

Protokoll G-NMR Treffen

02.10.2014, Berlin

Tagesordnungspunkte

- Status der G-NMR Aktivitäten und Arbeitsgruppen
- Perspektive für den Nachfolgeantrag

Status der G-NMR Aktivitäten und Arbeitsgruppen

Michael Sattler gibt einen kurzen Überblick über die geplanten Aktivitäten von G-NMR und weist daraufhin, dass alle Aktivitäten, Arbeitsgruppen und Protokolle auf der G-NMR Web page <http://www.g-nmr.de> dokumentiert werden. Es wurde ein durch ein internes Passwort geschützter Bereich eingerichtet, um Dokumente auszutauschen. Verantwortlich und Kontakt für die Homepage ist Sam Asami <sam.asami@tum.de>.

1) DFG-Nutzerordnung

Harald Schwalbe informiert über die DFG-Nutzerordnung zu Gerätenutzungskosten und zu Gerätezentren. Dank des G-NMR-Projekts ist nun eine solche Gerätenutzung für NMR-Zentren und NMR-Serviceeinrichtungen bei der DFG etabliert. Es wird nochmals auf die unterschiedlichen Kostensätze für NMR-Messungen im Servicebereich sowie von NMR-Messungen an komplexen Forschungsfragen hingewiesen.

2) Status AG IT-Aspekte

Christian Richter berichtet über das Treffen am 28.10.2013 an der Goethe-Universität in Frankfurt/M. Dort wurden die verschiedenen Betriebskonzepte vorgestellt. G-NMR war auf Anregung seiner Mitglieder auf die Zeitschrift Angew. Chemie zugegangen mit der Frage, ob ein Qualitätssicherungssystem etabliert werden soll, mit dessen Hilfe die Plausibilität von chemischen Verschiebungen, insbesondere ^{13}C , bei der Einreichung von Manuskripten geprüft werden soll. Mittlerweile ist beschlossen worden, dass eine solche Plausibilitätsprüfung verpflichtend bei Einreichung von Manuskripten bei der Angew. Chem. eingeführt wird. Die notwendige Software existiert von Wolfgang Robien, Wien, und kann kostenfrei verwendet werden. Es wird vorgeschlagen, die Rohdaten für die Zuordnung der chemischen Verschiebungen kleiner Moleküle in der Cambridge Database abzulegen. In gleicher Weise wird angeregt in Bio-Proben Rohdaten bei der BMRB oder PDB abzulegen. Die Koordinatoren von G-NMR werden aufgefordert, Kontakt zu beiden Datenbanken aufzunehmen.

- ⇒ Die AG IT-Aspekte soll eine entsprechende Stellungnahme verfassen, die dann über FGMR und die GDCh an Journale und Datenbanken herangetragen werden

3) Status AG Spektrometer maintenance

Christian Richter berichtet über das Treffen am 12.09.2013, FGMR-2013, Frauenchiemsee. Es wird der Setup von Standardexperimente zum Vergleich der Performance der Spektrometer an verschiedenen Standorten besprochen. Harald Schwalbe schlägt vor, dass jeder interessierter Nutzer, der sich bereit erklärt, den Standardsatz von Experimenten regelmäßig aufzunehmen, eine markierte Ubiquitin-Probe zur Durchführung dieser Experimente erhält. Das FMP (Berlin) und andere NMR Zentren sind an einer solchen Probe interessiert. Hermann Heumann (Silantes) signalisiert solche Standardproben ggfs. zu einem reduzierten Preis anbieten zu können.

- ⇒ Christian Richter wird ein aktualisiertes Dokument zur Verfügung stellen, in dem die Standardexperimente beschrieben sind (G-NMR website).

Johanna Becker stellt die Ergebnisse der Standardexperimente für Festkörper-NMR der 5 Zentren (FFM, München, FMP Berlin, Karlsruhe, Leipzig-Huster) vor, die sich an dem Vergleich beteiligt haben.

- ⇒ Johanna Becker wird ein aktualisiertes Dokument zur Verfügung stellen, in dem die Standardexperimente beschrieben sind (G-NMR website).

4) Status AG Pulssequenzen liquids/solids

Michael Sattler fasst kurz das Treffen der AG zu Lösungs-NMR-Pulssequenzen in München zusammen. Die Plattform zum Austausch von Pulssequenzen auf der G-NMR web page wird bis jetzt nur wenig wahrgenommen und genutzt.

Daniel Matthieu (Bruker) merkt an, dass eine Pulssequenz library "von Nutzern für Nutzer" von Bruker existiert, bei der Nutzer ihre NMR Pulssequenzen hochladen können. Harald Schwalbe bemerkt, dass man die bestmöglichen Standards und Qualität für Pulssequenzen erreichen und verfügbar machen sollte und dass dies durch die Bruker-Austauschplattform nicht erreicht wird.

Sam Asami präsentiert die Probleme der Pulssequenz-Bibliothek aus der Sicht der Nutzer und der NMR-Facility, und stellt die Implementierung vor, wie diese Probleme an der TUM gelöst werden sollen. Zukünftig sollen die dabei entwickelten automatisierten und optimierten Pulssequenzen über die TU München hinaus den G-NMR Nutzern angeboten werden. Die Optimierung und Austausch von optimierten Experimenten werden in der AG Pulssequenzen weiter besprochen und mögliche Wege zur Implementierung in G-NMR diskutiert. Sam Asami stellt weiterhin die Umsetzung der Aufgaben aus dem letzten Treffen vom 15.01.2014 an der TUM in Garching vor. Die damals geforderte Plattform für ein Intranet zur Weitergabe von Dokumenten innerhalb des G-NMR Netzwerkes, wurde über ein Wiki realisiert (<http://wiki.g-nmr.de>). Weiterhin wurde eine separate Web page für Pulssequenzen konzipiert (<http://wiki.g-nmr.de/pp>).

5) Status Lehrkonzepte

Harald Schwalbe informiert über den G-NMR Workshop Teaching Concepts am 21.11.2013, in dem die Lehrinhalte für NMR im Bachelor Chemie besprochen wurden. Die Erhebung zur NMR Lehre im Bachelor Studium Chemie wurde von G-NMR organisiert und von Jan Ferner (Uni Frankfurt), Nils Schlörer (Uni Köln) und Jürgen Graf (Uni Heidelberg) zusammengestellt. Das Dokument wurde an Prof. Christina Thiele, Vorsitzende der FGMR, weitergeleitet. Das Dokument ist im G-NMR intranet verfügbar.

6) G-NMR Schule

Bernd Reif informiert über die G-NMR Schule, die im Zeitraum 13.-15.10. in Neuherberg stattfinden wird. Bisher haben sich 87 Doktoranden angemeldet. Der Vorschlag von Monika Beerbaum, die Qualität der einzelnen Beiträge in einem Fragebogen sehr genau abzufragen, wird sehr begrüßt.

7) Future of G-NMR - zweite Antragsperiode

Es wird das Zukunftskonzept für eine 2. G-NMR Antragsrunde besprochen. Insgesamt wird um Feedback gebeten, welche Punkte für die Mehrheit von Interesse sind. Diese sollen Eingang in die 2. Runde finden.

- ⇒ Harald Schwalbe schlägt vor, Anregungen und Themen durch eine Umfrage über G-NMR abzufragen, der in den nächsten Wochen vorbereitet und über die G-NMR mailing list verteilt wird. Die Umfrage wird von BMRZ (C. Richter, H. Schwalbe) in Absprache mit dem BNMRZ (M. Sattler, G. Gemmcker) vorbereitet werden