**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Bestimmung der chemischen Verschiebung und der Intensität von Signalen |
| Verantwortlich | Schaper, Klaus / Krenzer, Julius |
| Autor | Krenzer, Julius |
| Datum | 2021.05.04 |
| Learning Outcome | Die Studierenden können die Position und Intensität von Signalen in NMR-Spektren mithilfe von MestReNova bestimmen. |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video lernst Du, wie Du Signale in NMR-Spektren mit dem Programm MestReNova analysierst. Die Analyse beinhaltet die Bestimmung der chemischen Verschiebung und die Integration. |  |
|  | Screencast | Die Integration der Signale im 1H-NMR-Spektrum hilft bei der Strukturaufklärung, da der Wert des Integrals proportional zur Anzahl der Protonen ist. Aus den Positionen, also den chemischen Verschiebungen der Signale, erhältst Du wichtige Informationen über die Umgebung der Kerne. |  |
|  | Screencast | In diesem Video betrachten wir ein bereits referenziertes 1H-NMR-Spektrum einer unbekannten Substanz. Für eine bessere Übersicht kannst Du mit dem Shortcut „z“ und der linken Maustaste den Ausschnitt vergrößern. |  |
|  | Screencast | Die Positionen der Signale können automatisch oder manuell bestimmt werden. Zur automatischen Bestimmung wähle unter dem Reiter „Analysis“ die Funktion „Auto Peak Picking“. |  |
|  | Screencast | Wie im Spektrum zu sehen ist, sind alle Signale markiert und die chemischen Verschiebungen werden am oberen Rand des Spektrums angezeigt. |  |
|  | Screencast | Hier ist ein weiteres 1H-NMR-Spektrum gezeigt. Zunächst vergrößern wir den Ausschnitt.  Um die Positionen der Signale manuell zu bestimmen, nutze den Shortcut „k“. Durch Drücken der linken Maustaste und ziehen der Maus, kannst Du nun einen Bereich rot markieren. Beim Loslassen werden die Positionen alle Signale, deren Maxima bis in den roten Bereich hineinragen, bestimmt. So kannst du die relevanten Signale einzeln markieren. Signale, die unterhalb des roten Bereiches liegen, werden nicht markiert. Im gezeigten Beispiel können nur die beiden höchsten oder alle vier Signale markiert werden. |  |
|  | Screencast | Mit Rechtsklick und „Delete Peak“ können einzelne Markierungen entfernt werden. Dadurch wird das Spektrum übersichtlicher. |  |
|  | Screencast | Durch Linksklick auf eine Markierung, kannst Du Dir die chemischen Verschiebungen aller Signale in einer Tabelle anzeigen lassen. Um die korrekten Daten zu entnehmen, muss das Spektrum zuvor auf das Lösungsmittel oder einen internen Standard referenziert worden sein. |  |
|  | Screencast | Neben dem Bestimmen der Positionen, gehört das Integrieren der Signale zu den wichtigsten Schritten bei der Zuordnung der Protonen. Wähle dazu unter „Integrals“ „Manual“ oder benutze den Shortcut „i“. Positioniere den Zeiger am Rand des Signals und halte die linke Maustaste zum Markieren gedrückt. MestReNova integriert den markierten Bereich automatisch. Der Wert des Integrals wird unter dem Signal angezeigt. Das erste Integral wird dabei immer als 1 definiert. Wiederhole den Vorgang für alle Signale, die zu Deiner Probe gehören. Linke Maustaste drücken – ziehen – und wieder loslassen. |  |
|  | Screencast | Wenn du bereits eine Vermutung hast, durch wie viele Protonen ein Signal hervorgerufen wird, kannst du den Wert des Integrals mit Rechtsklick und „Edit Integral“ ändern. Dieses Triplett wird zum Beispiel durch eine Methylgruppe hervorgerufen. Das Integral wird daher als 3 definiert. Die Werte der anderen Integrale werden dann automatisch angepasst. |  |
|  | Screencast | Bei sauberen Spektren ergibt die Summe der Werte die Anzahl der Protonen. Anhand der Verschiebungen und der Integrale kann nun eine Zuordnung getroffen werden. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video hast Du gelernt, wie Du mit dem Programm MestReNova NMR‑Spektren analysierst, indem Du die Positionen der Signale bestimmst und deren Intensität durch Integration ermittelst. Verwende dieses Wissen, um Deine NMR-Spektren zu analysieren. | Ca. 03:55 min. |