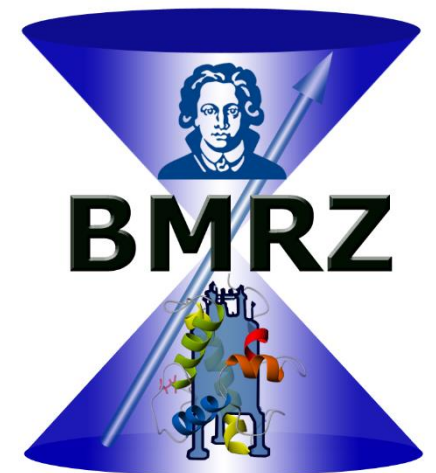


13:15 Uhr: „Datenspeicherung, -archivierung und -annotierung am Beispiel des internationalen Covid19-NMR-Netzwerks.“ Prof. Dr. Harald Schwalbe, Johann Wolfgang Goethe Universität Frankfurt

**Goethe-University-Frankfurt
(GUF, Instruct-ERIC)**



Wo braucht es ELN?

Organisches Grundpraktikum

Chemie (60-80 Studenten pro Jahr)

Biochemie, Biologie, Bioinformatik, Biophysik

(200 Studeten pro Jahr)

Modul "Präparative Organische Chemie"

Praktikum Organische Chemie

Kursteil Fachinformation"

Inhalt

Die Spektroskopie-Kurse umfassen die Kursteile UV/IR Spektroskopie, NMR Spektroskopie und Fachinformation. **Der Besuch aller Kurse ist verpflichtend!** Die Kursunterlagen (Skript, Übungsaufgaben und Links zu den Datenbanken und weiteren Informationsquellen) werden erst nach Einschreibung auf der Lernplattform OLAT in den Kurs sichtbar.

Der Kursteil Fachinformation befasst sich mit der Recherche in Faktendatenbanken und ist in einen Vorlesungsteil und eine Übung gegliedert. Zur Bearbeitung der Übungsaufgaben ist ein Zugang zu SciFinderScholar notwendig.

Termin

Der Termin wird noch bekanntgegeben.

Vor der allerersten Nutzung der Web-Version des SciFinders ist die Registrierung bei CAS als Nutzer erforderlich. Folgende Voraussetzungen müssen gegeben sein: (1) man muß sich im Uni-Netz befinden und (2) kann die Anmeldung nur mit gültiger Uni-Email-Adresse durchführen. Link zur Anleitung:

http://info.ub.uni-frankfurt.de/info.html?db_id=1076&start=S&end=S&next_program=alph_liste.html

SciFinderScholar kann von jedem Rechner innerhalb des Universitätsnetzes benutzt werden. Alternativ ist SciFinderScholar standortunabhängig über den Log-In ins Bibliothekssystem

KONTAKT



**Prof. Dr.
Harald Schwalbe**

Raum: N160/3.14
Tel.: 069 798-29737

✉ Schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de

KONTAKT



Dr. Jan-Peter Ferner
Praktikumsleiter

Raum: N160/3.13
Tel.: 069 798-29137

✉ Ferner@nmr.uni-frankfurt.de

Wo fallen Forschungsdaten an?

NMR Serviceabteilung

5 Spektrometer Tag-Nacht-Betrieb

20 Gruppen, ~ 100 aktive User (DoktorandInnen etc)

Automatische Probenwechsler

Eigenständiges Ansetzen von Routinedatensätzen

Bereitstellung der Datensätze

Abrechnung der Kosten für die Messung

schwalbe group

Home Group Members Research Structures Publications Equipment Teaching Links Contact

NMR-Serviceabteilung

Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie

Leitung:
 Dr. Christian Richter (29353) email: ric (at) nmr.uni-frankfurt.de
 Dr. Julia Wirmer-Bartoscheck (29137) email: wirmer (at) nmr.uni-frankfurt.de

Mitarbeiter:
 Gabriele Sentis (29122) email: sentis (at) pharmchem.uni-frankfurt.de
 Dr. Sridhar Sreeramulu (29122) email: sridhar (at) nmr.uni-frankfurt.de
 Termine für die Einführung zum selbständiges Messen im NMR-Service nach Vereinbarung

Rules

Messauftrag

Spektrometer:

250 MHz	Nur 1H1D-NMR Spektren
300 MHz	1D-NMR für alle Kerne (1H, 13C, 11B, 31P, 19F, 29Si usw.)
400 MHz	1D und 2D NMR, während dem Semester reserviert für OC1-Grundpraktikum
500 MHz	1D und 2D NMR für alle Kerne mit mehr Empfindlichkeit durch BBO-Prodigy Probenkopf
600 MHz	1D und 2D NMR (1H, 13C, und 15N)

Kontakt:
 FB 14: Chemische und Pharmazeutische Wissenschaften
 Goethe-Universität Frankfurt | Campus Riedberg
 N160-B13 -B16 | Max-von-Laue-Strasse 7
 60438 Frankfurt am Main
 Tel.: ++49 69 798 29122
 Fax.: ++49 69 798 29515

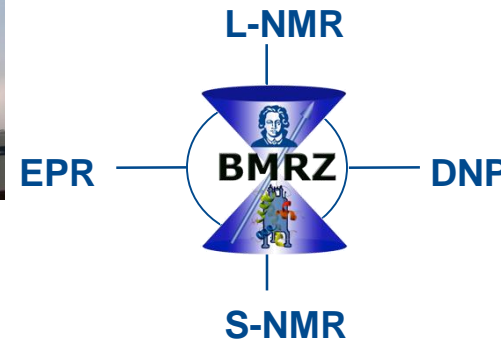
Wo fallen Forschungsdaten an?

BMRZ ist ein europäisches Großforschungszentrum

Gruppen aus der Uni Frankfurt, (Uni Mainz), TU Darmstadt, Uni Jena



BMRZ: Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz - ist ein technisches Zentrum, in dem alle Aspekte der biomolekularen magnetischen Resonanzspektroskopie entwickelt und angewendet werden.



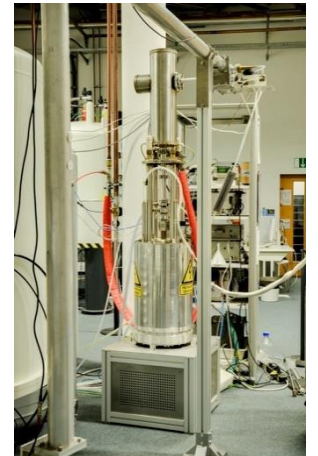
950 MHz (liquid-state)



850 MHz (solid-state)



180 GHz G-Band



260 GHz Gyrotron

- bündelt Magnetresonanz-Aktivitäten an der Goethe-Universität
- betreibt das größten europäischen Magnetresonanzentrums
- entwickelt Magnetresonanzverfahren an der Spitze der Forschung
- untersucht wissenschaftliche Fragestellungen von hoher biomedizinischer Relevanz
- bildet die nächsten Generation von Magnetresonanzforschern aus
- trägt zur forschungsorientierten Lehre für BSc- und MSc-Studierende bei

Gruppenleiter (2022): Clemens Glaubitz, Harald Schwalbe, Volker Dötsch
Thomas Prisner, Jens Wöhnert, Andreas Schlundt, Boris Fürtig,
Ute A. Hellmich (Jena)



300 MHz (7.0T)



500 MHz (11.8T)



600 MHz (14.1T)



950 MHz (22.3T)



WB400MHz (9.4T)

Facility Management:

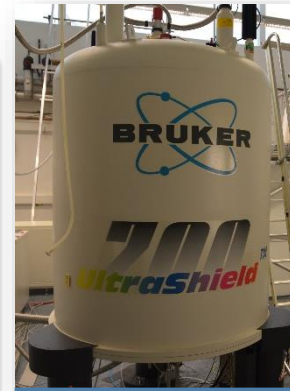
Johanna Becker-Baldus (NMR – Solids)
Christian Richter (NMR – Liquids, – Service)
Frank Löhr (NMR – Liquids)
Elke Duchardt-Ferner (NMR – Liquids)
Burkhard Endeward (EPR)
Julia Wirmer-Bartoschek (NMR – Service)
Manfred Strupf (Technical Support)
Gabriele Sentis (NMR – Service)
Sridhar Sreeramulu (NMR – Service)
Jan-Peter Ferner (NMR in der Lehre)
Simone Kobylka (Administration)

NMR- Magnet:

standard bore: 2x500, 4x600, 700,
2x800, 900 & 950 MHz
1.2 GHz (Lieferung Ende 2022)
wide bore: 2x400, 600 & 850 MHz
Gyrotron: 262 GHz
NMR Service: 250, 300, 2x400, 500, 600 MHz
Lehre only: 300 MHz

Spezialausrüstung:

10 CryoProbes
(TXI, TXO, TCI, QCI-P, QCI-F
1.7mm TCI, 2 Prodigy)
Helium-Rückgewinnung
DNP, Fast-MAS
Automatische Abfüllung
Screening-Plattform



700 MHz (16.4T)



WB850 MHz (19.9T)



600 MHz (14.1T)

Wo fallen Forschungsdaten an?


BMRZ ist ein europäisches Großforschungszentrum

Gruppen aus der Uni Frankfurt, (Uni Mainz), TU Darmstadt, Uni Jena



<https://bmrz.logs-repository.com/schwalbe/#>





NMR of SARS-CoV-2
Covid19-nmr.de
March 26th 2020

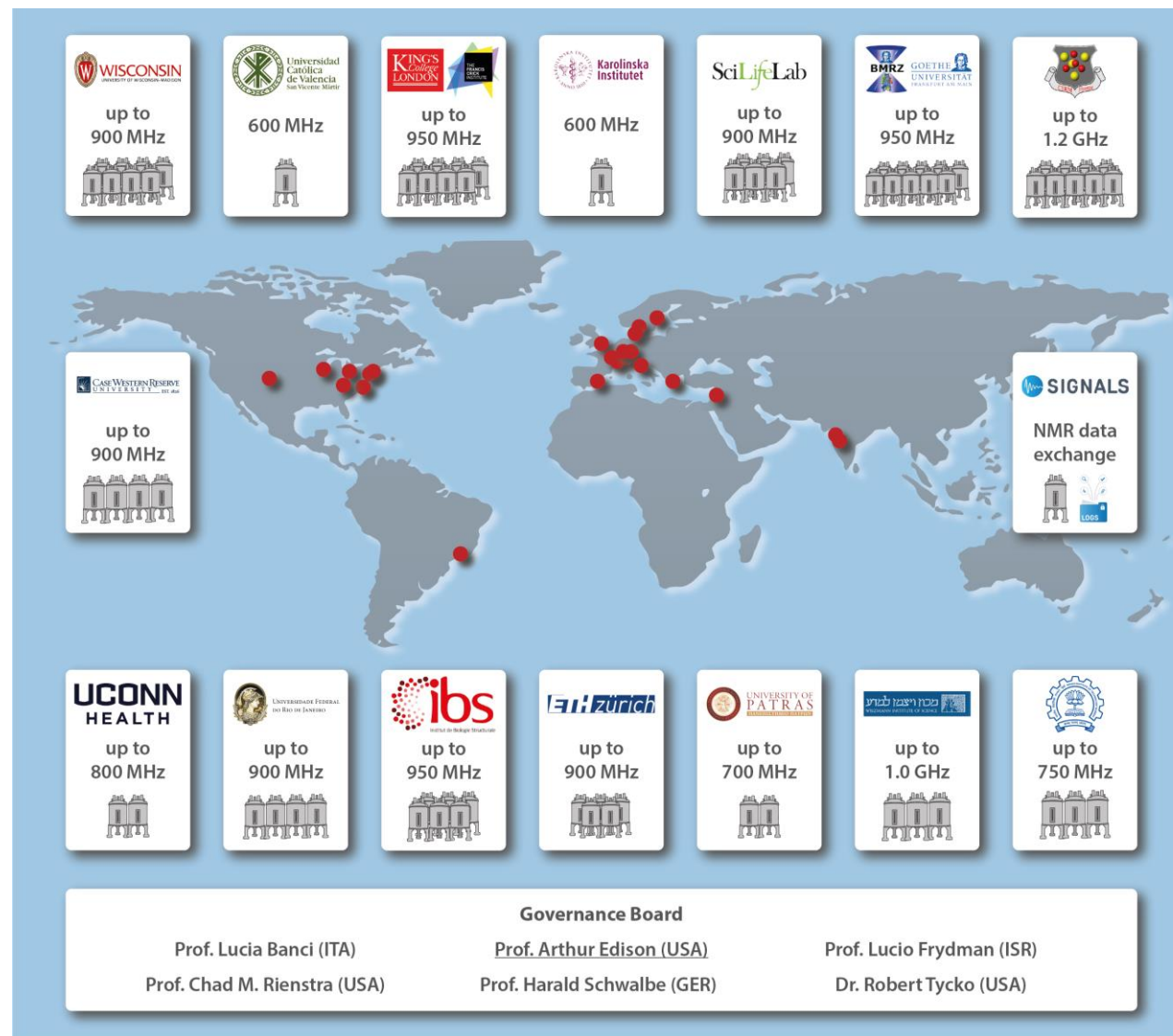
The Network



GU Frankfurt + TU Darmstadt Core Team

B. Fürtig, M. Hengesbach, A. Schlundt, H. Schwalbe
 J. Weigand, J. Wöhnert
 E. Duchardt-Ferner, J. Ferner, F. Löhr, N. Qureshi, C. Richter, K. Saxena, S. Sreeramulu, A. Wacker, J. Wirmer-Bartoschek

GU Frankfurt Partner
 V. Dötsch, M. Göbel, S. Knapp, S. Ciesek



Documentation/Communication
 C. Hacker, M. Hähne



RNA Cheminformatics
 M. Blommers



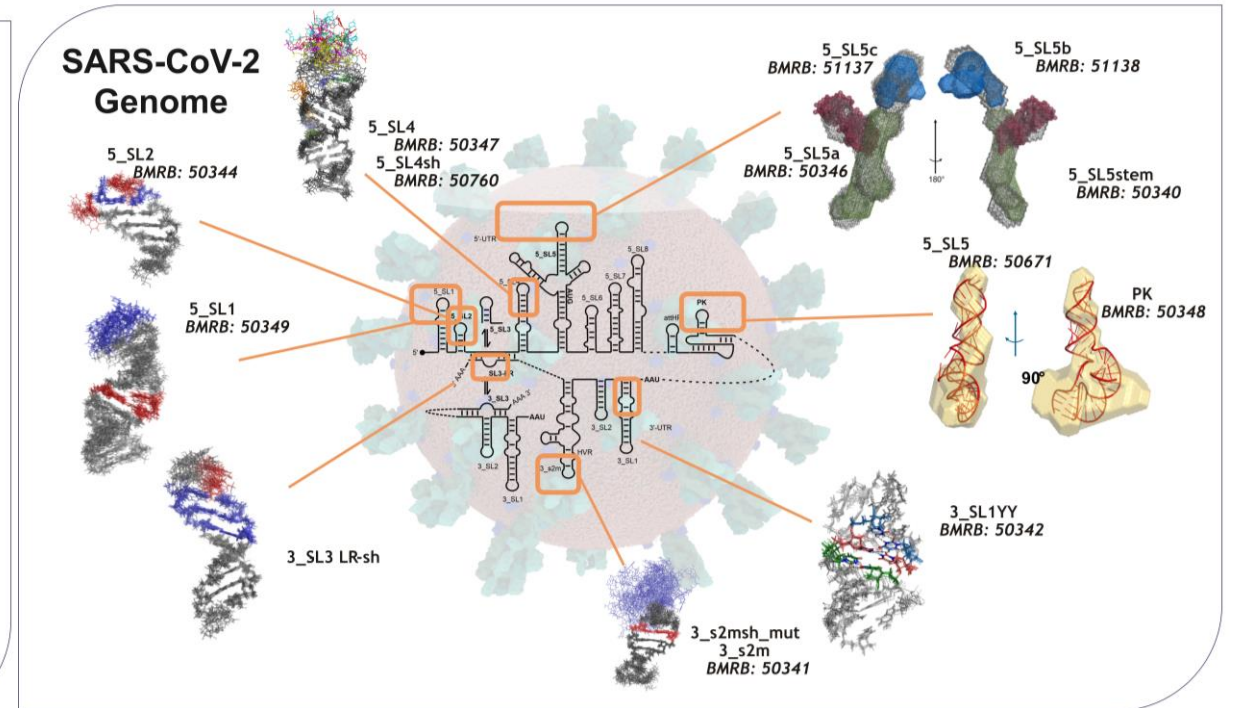
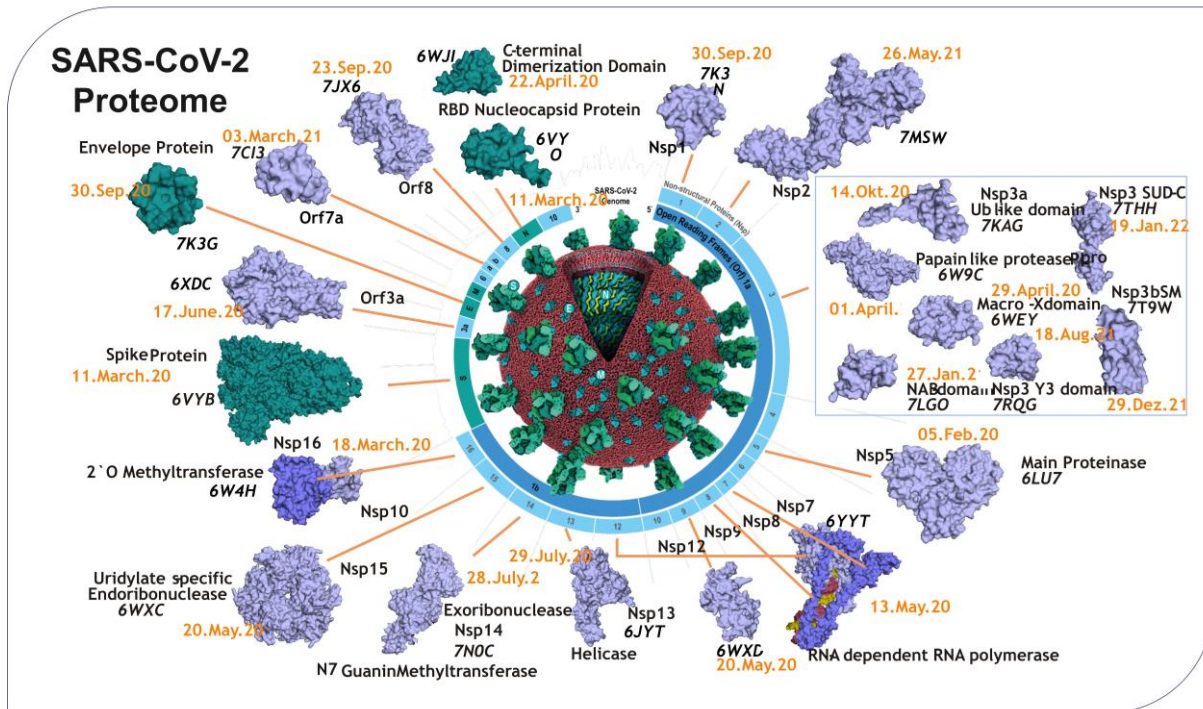
RNA ligand libraries
 A. Hargrove



RNA Bioinformatics
 E. Westhof



Integrated Structural Biology of the SARS-CoV-2 proteome and genome



instruct-eric.org



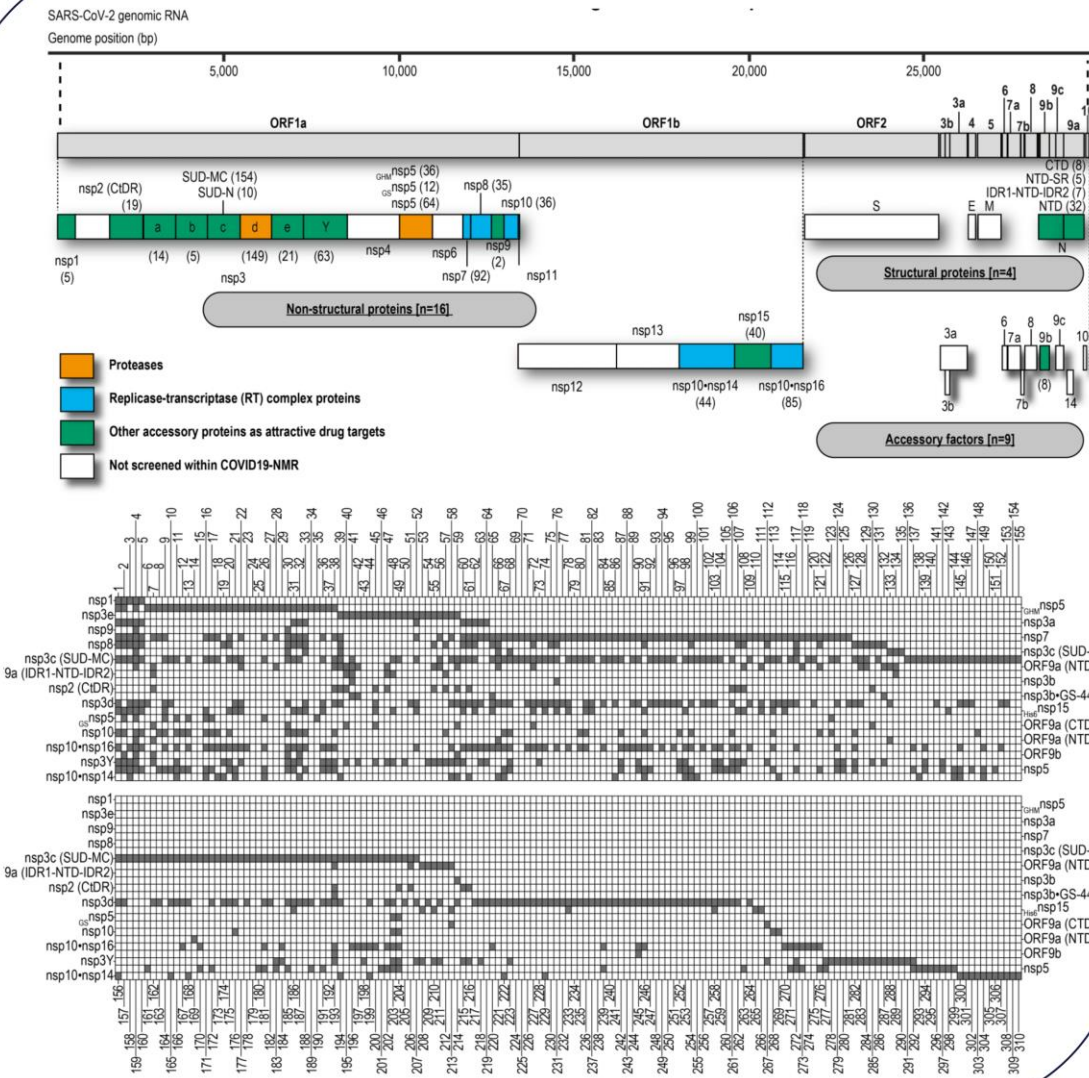
admin@instruct-eric.org



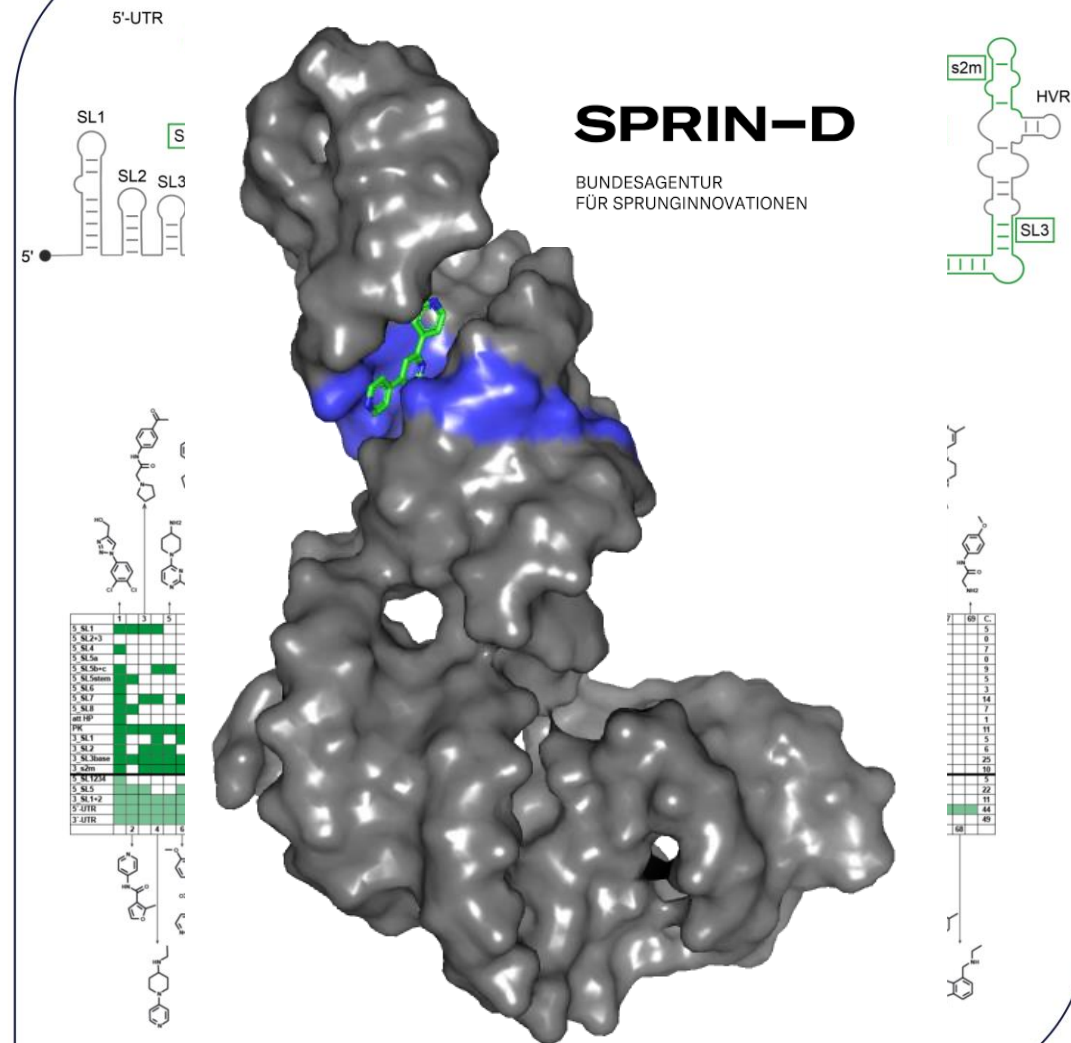
@instructhub



Fragment screening SARS-CoV-2 Proteins



Fragment screening of SARS-CoV-2 genome (RNA)



Core Team

Core Team

Principal Investigators



Dr. Boris Fürtig
Goethe University Frankfurt, BMRZ
NMR-Spectroscopy of Complex RNA systems



Dr. Martin Hengesbach
Goethe University Frankfurt, BMRZ
RNA Biology, RNP structural dynamics



Dr. Andreas Schlundt
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Integrative Structural Biology of RNA-Protein Complexes



Prof. Dr. Harald Schwalbe (Coordinator)
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Structural Biology, NMR-Spectroscopy



Dr. Julia E. Weigand
Technical University of Darmstadt
RNA biochemistry



Prof. Dr. Jens Wöhnert
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Structural Biology, NMR-Spectroscopy

Research Scientists



Dr. Elke Duchardt-Ferner
Goethe University Frankfurt, BMRZ
RNA Assignment and Structure Calculation



Dr. Jan Ferner
Goethe University Frankfurt, BMRZ
RNA Assignment and Structure Calculation



Dr. Frank Löhr
Goethe University Frankfurt, BMRZ
NMR spectroscopy of proteins and RNA



Dr. Nusrat Qureshi
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Protein Production



Dr. Christian Richter
Goethe University Frankfurt, BMRZ
NMR spectroscopy of RNA, Proteins and small molecules



Dr. Krishna Saxena
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Protein Production



Dr. Sridhar Sreeramulu
Goethe University Frankfurt, BMRZ
Ligand Screening



Dr. Anna Wacker
Goethe University Frankfurt
RNA Production



Dr. Julia Wirmer-Bartoschek
Goethe University Frankfurt, BMRZ
RNA Assignment and Structure Calculation

covid19-nmr.de



[About](#) [News](#) [Results](#) [Publications](#) [Participants](#) [Search](#)



[Mission](#) [News](#) [RNA Results](#) [Protein Results](#) [Screening Results](#) [Participants](#)

Welcome to the COVID19-NMR project

A joint venture project to fight Corona.

18 Countries 236 People 26 RNA Projects 28 Protein Projects

In March 2020, we initiated this network and in September 2022 we achieved our milestones. Therefore we transform our network towards a discussion group on "Virus research by NMR and beyond". We wish to thank you and all supporters for your enthusiasm and tremendous work.

[Read more](#)

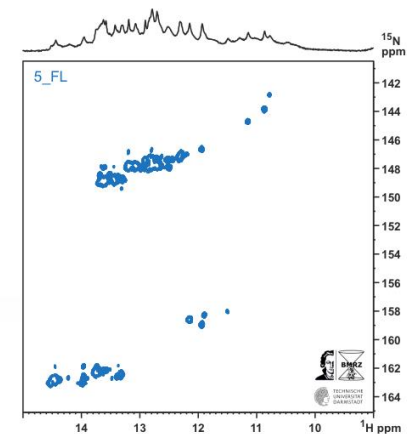


5' UTR full-length

NMR Spectra recorded for 5'UTR full-length:

¹⁵N TROSY-HSQC

[Preview & Download Data](#)



¹H, ¹⁵N TROSY-HSQC (imino) spectrum of 5'UTR full-length: 100 μM of U-labeled RNA (472 nt, 25 mM potassium phosphate buffer at pH 6.2, 50 mM 5% D₂O) measured at 293 K on a 800 MHz Spectrometer.

News

The COVID19-NMR Consortium: A Public Report on the Impact of this New Global Collaboration

Recently we published a viewpoint article in Angew. Chem which describes the work of the Covid19-NMR Consortium. The Article discusses how the global network organized itself to rapidly contribute

Transformation of the Network

In March 2020, we initiated the network covid19-nmr and set out the following milestones: In September 2022, we have achieved these milestones and published the following paper. We wish to thank everyone who contributed to our joint efforts. After consultation with

SARS-CoV-2 RNA-targeted antivirals paper published

A new paper from Covid19-NMR participants was recently published in "Science Advances". RNA-targeted antivirals have been identified using cytotoxicity and SARS-CoV-2 antiviral assays, NMR profiling, virtual ligand screening and small-molecule docking. Amilorides inhibit



COVID19-NMR PROJECT, www.covid19-nmr.de

AUGUST 27th 2020

Instruct Member Countries

Instruct-ERIC is the single point of access to technology and expertise for structural biology research.

Instruct has 16 Members that each pay an annual subscription to allow their scientists to access the range of services that are available through Instruct.



Belgium



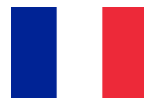
Czech Republic



EMBL



Finland



France



Greece



Israel



Italy



Latvia



Lithuania



Netherlands



Portugal



Slovakia



Slovenia



Spain



UK



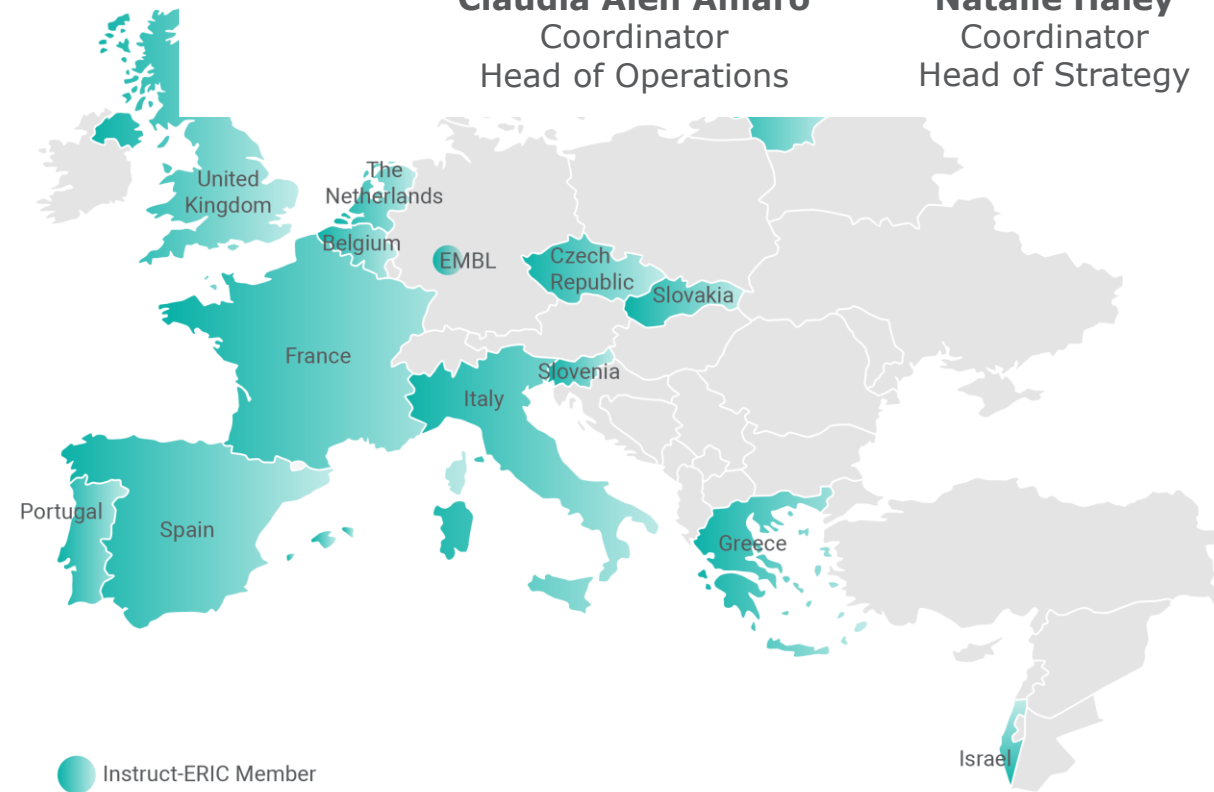
Director



Claudia Alen Amaro
Coordinator
Head of Operations



Natalie Haley
Coordinator
Head of Strategy



instruct-eric.org



admin@instruct-eric.org



[@instructhub](https://twitter.com/instructhub)