



PNMR : FROM RAGS TO RICHES

Challenges and potentials of NMR on paramagnetic molecules

Schedule

Saturday, July 4th

Workshop - Part I

Prague Congress Centre:

5. května 65, 140 21 Prague 4, Czech Republic

Club D Room, 1st Floor.

10h	Registration
10h45	Martin Kaupp (TU Berlin) Welcome address
11h00-12h00	First session: Spin relaxation Danuta Kruk (University of Warmia and Mazury, Olsztyn, Poland) <i>Theory and modelling of spin relaxation</i> Shehryar Khan (Stockholm University, Sweden) <i>Zero-field splitting dynamics from first principles</i> Syed Awais Rouf (Oulu University, Finland) <i>NMR Chemical Shifts in Paramagnetic Molecules Using First-Principles Approach</i> Peter Cherry (University of Bratislava, Slovakia) <i>A fully relativistic pNMR implementation</i>
12h00- 14h00	Lunch break with the participation of STELAR, Club Foyer
14h00-14h45	Second session: Paramagnetic solids Michael Deschamps (CEHMTI, CNRS, Orleans, France) <i>Paramagnetic solids and fast magic-angle spinning: a revolution through faster revolutions</i> Kevin J. Sanders (ENS Lyon, France) <i>New pNMR methods for paramagnetic materials for batteries</i> Andrea Bertarelli (ENS Lyon, France) <i>Dynamics and reactivity at the core of a paramagnetic metalloprotein</i>
15h00-15h45	Third session: Battery materials and supported catalysts Andrew J. Pell (Cambridge University, UK) <i>Theory and modeling of paramagnetic shifts in battery materials and supported catalysts</i> Arobendo Mondal (TU Berlin, Germany) <i>Periodic solid-state calculations of paramagnetic NMR shift tensors using CP2K</i> Roberta Pigliapochi (Cambridge University, UK) <i>NMR study of Periodic Paramagnetic Systems</i>
15h45-16h15	Coffee break

16h15-17h00

Fourth session: Drug discovery

Giacomo Parigi (CIRMMP, Florence, Italy)

Paramagnetic tags for drug discovery

Mathilde Lescanne (Leiden University, Netherlands)

Protein assignment using paramagnetic effects with PARAssign

Puneet Ahuja (Astra Zeneca, Molndal, Sweden)

Structural determination of ligands bound to pharmaceutical target proteins by paramagnetic NMR

17h15-18h00

Fifth session: Paramagnetic proteins in solution and in crystals

Moreno Lelli (ENS Lyon, France)

Paramagnetic proteins in solution and in crystals

Tobias Schubeis (GIOTTO, Florence, Italy)

Paramagnetic effects for metalloprotein structures in membranes and in crystals

Witold Andrzej (CIRMMP, Florence, Italy)

An integrated structural approach to flexible multidomain proteins

20h00-
onwards

Sponsored dinner (BRUKER BioSpin)

Francouzská restaurace (<http://www.francouzskarestaurace.cz/en/>)

Sunday, July 5th

Workshop - Part II

Prague Congress Centre:

5. kvetna 65, 140 21 Prague 4, Czech Republic

Club D Room, 1st Floor.

9h30-11h30

pNMR : from rags to riches

Challenges and potentials of NMR on paramagnetic molecules

Chair : Christophe Copéret (ETH Zurich)

Frank Köhler (TU Munich)

NMR and Magnetic Materials

Juha Vaara (Oulu University, Finland)

Remarks on pNMR chemical shift and relaxation theory

Claudio Luchinat (GIOTTO, Florence, Italy)

Joint/disjointed refinement of crystal/solution structures using paramagnetic NMR data

Frank Engelke (BrukerBiospin, Germany)

Fast MAS probes for paramagnetic materials

11h30-12h30

Brunch, Club Foyer

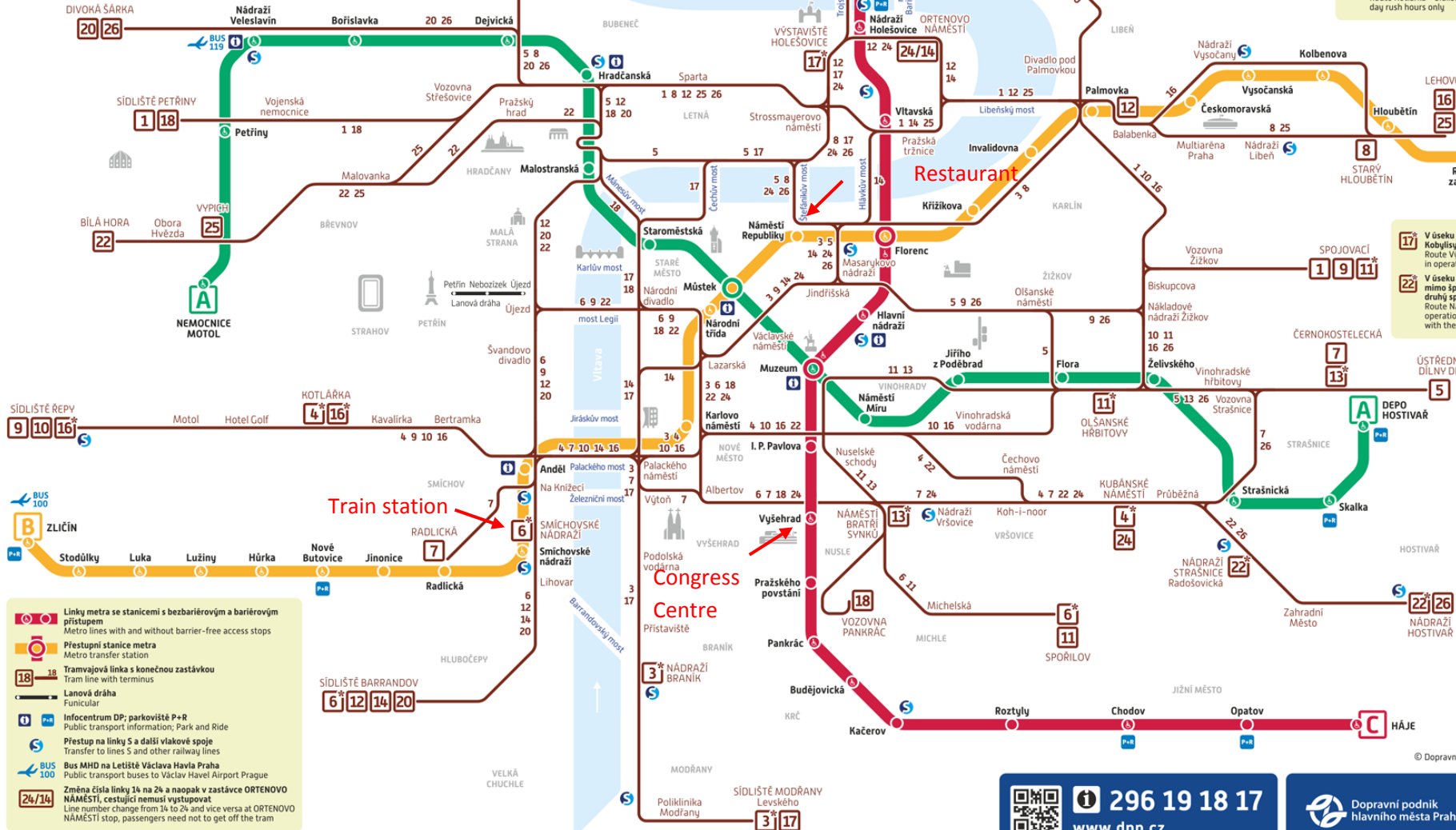


TRAMVAJE a METRO v Praze

Trams and Metro in Prague

Orientační plán – Denní provoz – Trvalý stav – duben 2015
Map – Daytime operation – Permanent situation – April 2015

Letiště Václava Havla Praha
Václav Havel Airport Prague
BUS 100, 119



- 3*** V úseku Nádraží Braník – Sídliště Modřany (Levského) je v provozu pouze ve špičkách pracovních dnů Route Nádraží Braník – Sídliště Modřany (Levského) in operation during work day rush hours only
- 4*** Je v provozu pouze v ranní a odpolední špičce pracovních dnů In operation during morning and afternoon rush hours only
- 6*** V provozu pouze v pracovní dny cca od 6:00 do 20:00 hodin, v úseku Smíchovské nádraží – Sídliště Barrandov je v provozu pouze v ranní špičce In operation on work days from approximately 6 AM to 8 PM only, route Smíchovské nádraží – Sídliště Barrandov in operation during morning rush hours only
- 11*** V úseku Olšanské hřbitovy – Spojevací je v provozu pouze v pracovní dny cca od 6:00 do 20:00 hodin In operation on work days from approximately 6 AM to 8 PM only
- 13*** Je v provozu pouze v pracovní dny cca od 6:00 do 20:00 hodin In operation on work days from approximately 6 AM to 8 PM only
- 16*** V úseku Kotlářka – Sídliště Řepy je v provozu pouze ve špičkách pracovních dnů Route Kotlářka – Sídliště Řepy in operation during work day rush hours only

- 17*** V úseku Východní Holesovice – Vozovna Kobylisy je v provozu pouze každý druhý spoj Route Východní Holesovice – Vozovna Kobylisy in operation for every other connection only
- 22*** V úseku Nádraží Strašnice – Nádraží Hostivař mimo špičku pracovních dnů jede pouze každý druhý spoj Route Nádraží Strašnice – Nádraží Hostivař in operation for every other connection only, with the exception of work day rush hours

© Dopravní podnik hl. m. Prahy, akciová společnost



296 19 18 17
www.dpp.cz



Dopravní podnik hlavního města Prahy



PRAŽSKÁ INTEGROVANÁ DOPRAVA

Maps, timetables, fares and route planning are available in English on the Prague Public Transport website www.dpp.cz/en/

How to access Prague Congress Centre

By underground railway

The Prague Congress Centre is adjacent to the **Vyšehrad** station on Line C of the Prague underground railway network

By tram

The nearest tram stop is **Svatoplukova**. It is in Nusle, directly underneath Nusle Bridge (Nuselský most). Tram numbers 7, 18 and 24 stop here. After getting off the tram walk under the railway line and up the steps through the park straight to the Congress Centre which you will be able to see above you.

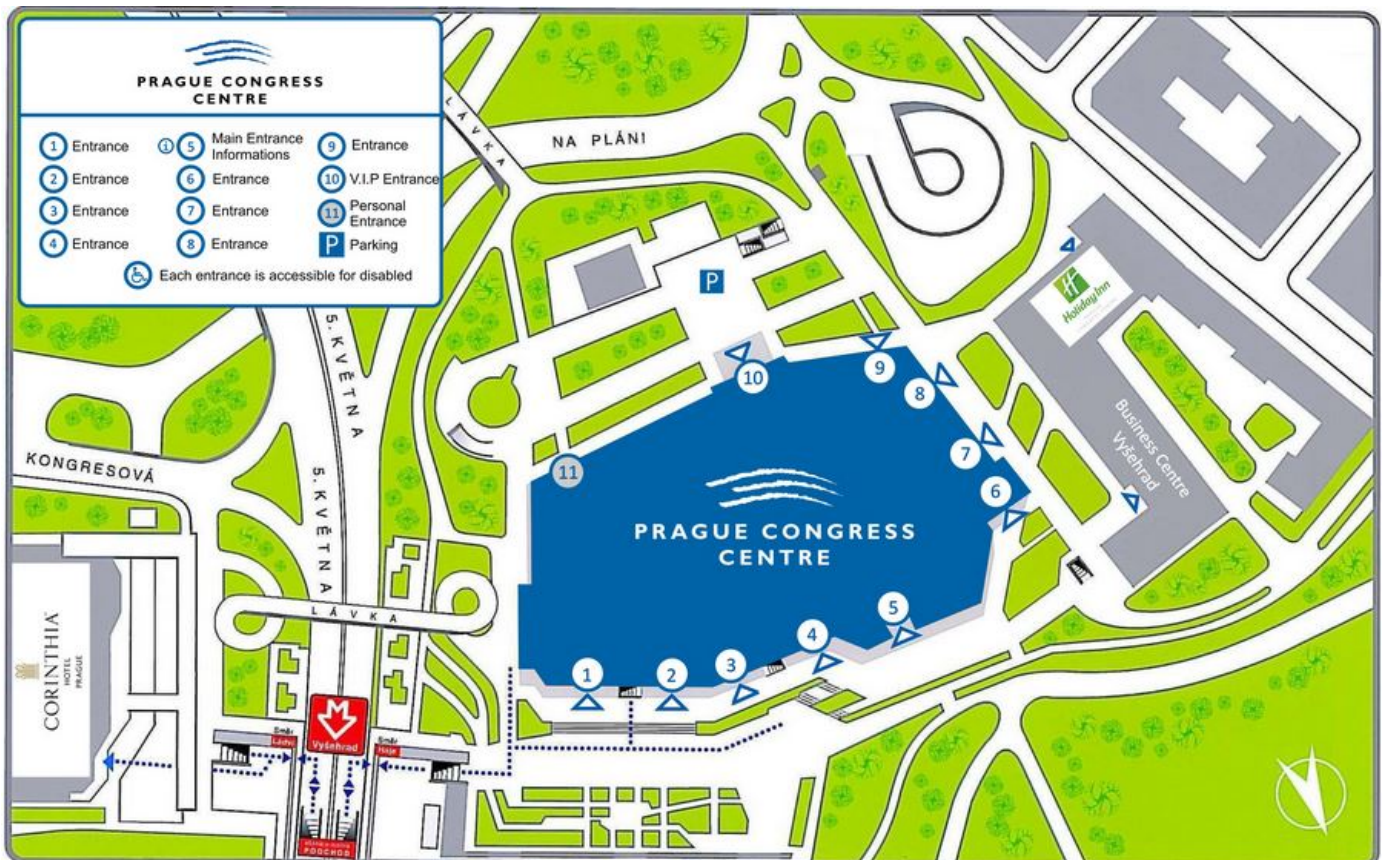
By bus

From the bus station **Florenc** travel 4 stops by metro in the direction of Háje (line C).

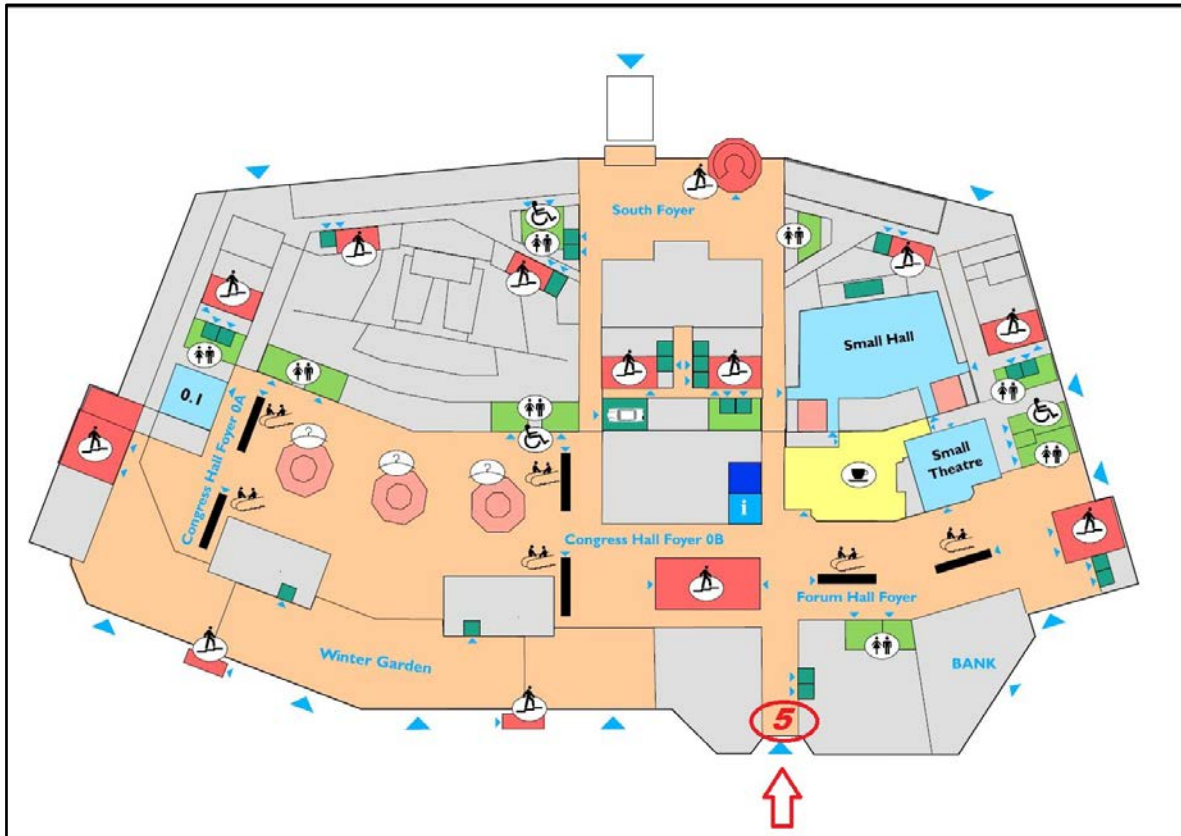
By train

From the Main Railway Station travel 3 stops by metro in the direction of Háje (line C).

Map of the Congress Centre Entrances :



Please use **entrance nb. 5** and follow signposting onsite.



Congress Centre Ground Floor



Congress Centre First Floor

Registration will take place in the 'Club foyer', in front of Club room D.

The workshop will take place in the room 'CLUB D', as shown above.

How to access the Francouzská restaurant :

The restaurant closest Tram, Bus and Metro Station is **Náměstí Republiky**.

The adress is Náměstí Republiky 5, 110 00, Praha 1.

From the Congress Centre :

By Metro :

It takes 13 min in metro. The fare is 24,-CZK (Tariff short-term local ticket).

From Vyšehrad station take METRO C, in direction of Letňany, to Florenc.

From Florenc, take METRO B, direction Zličín, to Náměstí Republiky.

By Tram :

Duration 13 min. Price 24,-CZK

Tram n° 24 (in direction of Ortenovo náměstí) direct from Svatoplukova to Masarykovo nádraží.



The restaurant.

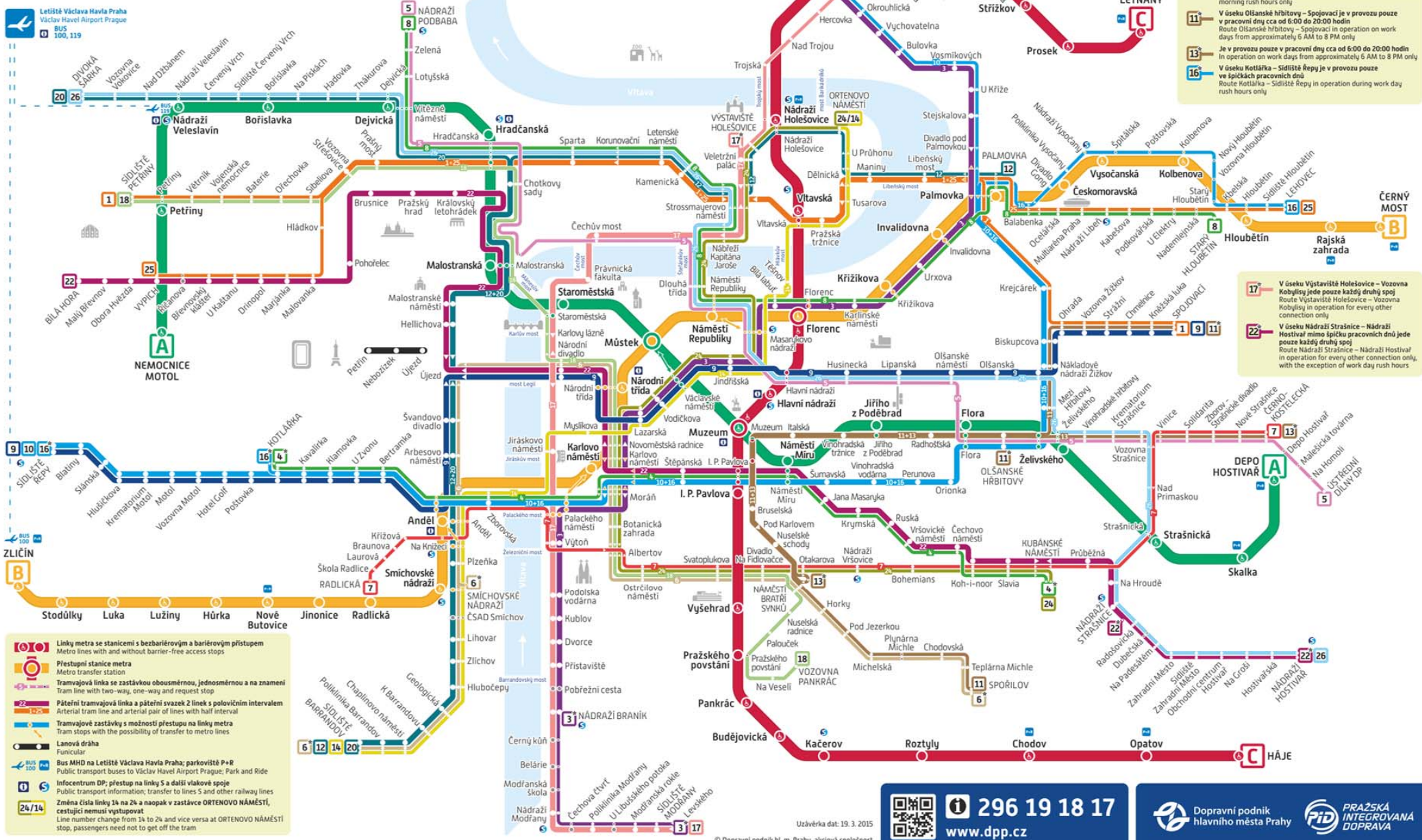


TRAMVAJE a METRO v Praze

Trams and Metro in Prague

Všechny zastávky – Denní provoz – Trvalý stav – duben 2015
All stops – Daytime operation – Permanent situation – April 2015

Letiště Václava Havla Praha
Václav Havel Airport Prague
BUS 100, 119



Uživatelé dat: 19. 3. 2015
© Dopravní podnik hl. m. Prahy, akciová společnost



296 19 18 17
www.dpp.cz



Dopravní podnik hlavního města Prahy



PRAŽSKÁ INTEGROVANÁ DOPRAVA



AUTOBUSOVÁ DOPRAVA Z LETIŠTĚ DO CENTRA

Denní provoz – Trvalý stav – duben 2015

BUS SERVICE FROM THE AIRPORT TO THE CITY CENTRE

Daytime operation – Permanent situation – April 2015

BUSVERBINDUNG VOM FLUGHAFEN INS ZENTRUM

Tagesverkehr – Regelmäßiger Betriebsablauf – April 2015

Letiště Václava Havla Praha
Václav Havel Airport Prague



Zrychlené autobusové linky PID
Rapid public BUS lines

Doba jízdy
Travel time

100 Letiště – Zličín (metro B) cca 15–20 min
Airport – Zličín (metro B)

119 Letiště – Nádraží Vešelavín (metro A) cca 13–17 min
Airport – Nádraží Vešelavín (metro A)

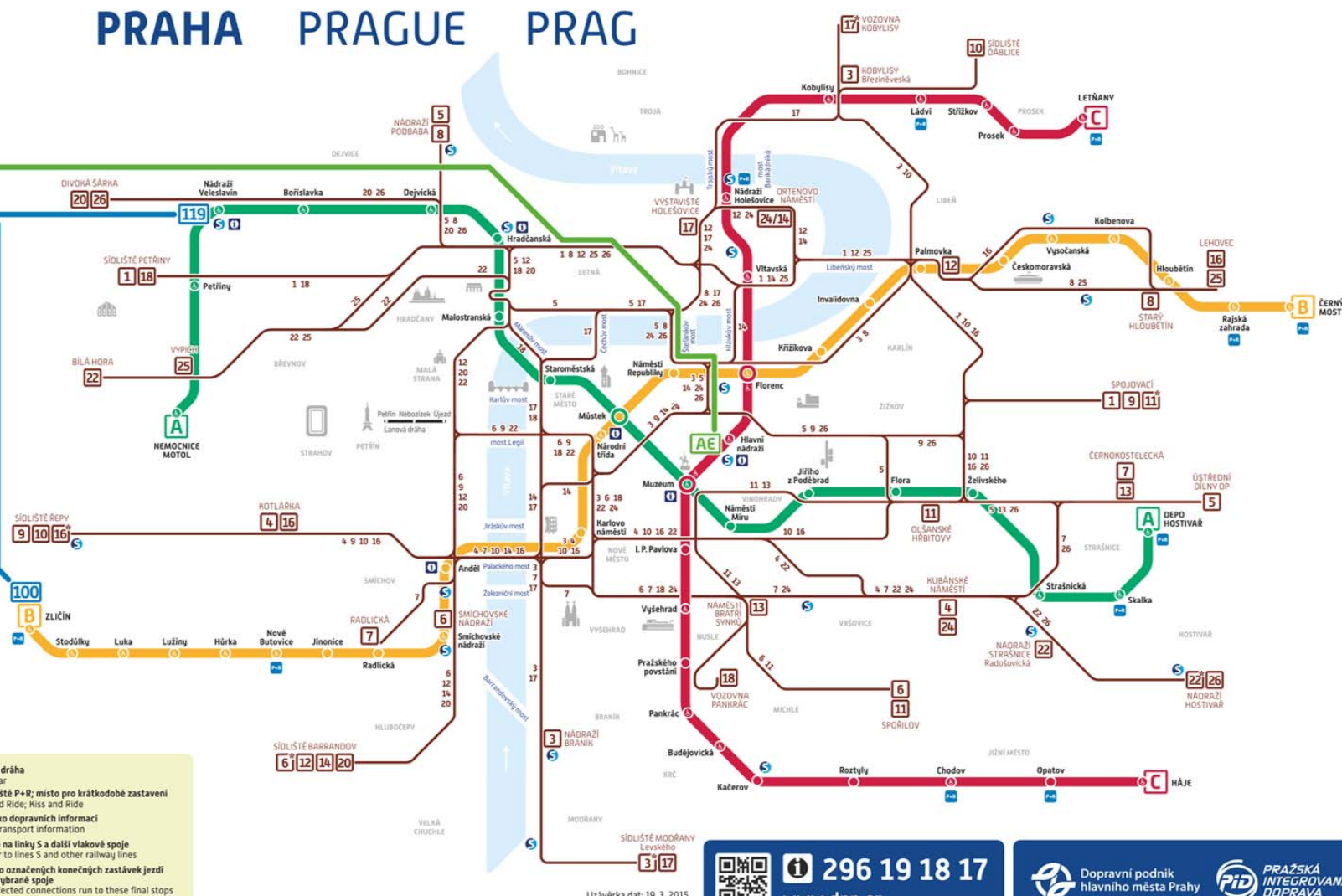
Zvláštní linka AIRPORT EXPRESS

Letiště – Hlavní nádraží
Special BUS line connection between
Prague airport and Prague Main Railway Station

AE Letiště – Náměstí Republiky (metro B) –
Masarykovo nádraží (metro B) – Hlavní nádraží (metro C)
Airport – Náměstí Republiky (metro B) –
Masarykovo nádraží (metro B) – Hlavní nádraží (metro C)
cca 30–50 min

Zvláštní jízdné – jízdenky u řidiče
Special fare – tickets are purchased from the driver

PRAHA PRAGUE PRAG



Linky metra se stanicemi s bezbariérovým
a barierovým přístupem
Metro lines with and without barrier-free
access stops

Přestupní stanice metra
Metro transfer station

Tramvajová linka s konečnou zastávkou
Tram line with terminus

Autobusová doprava z letiště do centra
Bus service from the airport to city centre

Lanová dráha

Funicular

Parkoviště P+R; místo pro krátkodobé zastavení
Park and Ride; Kiss and Ride

Středisko dopravních informací
Public transport information

Přístup na linky S a další vlakové spoje
Transfer to lines S and other railway lines

Do takto označených konečných zastávek jezdí
pouze vybrané spoje
Only selected connections run to these final stops

Uzávěrka dat: 19. 3. 2015

© Dopravní podnik hl. m. Prahy, akciová společnost



296 19 18 17
www.dpp.cz



Dopravní podnik
hlavního města Prahy



PRAŽSKÁ
INTEGROVANÁ
DOPRAVA

Transit at Václav Havel Airport Prague

The International Václav Havel Airport Prague is situated on northwest part of Prague, next to Kněževes and Přední Kopanina.

Transport to and from the airport is provided by buses of PIT and by the special bus AE (Airport Express).

More information : <http://www.dpp.cz/en/public-transit-to-prague-airport/>

