

# Programm „Praktische Probleme der NMR Spektroskopie“ 2025

1. Tag 18. 03. 2025

| UHRZEIT                                                            | REFERENT/IN                                       | TITEL                                                                                                                     |
|--------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Tutorials (DOSY) (Hörsaal B) / Chair: T.Hackl                      |                                                   |                                                                                                                           |
| 09:00                                                              | Rainer Kerssebaum                                 | DOSY – Eine Einführung                                                                                                    |
| 10:00                                                              | Kaffeepause (Seminarraum AC 2/3 und 4)            |                                                                                                                           |
| 10:30                                                              | Wolf Hiller                                       | DOSY-Anwendungen in der Analytik                                                                                          |
| 11:30                                                              | Begrüßung                                         |                                                                                                                           |
| Sessions 1: Lehre und Praxis (Hörsaal B) / Chair: T. Hackl         |                                                   |                                                                                                                           |
| 11:45                                                              | Gerd Gemmecker                                    | Ausbildung im Bereich NMR-Spektroskopie an der TU München                                                                 |
| 12:05                                                              | Sebastian Kemper                                  | Praktische NMR Erfahrung im Masterstudium                                                                                 |
| 12:25                                                              | Julia Wirmer-Bartoschek                           | Analyse des CO2-Fußabdrucks von NMR-Einrichtungen                                                                         |
| 12:45                                                              | Mittagspause                                      |                                                                                                                           |
| Session 2: Metabolomics (Hörsaal B) / Chair R. Bachmann            |                                                   |                                                                                                                           |
| 14:00                                                              | Thorsten Mix                                      | Generisches Authentizitätsscreening von Whisky mittels <sup>1</sup> H-NMR-Spektroskopie und Random-Forest-Algorithmus     |
| 14:20                                                              | Niels Karschin                                    | Advanced Chemical Profiling – Eine automatisierte Lösung zur Identifizierung und Quantifizierung von Mischungskomponenten |
| 14:40                                                              | Jan Teipel                                        | Untersuchungen zur Cannabis-Analytik mittels 1H-qNMR zur Umsetzung des Konsumcannabisgesetzes                             |
| 15:00                                                              | Kaffeepause (Seminarraum AC 2/3 und 4)            |                                                                                                                           |
| Session 3: Forschung und Anwendung (Hörsaal B) / Chair: C. Richter |                                                   |                                                                                                                           |
| 15:40                                                              | Ilja Shenderovich                                 | Utilizing NMR to Elucidate Protonation and Proton Transfer Mechanisms                                                     |
| 16:00                                                              | Wolf Hiller                                       | Molmassenbestimmung von kleinen und großen Molekülen mittels DOSY                                                         |
| 16:20                                                              | Dirk Michalik                                     | Laser to the Magnet                                                                                                       |
| 16:40                                                              | Kaffeepause (Seminarraum AC 2/3 und 4)            |                                                                                                                           |
| 17:15                                                              | Treffen der AG Kleine Moleküle (GDCh) (Hörsaal B) |                                                                                                                           |
| 18:30                                                              | Ende von Tag 1                                    |                                                                                                                           |
| 19:00                                                              | Arbeitsessen in der Taverna Romana                |                                                                                                                           |

2. Tag 19. 03. 2025

| UHRZEIT                                                                | REFERENT/IN                            | TITEL                                                                                                                                                                                                                                                               |
|------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Session 4: Forschung und Anwendung II (Hörsaal B) / Chair: N. Schlörer |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 9:30                                                                   | Peter Schmieder                        | Wo sitzt das Deuterium?                                                                                                                                                                                                                                             |
| 9:50                                                                   | Harald Todt                            | Advanced Benchtop NMR for Excipients Analysis, Molecular Weight Determination and Multi-Nuclear Reaction Monitoring                                                                                                                                                 |
| 10:10                                                                  | Emmeline Barbet-Massin                 | The mg challenge – Pushing the limits of routine NMR                                                                                                                                                                                                                |
| 10:30                                                                  | Balvinder Singh                        | Probing Drug Loading in Carriers Using Extended Relaxation in NMR                                                                                                                                                                                                   |
| 10:50                                                                  | Kaffeepause (Seminarraum AC 2/3 und 4) |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Session 5: Theorie (Hörsaal B) Chair: J. Liermann                      |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 11:30                                                                  | Gerd Rheinwald                         | Computer Assisted Structure Elucidation (CASE) Workflows, Problems and Capabilities                                                                                                                                                                                 |
| 11:50                                                                  | Dimitri Domnjuk                        | Vorhersage von <sup>31</sup> P-Verschiebungen                                                                                                                                                                                                                       |
| 12:10                                                                  | Michael Fechtelkord                    | Bestimmung der chemischen Verschiebungen von <sup>29</sup> Si, <sup>27</sup> Al und <sup>19</sup> F für Muskovite, Trilithionite und Polyolithionite mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT) WIEN2k-Berechnungen und Vergleich mit experimentellen NMR-Verschiebungen |
| 12:30                                                                  | Burkhard Luy                           | (BIG-)BIRDS dancing TANGO to the BANGO: An overview of old bilinear rotation elements and novel improvements                                                                                                                                                        |
| 12:50                                                                  | Schlusswort                            |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 13:00                                                                  | Mittagspause                           |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Workshops                                                              |                                        |                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 14:00                                                                  | Peter Bellstedt                        | LOGS für Messfacilities &Automatisierte Analysen mit Mnova (MGears und Mnova Hub) (Hörsaal B)                                                                                                                                                                       |
| 14:00                                                                  | Claire Dickson                         | Integral and qNMR: JASON and SMILEQ (Hörsaal C)                                                                                                                                                                                                                     |
| 15:15                                                                  | Luc Patiny                             | Auswertung mit NMRium (Hörsaal B)                                                                                                                                                                                                                                   |
| 15:15                                                                  | Bert Heise                             | Aus dem Nähkästchen vom NMR-Service: Fehlerquellen und deren Behebung (Hörsaal C)                                                                                                                                                                                   |
| 16:15                                                                  | Ende von Tag 2                         |                                                                                                                                                                                                                                                                     |