

Protokoll G-NMR Treffen, 10. September 2015, Darmstadt

Zeit: 13.00-14.15 Uhr, im Anschluss an die FGMR Fachgruppentagung

Teilnehmer

Siehe Anhang.

Tagesordnung

1. Ergebnis der G-NMR Umfrage
2. G-NMR Schule
3. Verlängerungsantrag G-NMR
4. Berichte aus den Arbeitsgruppen
5. Leopoldina Workshop *Structural Biology* in Berlin

Die Organisatoren berichten Entwicklungen und Fortschritte aus dem G-NMR Netzwerk. Die Folien der Präsentation sind als PDF Datei beigefügt.

1) Ergebnis der G-NMR Umfrage (Sattler)

Der G-NMR Survey zeigt, dass an vielen NMR Zentren Nutzerordnungen etabliert sind bzw. wurden. Die Möglichkeit Nutzungspauschalen bei DFG Anträgen einzuwerben wird bis jetzt eher wenig genutzt. Die Themen der Arbeitsgruppen werden als wichtig und relevant erachtet. Aufgrund des großen Interesses und hoher Nachfrage soll eine neue AG zum Thema „NMR kleiner Moleküle“ eingerichtet werden.

Der Survey belegt die generelle Zufriedenheit mit den Aktivitäten in G-NMR und dem Format der G-NMR Schule. Verbesserungsvorschläge für die Schule werden unter Punkt 2 diskutiert. Die komplette Umfrage ist im G-NMR Intranet abrufbar.

2) G-NMR Schule (Reif, Schwalbe)

Es wurde über die erste G-NMR Schule berichtet, die im Zeitraum vom 13.-15.10.2014 in Neuherberg abgehalten wurde. An der Schule haben 20 Sprecher und 96 Studenten teilgenommen. Der Schwerpunkt dieser Schule lag auf *Biomolecular NMR*. Es wurde betont, dass die Schwerpunktbildung der Tatsache geschuldet ist, dass es sich hier um ein Pilotprojekt gehandelt hat.

Die nächste G-NMR Schule wird in Frankfurt vom 29.2.-4.3. 2016 stattfinden.

Auf der Basis der Ergebnisse der Umfragen wird ein 3+2-Format etabliert. In 3 Tagen sollen die allgemeinen Grundlagen der Lösungs- und Festkörper-NMR-Spektroskopie unterrichtet werden, in den letzten 2 Tagen sollen spezielle Vertiefungsthemen diskutiert werden. Als Vertiefungsthemen sind *Biomolecular NMR*, *Small Molecules*, *Polymers* und *Materials* angedacht. Die Mitglieder der Arbeitsgruppe *Small Molecules* sind herzlich eingeladen, hier einen Workshop anzubieten.

Möglichkeiten der Erweiterung der G-NMR-Schule auf einen breiten Kreis von Interessierten (Synthesechemiker) wird diskutiert. Hierzu soll abgewartet werden, inwieweit Anmeldungen aus diesem Bereich eingehen. Die Tagung sollte möglichst bald mittels GDCh-Verteiler der Fachgruppe Magnetische Resonanz sowie in MARS angekündigt werden.

Es wird diskutiert, ob man alternierend eine Schule für Anfänger und im nächsten Jahr eine Schule für Fortgeschrittene macht. Im Moment wird eine Organisation favorisiert, in der 3

Tage Einführung und 2 Tage Spezialisierung angeboten wird. Teilnehmer können ggfs. auch nur an einem der beiden Blöcke teilnehmen.

3) G-NMR-Verlängerung (Schwalbe)

Die Leiter des G-NMR-Projekts haben einen Verlängerungsantrag gestellt. Die DFG finanziert ggfs. eine Auslauffinanzierung über 2 Jahre. Neben jeweils einer Postdoc-Stelle in München und Frankfurt sind Mittel für zwei G-NMR-Schulen, Workshops und Standardproben beantragt worden.

4) Berichte aus den Arbeitsgruppen

Lösungs-NMR (Asami, BNMRZ)

Die im Rahmen der AG Lösungs-NMR diskutierten Konzepte für eine G-NMR Pulssequenzbibliothek wurden weiterentwickelt und implementiert. Am BNMRZ in München gibt es ein Tool, das die standardisierte und verlässliche Nutzung optimierter Pulssequenzen ermöglicht. Hier existieren eine Reihe von wichtigen und häufig genutzten Sequenzen, die auf der G-NMR Internetplattform bereitgestellt werden sollen. Die Bibliothek ist aber noch bei weitem nicht komplett. Aktuelle Weiterentwicklungen, sowie erste Tests des Tools in anderen NMR-Einrichtungen werden beim nächsten Treffen besprochen.

Spektrometer (Richter, BMRZ)

Ubiquitinproben für Standardexperimente in der Lösung wurden angeschafft, qualitätskontrolliert und verteilt. Insgesamt wurden 9 Ubiquitinproben gekauft für akademische Gruppen. Weiterhin wurden Proben von Bruker unabhängig bestellt.

Festkörper-NMR (Becker-Baldus, BMRZ)

Generelle Richtlinien zum Aufsetzen der Probenköpfe wurden vorgeschlagen. Die hierfür notwendigen Proben (Adamantan, KBr), sollten in den NMR Zentren stets verfügbar sein. Referenzierung sollte, wenn möglich indirekt über Adamantan erfolgen entsprechend den IUPAC Regeln.

Es wurde ein Protokoll erstellt, um die Leistungsfähigkeit der Probenköpfe in den verschiedenen Arbeitsgruppen zu vergleichen. Dabei wurde die ^{13}C -Signalintensität und die $^1\text{H}-^{13}\text{C}-^{15}\text{N}$ Doppel-CP Effizienz untersucht. Es nahmen 5 Arbeitsgruppen teil. Die Datenbasis soll in Zukunft noch erweitert werden. Die detaillierten Daten werden allen teilnehmenden Arbeitsgruppen zur Verfügung gestellt. Weitere Arbeitsgruppen haben ihr Interesse bekundet, so dass die Datenbasis weiter ausgebaut werden wird.

Am BMRZ wurden Experimente zur Kalibrierung der Probenkopftemperatur durchgeführt. Details hierzu sind der Präsentation zu entnehmen.

5) Leopoldina Workshop Structural Biology in Berlin

Im November findet ein Workshop der Leopoldina statt, um die Notwendigkeiten und Perspektiven der integrierten Strukturbioologie in Deutschland zu diskutieren. Es ergeht herzliche Einladung zur Teilnahme.

¹³C-NMR-Meeting 10.9.2015 Darmstadt

Institution	Name	Email
Uni-Frankfurt	Christian Richter	ric@nmr.uni-frankfurt.de
u	J.W. FERNER	ferner@nmr.uni-frankfurt.de
TH Darmstadt	Gerd Runkelshy	gerd.runkelshy@chemie.tu-darmstadt.de
Leibniz Institut für Polymerforschung Dresden	Ulrich Scheler	scheler@ipfdd.de
HTWK Bergakademie Freiberg	Erica Brendler	erica.brendler@chemie.tu-freiberg.de
Bruker	W. Bornel	wolfgang.bornel@Bruker.com
TU München	Thomas Reif	reif@tum.de
UNI - FRANKFURT	Claus Paalß	paalss@em.uni-frankfurt.de
UNI - FRANKFURT	Johanna Baldus	j.baldus@em.uni-frankfurt.de
TU München	Sam Asani	sam.asani@tum.de
AWI Bremerhaven	Matthias Köck	m.koock@awi.de
UNI - Regensburg	H.R. Kalbacher	hans-robert.kalbacher@ur.de
TH DRESDEN	Lübken, Tilo	tilo.luebker@th-dresden.de
Uni Jena	Peter Bellstedt	peter.bellstedt@uni-jena.de

lshftut	Name	Email
Uni - Bonn	Senada Nozimovic	nozimovic@uni-bonn.de
Uni Frankfurt	Julia Wimmer - Tautloschle	wimmer@nmr.uni-frankfurt.de
LIKAT Rostock	Wolfgang Baumann	wolfgang.baumann@catalysis.de
TU Berlin	Sebastian Kemper	sebastian.kemper@tu-berlin.de
Uni Mainz	Johannes Liermann	liermann@uni-mainz.de
Uni Köln	Nils Schröer	nils.schroer@chemie.kit.edu
Uni Darmstadt	Volker Schmidt	vschmidt@thiuklab.de
Uni Düsseldorf	Henrike Heise	h.heise@fz-juelich.de
IPB Halle	Andrea Porzel	aporzel@ipb-halle.de
WIT	Heribert Kosfeld	heribert.kosfeld@t-online.de
Univ Halle, Physik	Stefan Gröger	stefan.groeger@physik.uni-halle.de
FMP, Berlin	Peter Schmieder	schmieder@fmp-berlin.de
FMP, Berlin	Mounika Beerbaum	beerbaum@fmp-berlin.de
Uni Potsdam	Heiko Möller	heiko.moller@uni-potsdam.de
Uni Hamburg	Thomas Hackl	hackl@chemie.uni-hamburg.de
Uni Heidelberg	Jürgen Graf	graf@oci.uni-heidelberg.de
Uni Kielburg	Marcus Enders	markus.enders@uni-kielburg.de
Magic Angle GmbH & Co. KG	Jakob Lopez	jakobjlopez@magic-angle.com
Bruker	Gerhard Althoff-Ospelt	gahard.althoff@bruker.com
Bruker	Rainer Kerssebaum	rainer.kerssebaum@bruker.com
Uni Göttingen	Michael John	mjohn@gwdg.de
TU Darmstadt	Torsten Gutmann	gutmann@chemie.tu-darmstadt.de
FLI Jena	Oliver Ohlenschläger	oliver@fli-leibniz.de

G-NMR: Network of German NMR Centers

Treffen Darmstadt, 10. Sep 2015



www.g-nmr.de



G-NMR web page & intranet Wiki

G-NMR web page

- Überblick über G-NMR Projekt
- Aufstellung aller Arbeitsgruppen
- Ankündigung von G-NMR Treffen
- Dokumentierung der Treffen
(Präsentationen + Sitzungsprotokolle)
- G-NMR Mailing Liste
- Intranet
- Pulse Sequence Library

The screenshot shows the homepage of the G-NMR website. The header reads "G-NMR network". On the left is a sidebar with links: Home (selected), Projekt, G-NMR Mitglieder, Arbeitsgruppen, Dokumente, Treffen, Intranet, G-NMR Mailing List, and G-NMR Pulse Sequence Library. The main content area has a large text block about the project's purpose and challenges, followed by news items about the meeting at FGMR 2014 and the G-NMR Autumn School.

Intranet (Wiki)

- User Login
- Datenaustauschplattform
- Ablage von Dokumenten der verschiedenen Arbeitskreise
- Nutzer-Austausch über Pulssequenzen

The screenshot shows the main page of the G-NMR intranet Wiki. It features a sidebar with Navigation, File Exchange, Categories (including IT-Applik., Nutzertutorials, Lehrkonzepte, NMR(solution), NMR(gold), Industriekontakte, and Pulse Sequence Library), and a search bar. The main content area displays the "Main Page" with instructions to upload files and a note about uploaded files.



www.g-nmr.de

9/15/2015

2

DFG

Program

- Outcome of the Survey
- Application for G-NMR extension
- Next G-NMR School - date & content
- Update on Working Groups
- Leopoldina Workshop Structural Biology in Berlin
- Any other points

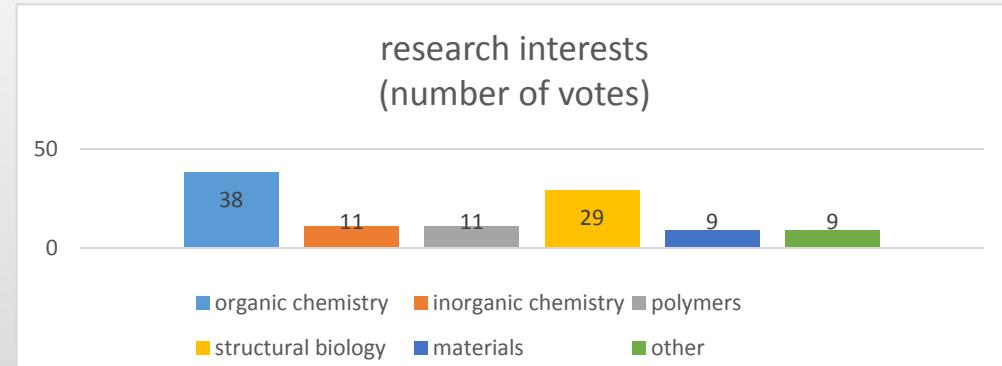
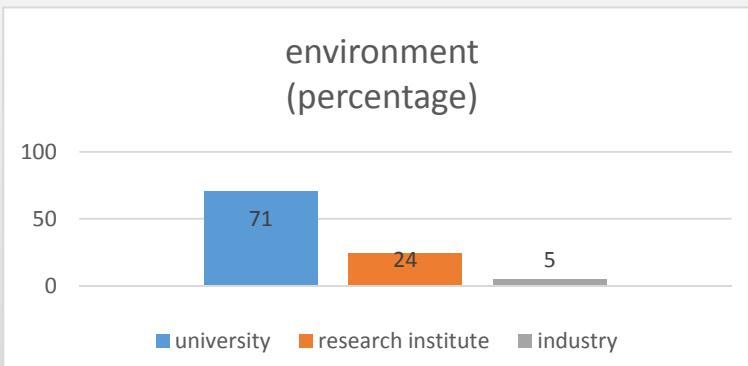


www.g-nmr.de



G-NMR Online Survey (March 2015)

- → Thanks to Sam Asami (TUM) for running the survey
- Participation of 87% of all G-NMR members
 - completely filled forms (62%, n = 59)
 - partially filled forms (25%, n = 24)
- Participants:
 - PIs (47%), scientific staff (49%), all other members from G-NMR mailing list (4%)



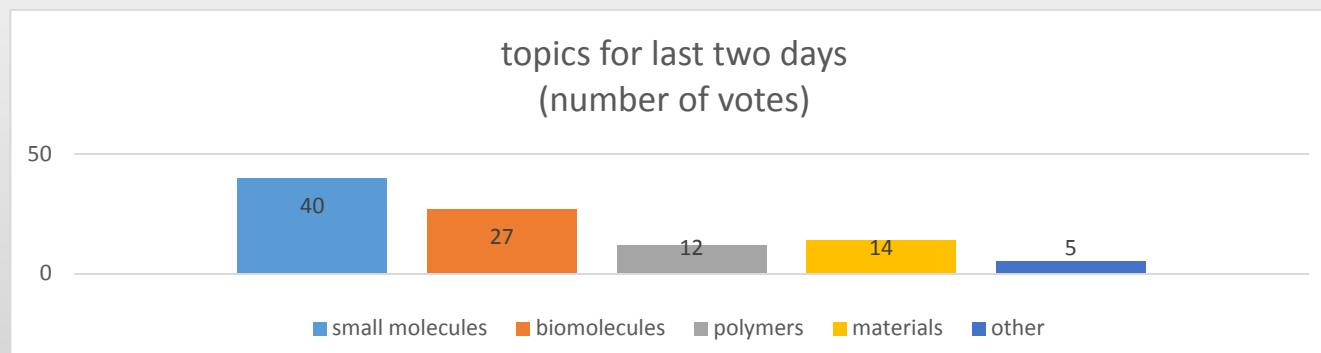
Survey: By-laws for NMR facility

- ~ 1/3 of labs have established user rules („Nutzerordnung“)
- only 10% of users currently have requested funding for the use of the NMR facility in their DFG projects (“Nutzungskostenpauschale”)



Survey: G-NMR Teaching School

- Proposed format for the future „3+2“ days
 - **first three days:** introduction of the basic concepts of solution- and solid-state
 - **final two days:** more specialized topics (i.e. biomolecules, small molecules, materials, polymers, etc.)
 - 95% support the format
- Selected comments
 - *The audience was considered too **heterogenic** with respect to level of prior knowledge. Also, the target audience was not well defined.*
 - *More **practical sessions and more exercises** were requested.*
 - *Topics focused mainly on biomolecular NMR, **additional topics** from organic/inorganic chemistry, small molecules, materials, polymers should be included.*
 - ***Funding support for students** was requested (conference fees, traveling expenses)*



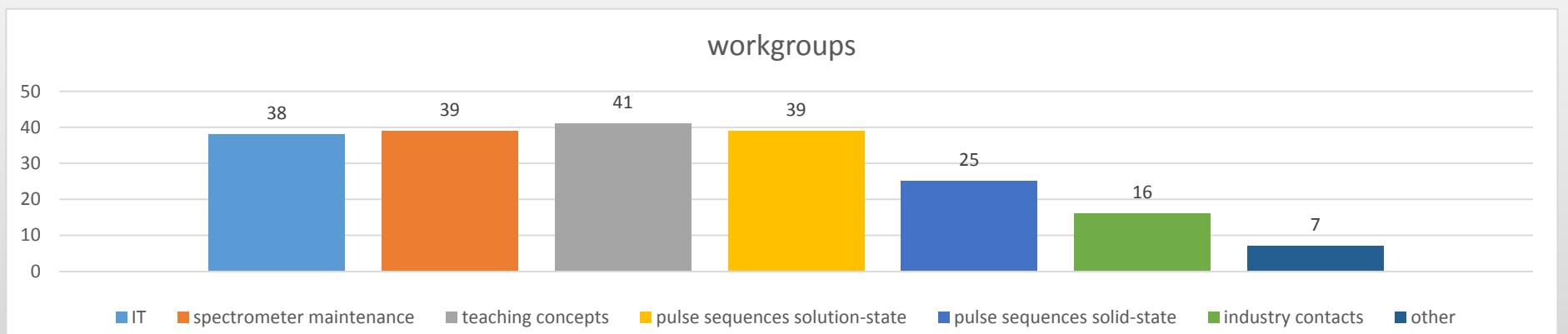
Funding for G-NMR Teaching School

- 1st G-NMR School was supported by sponsors and G-NMR funds
- survey questions: possibility of conference fees, expected attendance of the school and the willingness of PIs and facility managers to contribute as instructors?
 - → need **sustainable funding** without G-NMR support in the future!!
- 75% of the PIs agreed that fees up to **200 €** would be acceptable; they would send **1-2 students per year** to attend the school
- 60% of PIs would cover the travel costs of their students
- 66% of the survey participants would be willing to actively participate in the school by giving a lecture



Working Groups

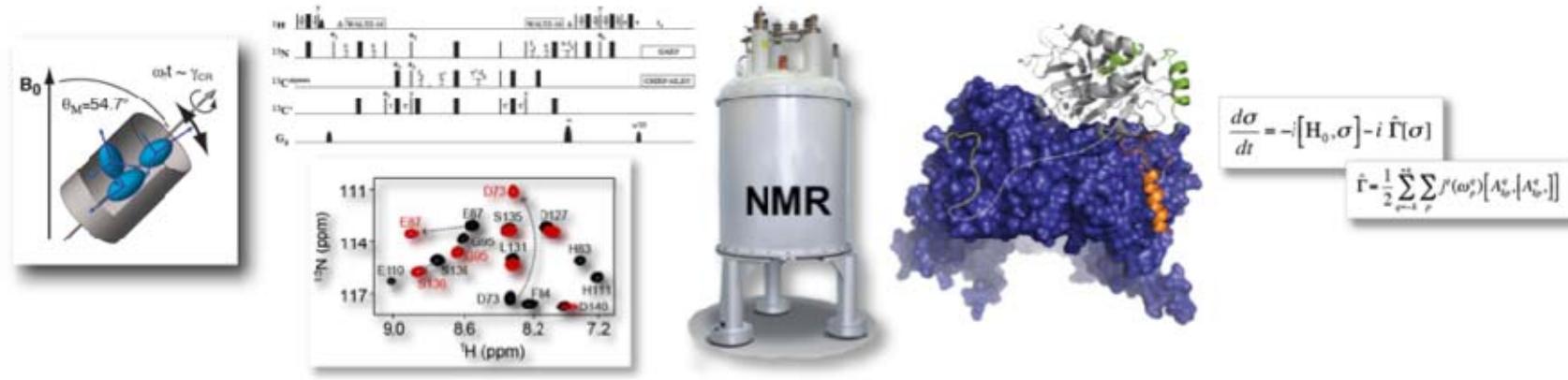
- Survey: which of the working groups should be extended in the future and asked for suggestions for new topics that are required
- Results:
 - there is and remains broad interest in **all** aspects (multiple votes possible)
 - as one important novel topic it was suggested to establish a working group on NMR of **small molecules**



1st G-NMR School on Magnetic Resonance in Biological Systems

Helmholtz-Zentrum Neuherberg, October 13-15, 2014

<http://www.helmholtz-muenchen.de/g-nmr-school>



Speakers:

- Johanna Becker, Universität Frankfurt
- Monika Beerbaum, FMP Berlin
- Wolfgang Bermel, Bruker Biospin Rheinstetten
- Teresa Carlomagno, EMBL Heidelberg
- Gerd Gemmecker, TU München
- Steffen Glaser, TU München
- Christian Griesinger, MPI Göttingen
- Adam Lange, FMP Berlin
- Donghan Lee, MPI Göttingen
- Tobias Madl, TU München
- Michael Nilges, Institute Pasteur Paris
- Philipp Neudecker, FZ Jülich / HHU Düsseldorf
- Hartmut Oschkinat, FMP Berlin
- Bernd Reif, TU München
- Christian Richter, Universität Frankfurt
- Michael Sattler, TU München
- Peter Schmieder, FMP Berlin
- Harald Schwalbe, Universität Frankfurt
- Remco Sprangers, MPI Tübingen
- Markus Zweckstetter, MPI Göttingen

1st G-NMR School (13-15 Oct 2014): Report

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



G-NMR Summer School, München, 13.-15.10.2014

Location: Helmholtz-Zentrum München, Großer Hörsaal, Raum 106 (Gebäude 33)

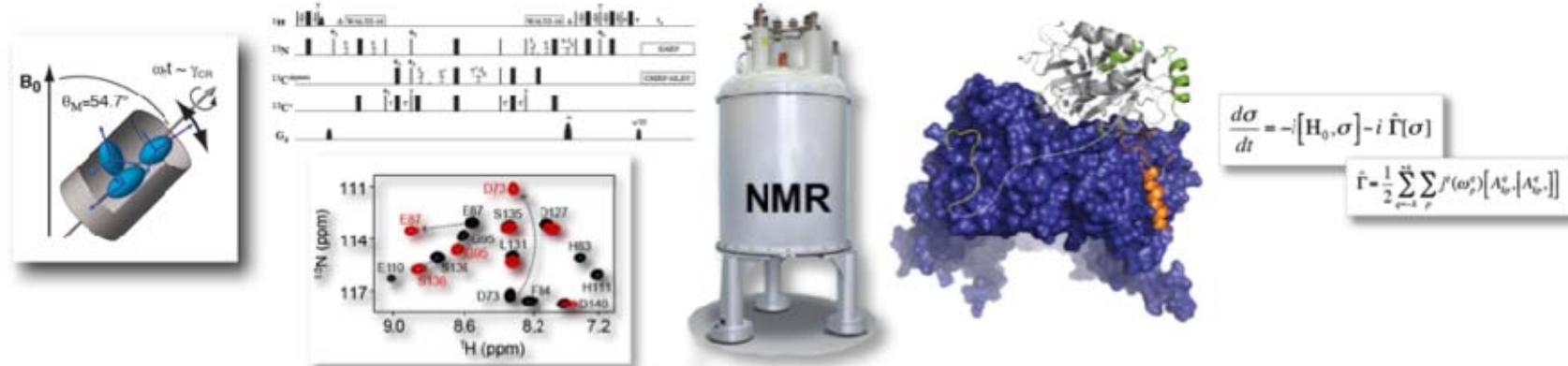
Preliminary Program

	Monday, 13.10.	Tuesday, 14.10.	Wednesday, 15.10.
08:30-09:45	Steffen Glaser <i>Product Operators</i>	Bernd Reif <i>Anisotropic Interactions + MAS</i>	Christian Griesinger <i>TROSY and Cross-Correlated Relaxation</i>
09:45-10:15	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
10:15-11:30	Peter Schmieder <i>Phase Cycling / Gradients / Quadrature</i>	Harald Schwalbe <i>Relaxation</i>	Adam Lange <i>Decoupling and Recoupling</i> <i>Solid-State NMR: Experiments + Applications</i>
11:30-12:45	Teresa Carluomagno <i>Ligand Interactions</i>	Tobias Madl <i>PREs</i>	Philipp Neudecker <i>Relaxation Dispersion Experiments</i>
12:45-13:45	Lunch	Lunch	Lunch
13:45-15:00	Michael Sattler <i>2D and 3D NMR for Assignment and Structure</i>	Markus Zweckstetter <i>RDCs</i>	Remco Sprangers <i>Large Complexes / 2H</i>
15:00-15:30	Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
15:30-16:45	Christian Richter <i>Exercise I</i>	Wolfgang Bermel <i>Non-Uniform Sampling / Shaped Pulses</i>	Johanna Becker <i>Simpson and membrane proteins</i>
16:45-18:00	Monika Beerbaum <i>Processing Assignments, CCPN</i>	Gerd Gemmecker <i>Exercise II</i> <i>Shaped Pulses</i>	Donghan Lee <i>High-power R1rho sequences</i>
18:30-19:30	<i>Dinner (HMGU)</i> <i>Italienisches Buffet</i>	<i>Dinner on your Own</i>	<i>Conference Dinner (HMGU)</i> <i>Bayerisches Buffet</i>
19:30-20:45	Hartmut Oschkinat <i>DNP: Theory and applications</i>		Michael Nilges <i>Structural Analysis</i>

1st G-NMR School on Magnetic Resonance in Biological Systems

Helmholtz-Zentrum Neuherberg, October 13-15, 2014

<http://www.helmholtz-muenchen.de/g-nmr-school>



Speakers:

- Johanna Becker, Universität Frankfurt
- Monika Beerbaum, FMP Berlin
- Wolfgang Bermel, Bruker Biospin Rheinstetten
- Teresa Carlomagno, EMBL Heidelberg
- Gerd Gemmecker, TU München
- Steffen Glaser, TU München
- Christian Griesinger, MPI Göttingen
- Adam Lange, FMP Berlin
- Donghan Lee, MPI Göttingen
- Tobias Madl, TU München
- Michael Nilges, Institute Pasteur Paris
- Philipp Neudecker, FZ Jülich / HHU Düsseldorf
- Hartmut Oschkinat, FMP Berlin
- Bernd Reif, TU München
- Christian Richter, Universität Frankfurt
- Michael Sattler, TU München
- Peter Schmieder, FMP Berlin
- Harald Schwalbe, Universität Frankfurt
- Remco Sprangers, MPI Tübingen
- Markus Zweckstetter, MPI Göttingen

2nd G-NMR School – planning

- Zeitraum: 29.2 bis 4.3.2016
- Wo: Goethe-Universität Frankfurt, Campus Riedberg



www.g-nmr.de



G-NMR Verlängerungsantrag



www.g-nmr.de



G-NMR First funding period

Working group / Coordinator(s)	Meetings	Activities
Regulations <i>(details see 2.1)</i> J. Janssen (DFG) J. Graf (Heidelberg) H. Schwalbe (JWG-Uni) M. Sattler (TUM)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee 02.10.2014 Berlin	Establishment of a cost-model to apply for research-related DFG funds with guidelines for Bylaws of good practice in managing NMR facilities (user access, measurement time, book-keeping) Implementation at the DFG (link)
IT aspects <i>(details see 2.2, 2.3)</i> M. Betz (JWG-Uni) S. Asami (TUM) R. Haessner (TUM)	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, spectrometer monitoring and quality control were discussed, and possibilities of informatics support 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 <i>(details see 2.4)</i> J. Becker-Baldus (JWG-Uni) C. Glaubitz (JWG-Uni) B. Reif (TUM)	20.09.2012 Halle an der Saale 26.03.2013 Frankfurt am Main 12.09.2013 Frauenchiemsee 02.10.2014 Berlin	Aims at lowering the access barrier to solid-state NMR by offering a solid-state NMR introduction in the G-NMR School and by establishing standard operating procedures to create a knowledge base on routine hardware handling.



G-NMR Verlängerungsantrag

The optimal exploitation of the broad application window of NMR requires

- a.) Organization of **access schemes** to unique infrastructure
- b.) Sharing of **unique technical expertise**
- c.) **Maintaining hardware and software performance at highest possible level**
- d.) **Education** of new scientists (Bachelor, Master, and PhD students as well as Postdoctoral fellows) to (i) the fundamental concepts of NMR in liquid and solid state, to (ii) practical aspects of conducting NMR experiments, to (iii) interdisciplinary exchange, here in particular we aim at providing concourse that liquid-state NMR spectroscopists can learn solid-state NMR and vice versa.



www.g-nmr.de



G-NMR Verlängerungsantrag

3.2.2. Working Groups

Based on the survey and feedback from the German NMR community G-NMR working groups established during the first funding phase will address open issues as outlined in the following:

3.2.2.1. Teaching Curricula

3.2.2.2. Pulse sequences

3.2.2.3. Service Units

The exchange of best practice procedures among facility managers established in the first funding period will be continued and enhanced. The main topic of this workgroup is to **mutually inform about all aspects of running an NMR service unit**, including purchase and upgrade of hardware, analysis of experiments, organization of user fee systems, practical teaching. Further, it has turned out to be of interest to provide service measurement time for dedicated research question and needs on an easy-to-organize base. All of these activities will be promoted, also by providing **travel funds for facility managers** to attend meetings (e.g. annual meeting of the GDCh *Focus Group Magnetic Resonance*).



G-NMR Verlängerungsantrag

3.2.5. Industry

3.2.5.1. Development of teaching platform for advanced NMR together with Bruker (Dr. W. Bermel)

While NMR spectroscopy becomes increasingly more complex, with fundamental new methodologies are constantly been developed, e.g. RDCs, relaxation dispersion, CEST, DNP in solid-state NMR, assignment strategies in solid-state NMR etc., there is a constant need to improve teaching of NMR to an increasing number of non-expert NMR spectroscopists. This teaching obligation requires not only science-driven expert topics, but also careful introduction into the fundamental principles of NMR.

In addition, the job market for interested PhD students and Postdoctoral fellows is under worldwide competition. Therefore, G-NMR intends to develop a **teaching platform based on carefully selected and curated lecture series**, recorded by video, and made available via the G-NMR platform for educational purposes. These lecture series will be recorded at the G-NMR school and a panel of interested, educational talented lecturers will curate these lectures. At the end of the second funding period, such lecture series will be assembled. The lecture series will be developed together with the company Bruker. Bruker has expressed interest in using this material for educational purposes, in particular for markets with less established teaching curricula. As contribution, **Bruker has agreed to provide funds for the sustainability of the G-NMR school concepts after 2018 as exchange contribution.**



G-NMR Verlängerungsantrag

Cost item	No. of positions	Person-months	Costs
Personnel costs:			
P1: BMRZ: PostDoc	1	12	65.400
P1: BNMRZ: PostDoc	1	12	65.400
Other costs:			
A1: Workshops			11.000
A2: Standard Samples (isotope labeled protein/RNA)			10.000
A3: G-NMR School			11.200
total 2016:			163.000
Cost item	No. of positions	Person-months	Costs
Personnel costs:			
P1: BMRZ: PostDoc	1	10	54.500
P1: BNMRZ: PostDoc	1	10	54.500
Other costs:			
A1: Workshops			13.000
A2: Standard Samples (isotope labeled protein/RNA)			5.000
A3: G-NMR School			10.000
total 2017:			137.000

Update on working groups



www.g-nmr.de



Status AG pulse sequences liquids

- Review implementation and use of **pulse sequences** in research facilities and spectrometer manufacturers → **challenges** and **potential solutions**
- → establish **G-NMR pulse sequence library** and a user-friendly **setup tool**
- → collaboration with expert scientists from academia and industry and can be the foundation for **standardizing** experiments and **knowledge transfer**
- **Website** for collecting G-NMR pulse sequences was created (<http://wiki.g-nmr.de/pp/>)
- G-NMR will further develop the in-house pulse sequence library and in collaboration with spectrometer providers and international colleagues establish a **comprehensive pulse sequence library** that will be made available to G-NMR users and beyond
 - the database currently contains:
 - standard correlation experiments (HSQC, ctHSQC, TROSY, HMQC, SOFAST HMQC, HNCA, HNCO, HNCACO, HNCOCA, HNCACB, CBCACONH, HCCCONH)
 - specialized experiments (proline assignment, HNN-COSY, H(CC)NN-COSY)
 - drug discovery (STD, WaterLOGSY)
 - ^{15}N backbone relaxation experiments (HSQC, TROSY)
 - PRE experiments
 - BUSS decoupling



Status AG Spektrometer maintenance

- Standardexperiment für Lösungs-NMR:
 - Test's basieren auf Experimenten die bei Bio-NMR etabliert sind, angewendet auf Ubiquitin.
 - Es wurden 9 Ubiquitin Proben gekauft
 - Zusätzlich hat Bruker eigene Proben gekauft
 - Alle Proben wurden vermessen und alle Proben sind identisch
 - Die Proben wurden an die Institute nach Rückmeldung auf die Email vom 21.10.2014 verteilt.
 - Frankfurt, München, Berlin, Jena, Bayreuth, Darmstadt, Heidelberg (+ Bruker)
 - Die Test's und der Wissensaustausch kann beginnen



Certificate of Analysis



SILANTES GmbH, Gollierstraße 70 C // 4, 80339 München, Germany

Product Name	Ubiquitin $^{13}\text{C}^{15}\text{N}$ labeled (2,5 mg), non-tagged
Product Number	151603101
Lot Number	151CXN-Ubiq-501-01
Storage:	+4°C

Silantes GmbH certifies that this material does conform to the specifications stated below:

TEST	SPECIFICATION	LOT RESULTS
APPEARANCE	Clear solution	CONFORMS
PURITY	> 90% by electrophoresis	>98%
ISOTOPE ENRICHMENT	> 98%	CONFORMS
MOLECULAR WEIGHT	9047,47	

SPECIFICATIONS:

SEQUENCE	MQIFVKTLTG KTITLEEPS DTIENVKAKI QDKEGIPPDQ QRLIFAGKQL EDGRTLSdyn IQKESTLHLV LRLRGG
COMMENT	0,5 mM solution in 550 µl of 93%H ₂ O- 7%D ₂ O with 30 mM D-labeled NaAcet, pH 4,7, 50 mM NaCl

QC ACCEPTANCE DATE

07.01.2015

Authorized Signature:

Ludmilla Denissova

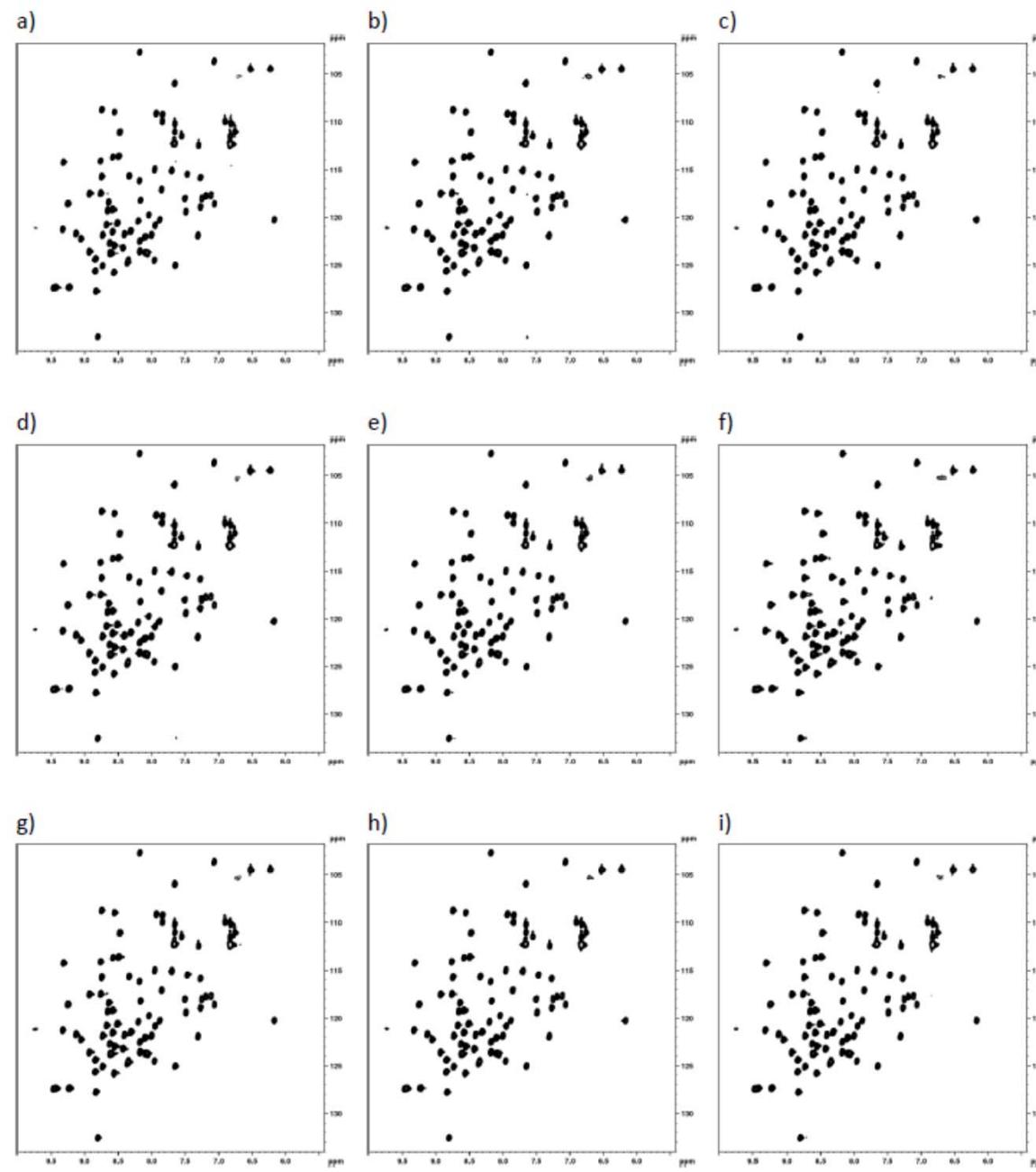
Electrophoresis picture of
CN-labeled ubiquitin in
15% SDS-PAGE (stained
with Blue R-250).



www.g-nmr.de



¹⁵N-HSQC



Ubiquitin Standard Probe

- Probenbedingung:

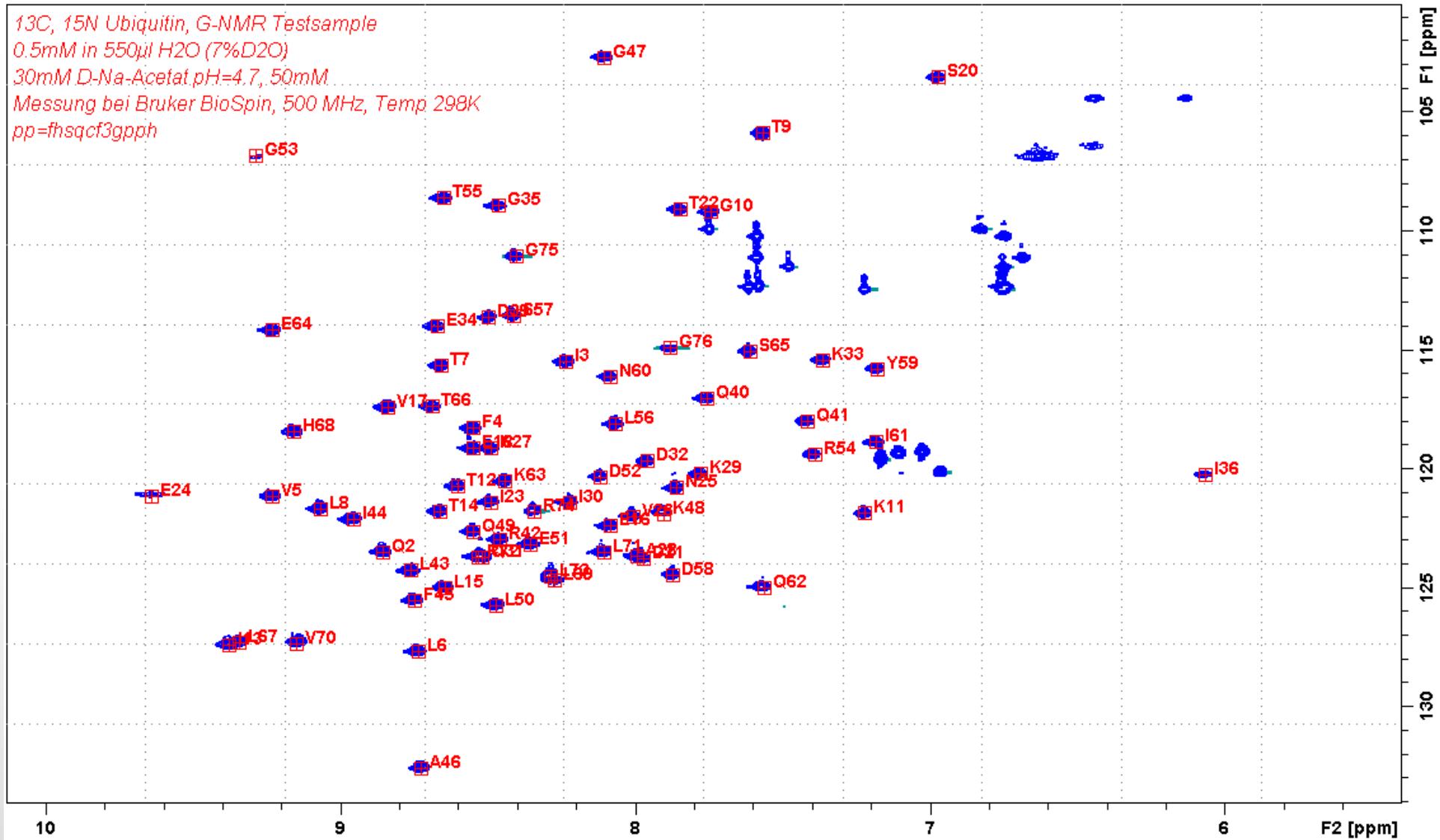
0,5 mM solution in 550 µl of 93%H₂O-
7%D₂O with 30 mM D-labeled
NaAcet, pH 4,7, 50 mM NaCl

- Gleiche Bedingungen wie in Wang et al., J. Biomol NMR 5 (1995), 376 – 382.
- Inklusive deuterierten Natriumacetatpuffer → Möglichkeit zur Verwendung des NMR-Thermometers



www.g-nmr.de





Status Lehrkonzepte

- G-NMR Workshop: Teaching day , 21.11.2013 Frankfurt

- Teilnehmer:

C. Glaubitz, H. Schwalbe, C. Richter, J. Becker-Baldus, J. Ferner (Uni-Frankfurt), G. Gemmecker & B. Reif (TU-München), C. Räuber (RWTH Aachen), E. Brendler (TU Freiburg), R. Kerssebaum (Bruker BioSpin), L. Hennig (Uni-Leipzig), M. Beerbaum & Peter Schmieder (FMP Berlin), I. Shenderovich (Uni Regensburg), N. Schlörer (Uni Köln), S. Nozinovic (Uni-Bonn), S. Kemper TU Berlin), M. Hartl (Uni-Bayreuth), C. Fares (MPI Kohlenforschung) , D. Bockelmann (MPI Göttingen), E. Haupt (Uni-Hamburg), J. Graf (Uni-Heidelberg)

- Vorstellung der verschiedenen Konzepte für die NMR Lehre
- Ergebnis:

Empfehlung für Lehrinhalte der Kernresonanzspektroskopie im Studiengang Bachelor Chemie (Erstellt von N. Schlörer, J. Graf & J. Ferner); Weiterleitung an C. Thiele, Vorsitzende von FMGR



Status Lehrkonzepte

- Empfehlung:
 - **Modell A:** Ein NMR-spezifischer Vorlesungsteil oder eine eigenständige Vorlesung von mindestens 10 Stunden, wenn sich in einem späteren Studienabschnitt (M.Sc.) eine darauf aufbauende Fortgeschrittenen-Vorlesung anschließt
 - **Modell B:** Wenn andererseits der *gesamte* relevante Lehrstoff der Kernresonanzspektroskopie schon im B.Sc.-Studium vermittelt werden soll, dann sollte die doppelte Stundenzahl angesetzt werden
 - **Praktische Anwendung:** Eine mit der Vorlesung vergleichbare Anzahl von Stunden für die praktische Vermittlung der Spektreninterpretation in Form von Übungen oder Seminaren. Ergänzend dazu sollte ein gewisser Anteil an Messungen eigener Proben z.B. in Form eines bewerteten Praktikumsteils ermöglicht werden
- Ausblick:
 - **NMR am PC** (Elearning, Simulationen, virtuelle Experimente)
 - **NMR am Spektrometer** (Hardware und NMR-spezifische Praktika)
 - **NMR im Studium von M. Sc.** und der Chemie angelagerte Bach. Studiengänge



Leopoldina Workshop

The Future of Structural Biology in Germany

The Leopoldina will conduct a workshop in Berlin with the aim to prepare for a national initiative to strengthen structural biology in Germany.

On this occasion a group of colleagues will introduce a draft concept for the development of structural biology infrastructure in Germany. In exchange with the community suggestions will be welcomed to arrive at a generally accepted plan.

Principal investigators in the area of structural biology are welcome to contribute their thoughts and shape the future.



www.g-nmr.de

<http://www.mpibpc.mpg.de/leopoldina-workshop>



Leopoldina Workshop

The Future of Structural Biology in Germany

Wednesday, 25 November 2015

14.00 Welcome address
Bärbel Friedrich (WK Lebenswissenschaften Leopoldina) – 10 min

14:10 – 15:00 Opening session
Elena Conti (MPI of Biochemistry Martinsried)
Keynote lecture on integrated structural biology – 30 min
Alfred Pühler (U Bielefeld)
German Network for Bioinformatics Infrastructure – 20 min

15:00 – 15:30 - coffee -

15:30 – 16:45 Session 2: *Towards a national strategy for structural biology infrastructure*
Patrick Cramer (MPI for Biophysical Chemistry Göttingen)
Overview – 15 min
Presentations of centers (Matthias Willmanns, Christian Spahn, Stefan Raunser, Harald Schwalbe, Irmi Sinning, Michael Sattler) – 10 min each / complete session 60 min

16:45 – 17:45 Session 3: *Discussion groups with participants* – 60 min
Group A: *Synchrotrons and X-FEL* (Willmanns/Sinning)
Group B: *EM and computing* (Raunser/Spahn)
Group C: *NMR* (Schwalbe/Sattler)

Thursday, 26 November 2015

9:00 – 10:30 Session 4: *Structural biology infrastructure, an international perspective*
Jürgen Plitzko (MPI of Biochemistry Martinsried)
EM facility – 30 min
Christos Savva (MRC LMB)
EM facility – 30 min
Rolf Boelens (U Utrecht)
Coordinator iNEXT – 30 min

10:30 – 11:00 - coffee -

11:00 – 12:30 Session 5: *Emerging techniques*
Remco Sprangers (MPI for Developmental Biology Tübingen)
Solution NMR – 30 min
Kay Grünewald (CSSB Hamburg)
Correlative fluorescence and electron microscopy – 30 min

Alexander Leitner (ETH Zurich)
Crosslinking-mass spectrometry – 30 min

12:30 Patrick Cramer (MPI for Biophysical Chemistry Göttingen)
Conclusions and perspectives



www.g-nmr.de

<http://www.mpibpc.mpg.de/leopoldina-workshop>



Other comments, questions



www.g-nmr.de



Status

- DFG-Nutzungsordnungen
 - → etabliert und von der DFG akzeptiert
- IT-Aspekte
 - Arbeitsgruppe
- Lehrkonzepte (Studium, Doktoranden/Postdocs)
 - Konzeptpapier, Studienkommission GDCh (↔ FGMR)
- NMR Pulssequenzen
 - Arbeitsgruppen
- Training courses & workshops
 - 1st G-NMR School Oct 13-15, 2014, Munich
- Industriekontakte
 - Beteiligt an Arbeitsgruppen



www.g-nmr.de





Update on the working group Solid State NMR



Bernd Reif
Clemens Glaubitz
Johanna Becker-Baldus

Darmstadt, 10.09.2015



HelmholtzZentrum münchen
Deutsches Forschungszentrum für Gesundheit und Umwelt



Lower the access barrier

- define probe setup -

- Verify Shim and MAS setting before each MAS NMR experiment
- Reference spectra for best settings should be available for each probe
- Setup sample (e.g. Adamantane, KBr, lab internal standard) should be readily available

Lower the access barrier

- define chemical shift referencing procedure -

- External Referencing with respect to the left signal in the ^{13}C -Adamantane spectrum
- For biological research use 40.49 ppm which corresponds to DSS referencing.
- Calculate the referencing for other nuclei from this using the IUPAC-IUB Recommended Chemical Shift Referencing Ratios:

R. K. Harris, E. D. Becker, S. M. Cabral de Menezes, P. Granger, R. E. Hoffman, and K. W. Zilm; "*Further Conventions for NMR Shielding and Chemical Shifts*", Pure & Appl. Chem. 80, No. 1, 59-84 (2008).

Probe performance

- Probe performance can be defined in many difference ways, here two very common measures were identified:
 - ^{13}C Sensitivity
 - ^1H - ^{15}N - ^{13}C double CP efficiency
- Many probes easily reach the manufacture specifications, but are still outperformed by similar probes in other labs
- A test protocol was defined
- G-NMR wide probe comparision:
 - 5 labs participated (BMRZ Frankfurt, BNMRZ München, Uni Leipzig, KIT (Karlsruhe), FMP Berlin)
 - ^{13}C Sensitivity (4 scans)
 - 4 mm double resonance: 150-190 (3 datasets)
 - 4 mm triple resonance: 80-134 (7 datasets)
 - 3.2 mm triple resonance: 56-100 (12 datasets)
 - Double CP efficiency: 28-55% (8 datasets)

Determine and Standardize the sample temperature in MAS NMR

- Problem:

- Temperature cannot be measured directly inside the MAS rotor
- Spinning and RF-Heating influence the sample temperature

- Dry samples:

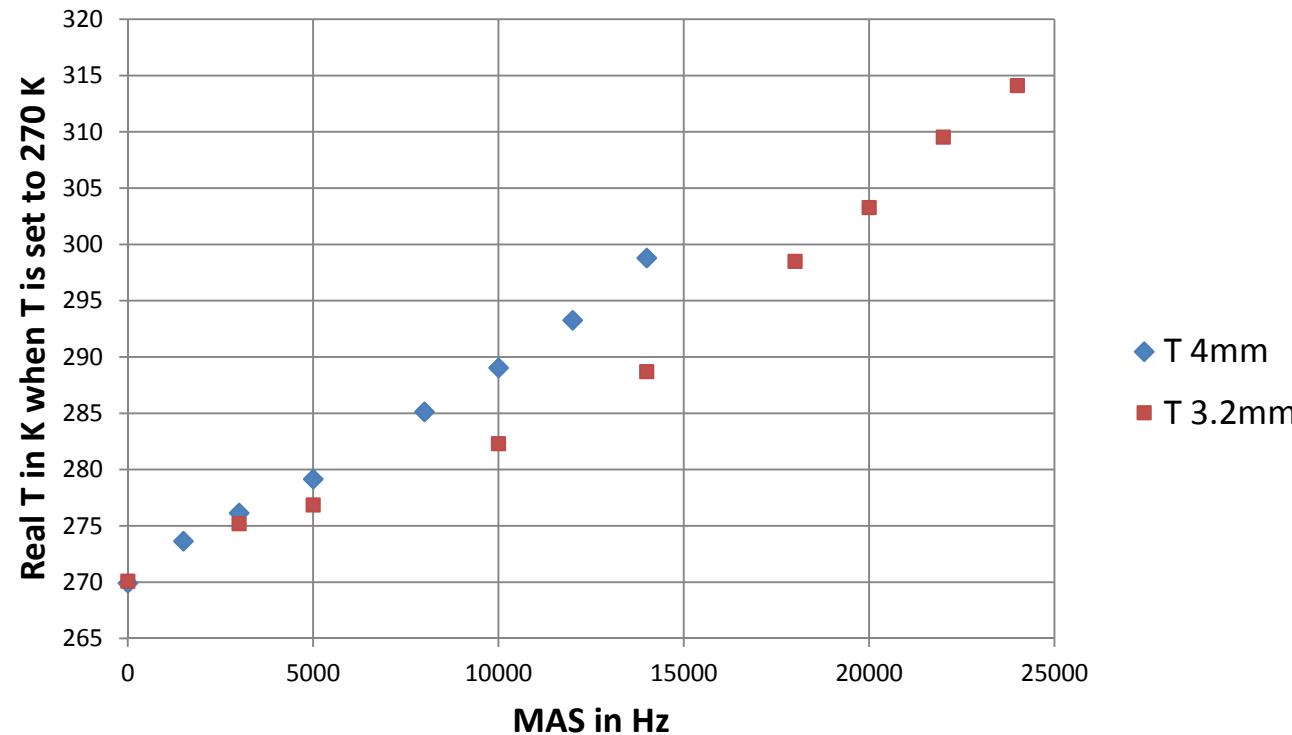
- External calibration possible, e.g. using the temperature dependence of $^{79}\text{Br}-T_1$ in KBr.

- Wet and salty samples: Rf-Heating is sample dependent, two internal methods are possible:

- Monitoring of the H_2O chemical shift (stable referencing required, also pH dependend, not always a single peak)
- Determination of the lipid bilayer phase transition temperature (can be difficult for mixtures)

Sample temperature in MAS NMR

External – ^{79}Br -T₁ in KBr



Sample temperature in MAS NMR

Internal

