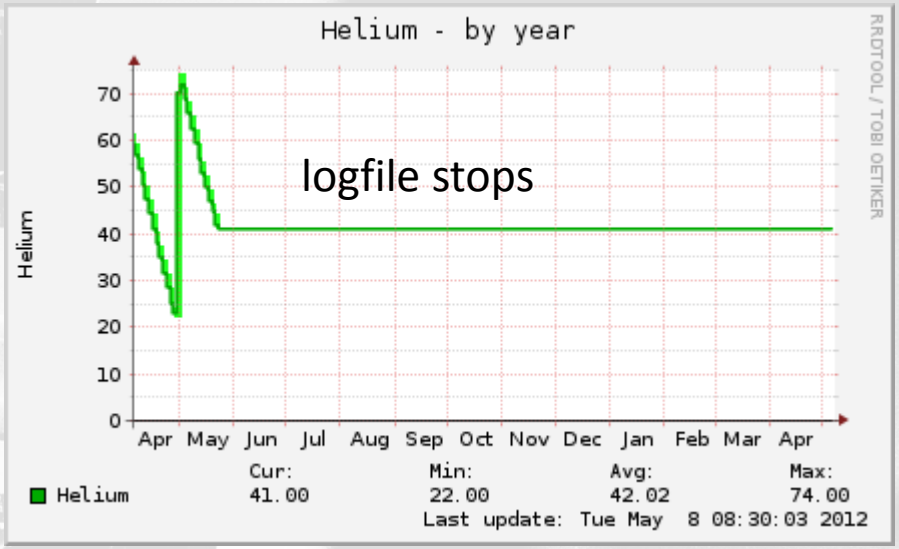
App für Android-Geräte

Wartungsinformationen:

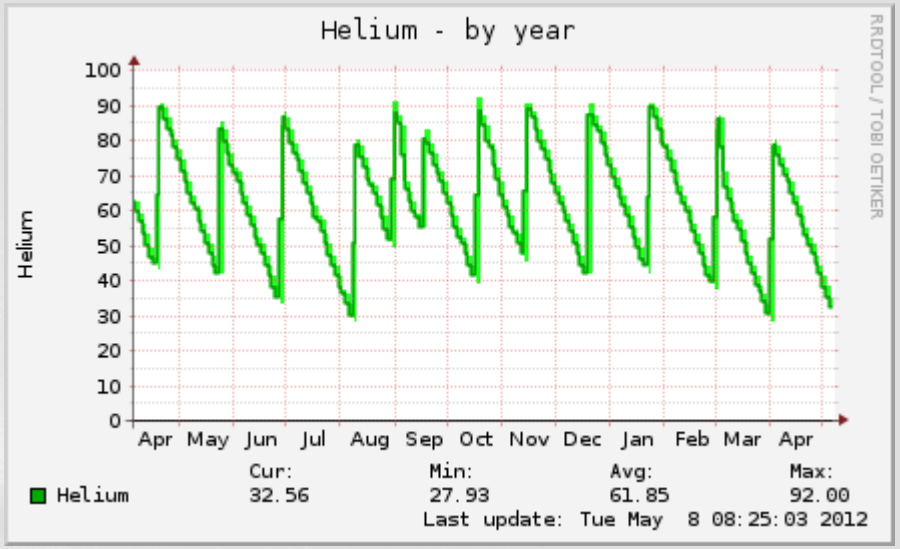
- Helium-Level
- B_0-Feld
- Probenkopf-Temperatur
- Festplattenbelegung
- Netzwerk-Traffic
- Akquisitionsstatus
- CPU-Auslastung
- Speicher-Auslastung
- Uptime



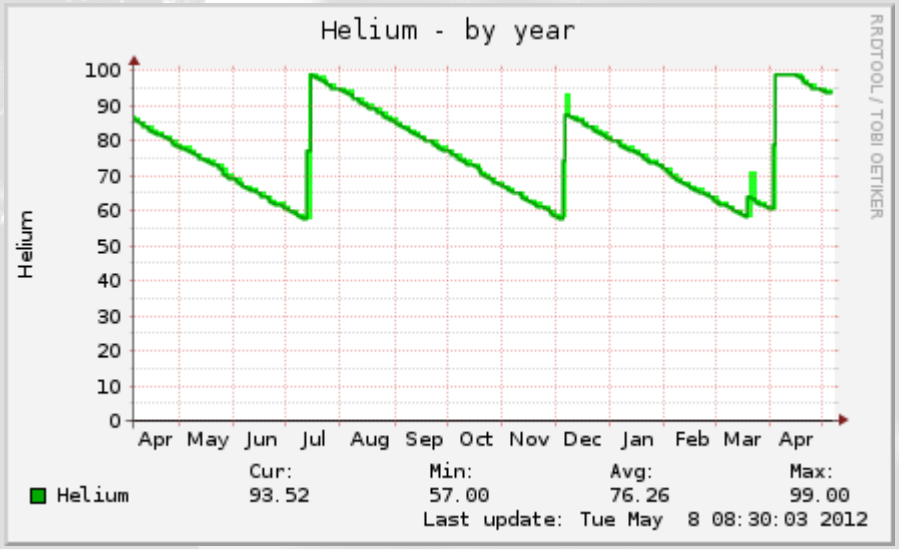
950 MHz Spektrometer, Magnet 2007



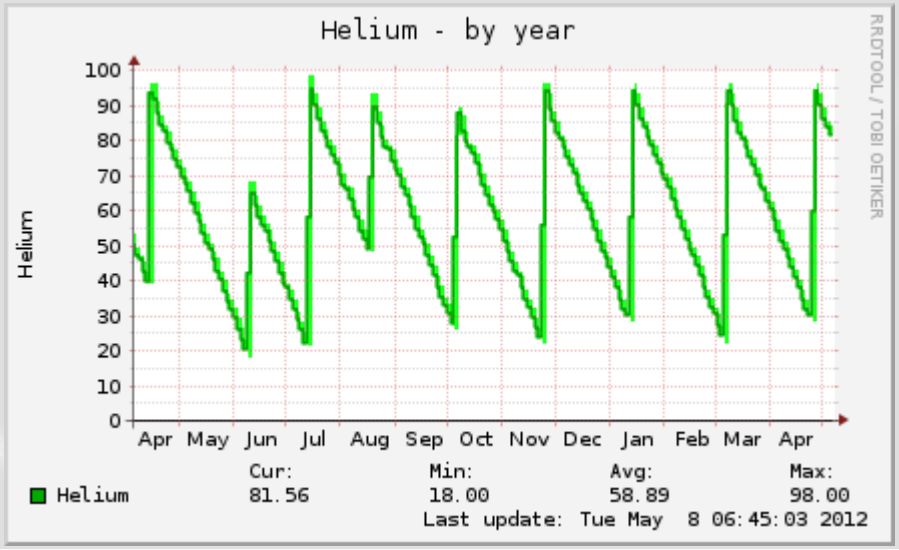
900 MHz Spektrometer, Magnet 2002



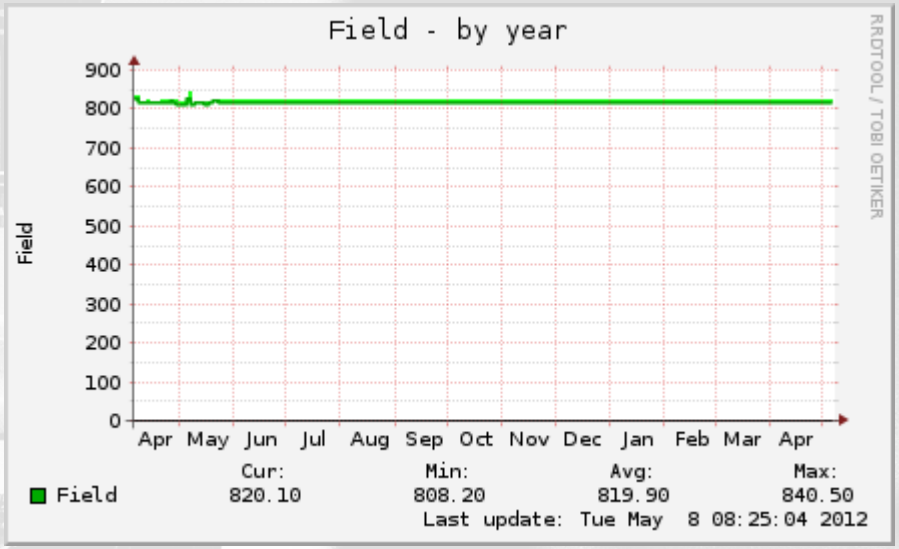
700 MHz Spektrometer, Magnet 2001



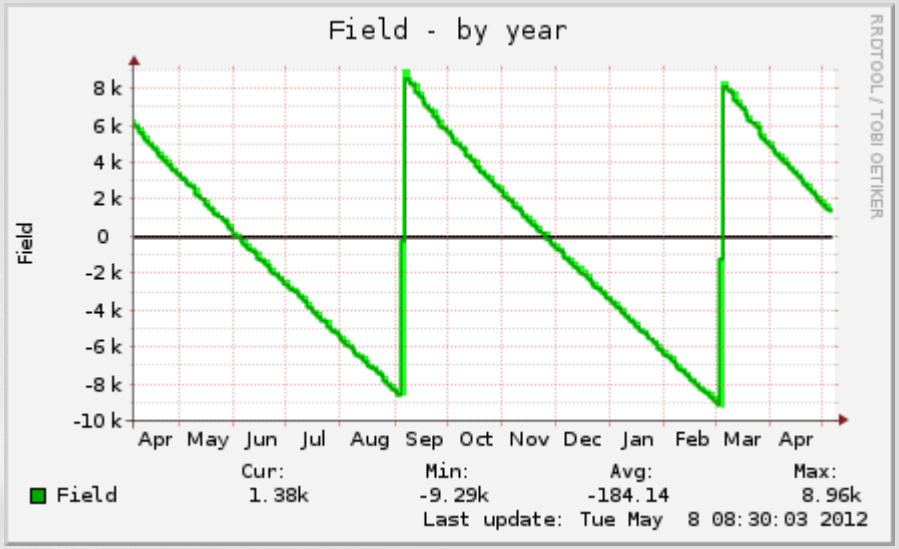
800 MHz Spektrometer, Magnet 1995



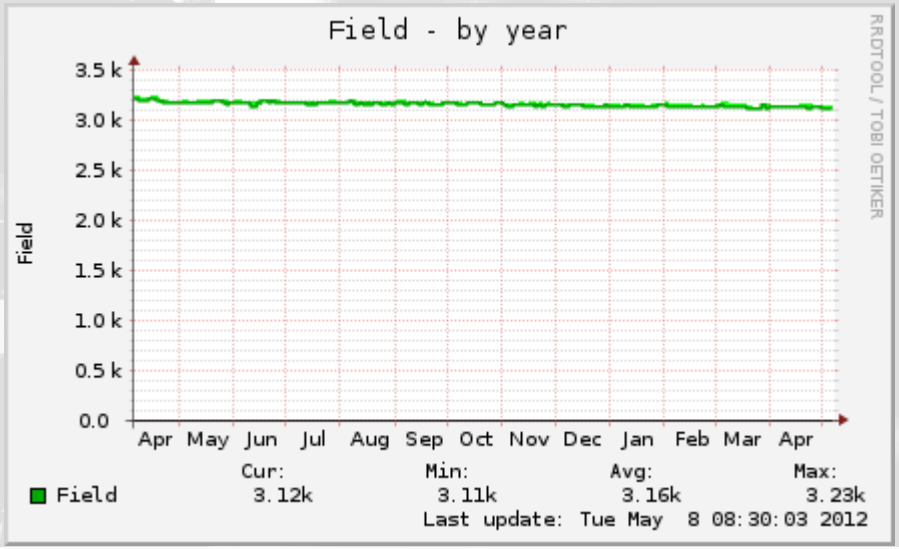
950 MHz Spektrometer, Magnet 2007



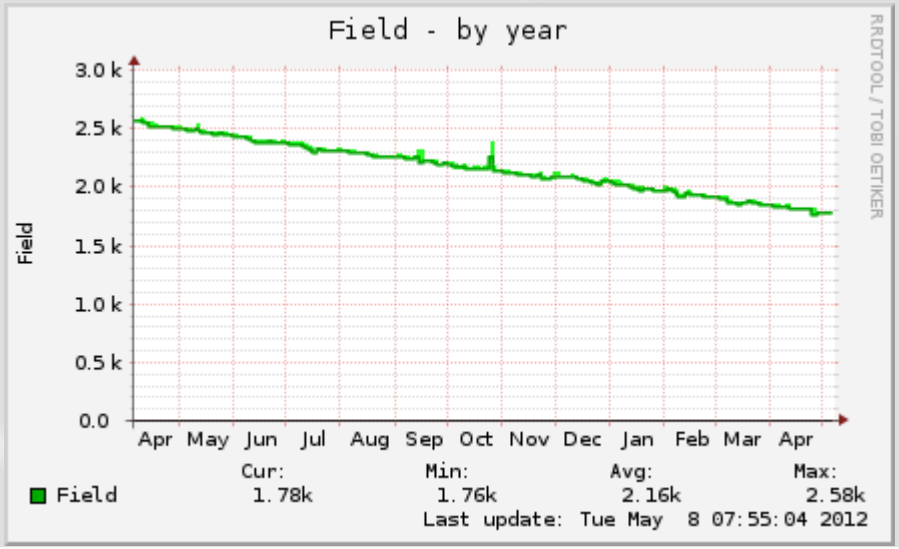
900 MHz Spektrometer, Magnet 2002

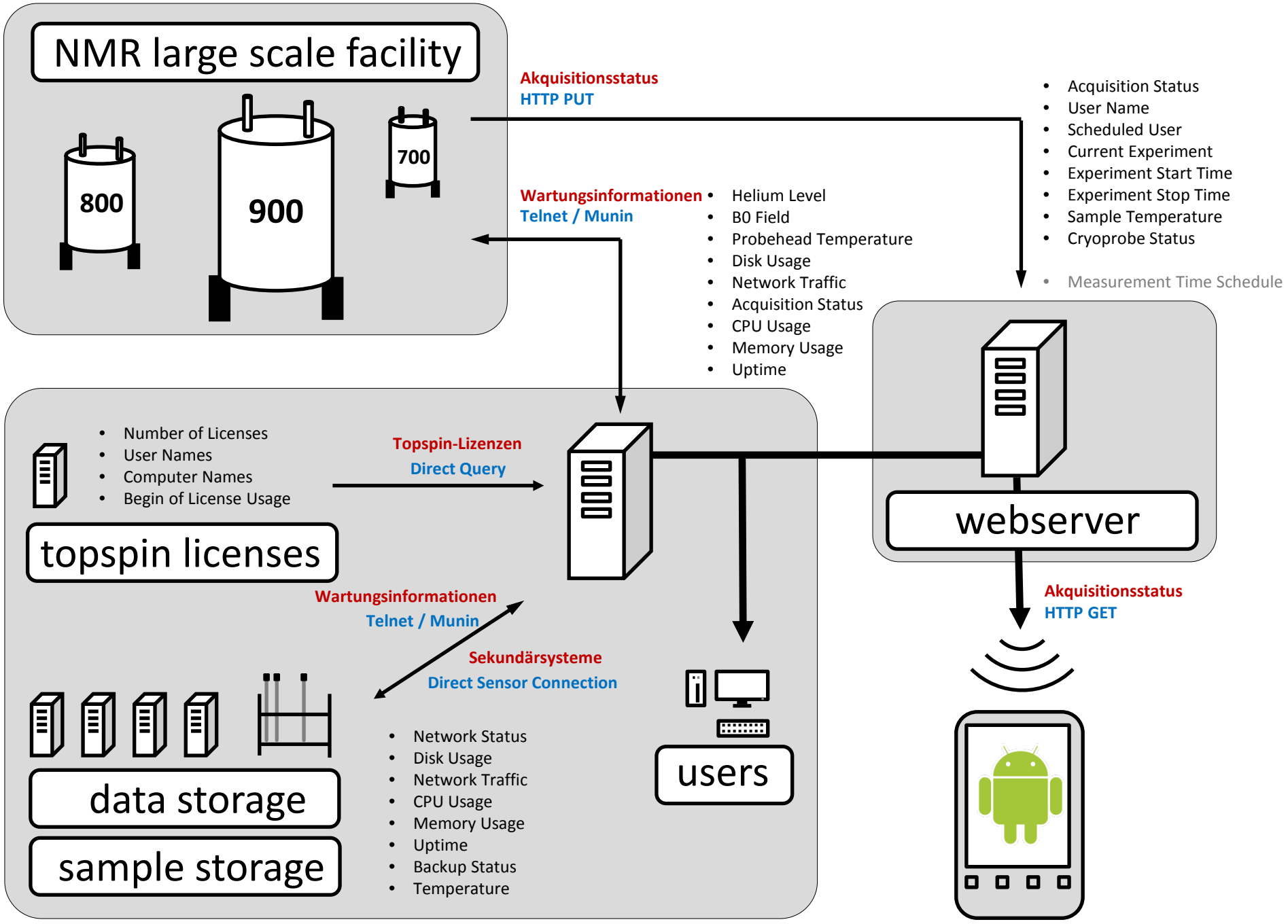


700 MHz Spektrometer, Magnet 2001



800 MHz Spektrometer, Magnet 1995




NMR large scale facility
800
900
700
Akquisitionsstatus
HTTP PUT
Acquisition Status
User Name
Scheduled User
Current Experiment
Experiment Start Time
Experiment Stop Time
Sample Temperature
Cryoprobe Status
Measurement Time Schedule
Wartungsinformationen
Telnet / Munin
Helium Level
B0 Field
Probehead Temperature
Disk Usage
Network Traffic
Acquisition Status
CPU Usage
Memory Usage
Uptime
webserver
Number of Licenses
User Names
Computer Names
Begin of License Usage
Topspin-Lizenzen
Direct Query
topspin licenses
Wartungsinformationen
Telnet / Munin
Sekundärsysteme
Direct Sensor Connection
Akquisitionsstatus
HTTP GET
users
data storage
sample storage
Network Status
Disk Usage
Network Traffic
CPU Usage
Memory Usage
Uptime
Backup Status
Temperature

IT Aspects of G-NMR

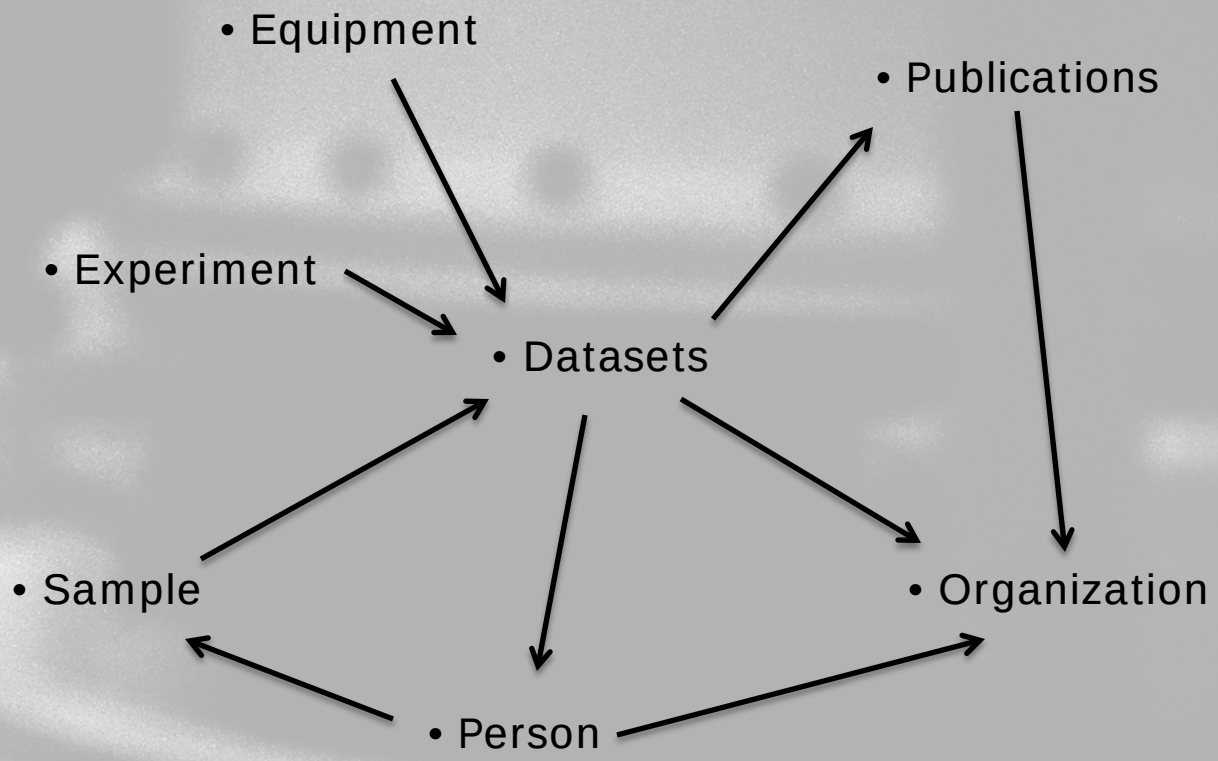
Jakob J. Lopez

A common I.T. platform for..

- **..recording of the NMR workflow: Measurement, Data Processing, Analysis, Publication**
- **..measurement time allocation**
  - **Application → Review → Acceptance → Booking**
- **..remote Access**
- **..exchange of (Educational) Material**
  - **Any content in digital format may be exchanged or shared in a comfortable and transparent manner, if desired.**

Objectives

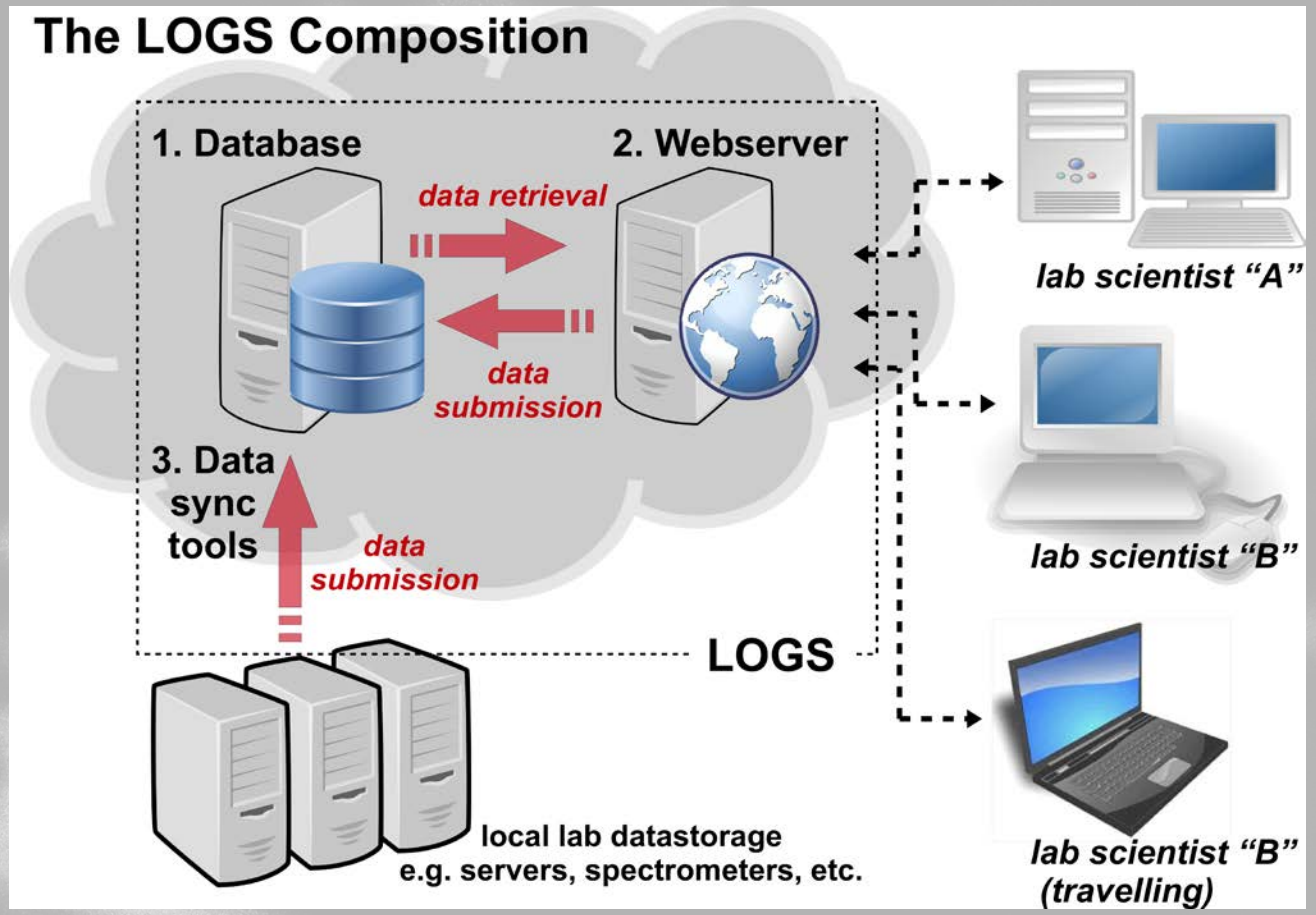
G-NMR Proposal:
"A structured as well as transparent workflow with respect to all aspects of NMR investigations will be supported."



.. and remote accessibility.

Implementation

Lab Organisation Group Sites: LOGS



Dataset storage and accessibility is planned for at least 10 years (DFG Richtlinien).

Short LOGS Demo, < 2 minutes

5. Lehrkonzepte (C. Richter, M. Sattler)

www.g-nmr.de

NMR im Chemiestudium FFM

Grundstudium (Bachelor)

- Einführung in die NMR im organischen Grundpraktikum:
  - Vorlesung und **1D-NMR Übungen**
  - Jede synthetisierte Verbindung muss mittels NMR charakterisiert werden
- Praktikum: Syntheseplanung und Strukturaufklärung
  - Lösung Komplexere **1D** und einfache **2D NMR-Aufgaben**
  - **Klausur**

NMR-Ausbildung an der TU München

Bachelor-Studiengang

- Vorlesung+**Übung**: Einführung in die NMR im Rahmen der "Strukturellen Analytik" (Bachelor Ch, LebCh, LAG, BioCh) Klausur
- Organisch-Chemisches **Praktikum**: Analyse von NMR-Spektren

  Möglichkeit zur **selbständigen Spektren-Aufnahme** (250 MHz) (B Ch, LebCh, BioCh, Master LAG)

www.g-nmr.de

NMR im Chemiestudium in Frankfurt

Hauptstudium (Master)

- Vorlesung + **Übung**: Struktur und Funktion (Klausur)
- Vorlesung + **Übung**: Mathematische Grundlagen der NMR (Vortrag)
- NMR-Intensivkurs
  - Lösung komplexer **1D und 2D-NMR-Aufgaben** (Haessner-Aufgaben)
  - Computerunterstützt Auswertung der **2D Spektren** (COSY, TOCSY, NOESY, HSQC, HMBC) von 8 bis 16mer Peptiden
  - Strukturrechnung via We-NMR
- Arbeitskreispraktikum
  - Zuordnung von Ubiquitin mittels Standard Protein 3D Experimente
  - Zuordnung eines 14mer RNA Konstrukt mittels 3D-Experimente

NMR-Ausbildung an der TU München

Master-Studiengang

- Vorlesung "Advanced NMR": FT, Produktoperatoren, 2D-Techniken, NOE, ... (Wahlpflicht Haupt-/Nebenfach OC)
- dazu **Praktikum** "Advanced NMR": NMR-Spektrometer, 1H- /13C-Zuordnung Peptid, Kopplungskonstanten, NOEs
- Vorlesung "Biomolecular NMR": 2D-/3D-Tripleresonanz, Zuordnung, Struktur und Dynamik von Protein/RNA (Pflicht im Nebenfach Biochemie) mit **Übungen**
- dazu **Praktikum** "Biomolecular NMR": Aufsetzen eines Messung, Backbone-Zuordnung / Sekundärstruktur eines Proteinfragments, Ligandentitration

www.g-nmr.de

Advanced courses

- "EMBO Practical Course: Structure, dynamics and function of biomacromolecules by solution NMR" (München/Basel):
  - Theorie & Praxis
  - Praktika an Spektrometer
  - Datenprozessierung, Auswertung
  - Strukturrechnung

6. NMR Pulssequenzen (G. Gemmecker, M. Sattler)

www.g-nmr.de

Pulssequenzen, Acqusition, Prozessierung

Pulssequenzen

- Welches Pulsprogram für welche Anwendung
  - Proteine, RNA, Festkörper, Materialien
  - Pulskalibrierung
  - Shaped pulses
- Optimale Experimente abhängig von Molekulargewicht und Deuterierung
- Standardexperimente, Datensätze, Acquisitionsparameter
- Messung von J, RDCs, Relaxationsdaten, etc.

www.g-nmr.de

Pulssequenzen, Acqusition, Prozessierung

Acquisition

- HSQC, TROSY, CRIPT, CRINEPT
- SOFAST, BEST
- APSY, NUS, IST, MaxEnt, ...
- Sensitivity enhancement, simultaneous acquisition
- Optimized transfers depending on spin system and specific isotope labeling (methyl-labeling)
- 13C direct detection
- Festkörper NMR

www.g-nmr.de

Pulssequenzen, Acquisition, Prozessierung

Prozessierung

- **FFT**
- **NUS, MDD, IST, …**

Data analysis?

CCPN?

www.g-nmr.de

Arbeitsgruppen

Ansprechpartner

IT-Aspekte: Betz (FFM), Haessner (TUM)

Spektrometer Maintenance: Richter (FFM), Gemmecker(TUM)

DFG-Nutzungsordnungen: (Janssen, Schwalbe, Sattler, Graf)

Lehrkonzepte: Richter (FFM), Gemmecker (TUM), Sattler (TUM)

NMR Experiment, Standards:
Lösung: Löhr(FFM), Gemmecker (TUM), Bermel (Bruker)
Festkörper: Baldus (FFM), Reif (TUM)

Industriekontakte: Sattler (TUM), Schwalbe (FFM)

www.g-nmr.de