**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Analysieren |
| Verantwortlich | Hübel, Natascha / Krenzer, Julius |
| Autor | Hübel, Natascha |
| Datum | 2022.01.25 |
| Learning Outcome | Die Studierenden lernen NMR-Spektren zu analysieren. |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video wird Dir der Lösungsweg zur MestReNova-Übung zum Thema „Analysieren“ vorgestellt. |  |
|  | Screencast | In dieser Übung sollen die chemischen Verschiebungen aller Signale im gegebenen 1H‑Beispielspektrum bestimmt werden. |  |
|  | Screencast | Zuerst muss das Spektrum auf das Lösungsmittelsignal referenziert werden. Setze dazu unter dem Reiter „View“ den Haken bei „Parameters“. Es öffnet sich eine Tabelle. Unter „Solvent“ siehst Du, dass das Spektrum in deuteriertem Chloroform aufgenommen wurde. Das Restprotonensignal von Chloroform zeigt ein Singulett bei 7,26 ppm. Vergrößere den entsprechenden Bereich und wähle das Lösungsmittelsignal mit dem Shortcut „l“ aus. Klicke auf die Schaltfläche „Solvents“ und wähle den Eintrag zu deuteriertem Chloroform aus der Datenbank von MestReNova aus. Das Spektrum ist nun auf das Lösungsmittelsignal referenziert und Du kannst mit der Analyse starten. | Shortcut „z“ einblenden |
|  | Screencast | Beginne beispielsweise mit dem Signal, das die größte chemische Verschiebung besitzt. Vergrößere den Bereich und nutze den Shortcut „k“ zum Auswählen der Signale. Achte darauf, dass der rot unterlegte Bereich alle Maxima beinhaltet, die Du auswählen möchtest.  Lässt Du die Maustaste los, werden Dir die chemischen Verschiebungen über den Maxima angezeigt. |  |
|  | Screencast | Es bietet sich an, bei diesem Signal mit der Integration zu beginnen, da das Signal von einem Wasserstoffkern hervorgerufen wird. Der erste Wert der Integration wird von MestReNova standardmäßig auf 1 gesetzt. Nutze zum Integrieren den Shortcut „i“. Ziehe mit gedrückter linker Maustaste den rot unterlegten Bereich über die gesamte Breite des Signals. Lässt Du die Maustaste los, wird unter dem Signal der integrierte Bereich markiert und die Größe des Integrals angezeigt. |  |
|  | Screencast | Gehe für alle weiteren Signale analog vor.  Hier siehst Du das fertig analysierte Spektrum.  Deaktiviere das aktuelle Tool, indem Du den entsprechenden Shortcut noch einmal auswählst. Also „i“, wenn Du dich im Integriermodus befindest, und „k“, wenn „Peak Picking“ aktiv ist.  Mit einem Klick auf eine der oben angezeigten chemischen Verschiebungen öffnet sich eine Tabelle, in der alle Signale aufgelistet sind. Dies funktioniert nur, wenn kein Tool aktiv ist.  Die Deaktivierung kannst Du auch über die Taste „Esc“ erreichen. | Fertig analysiertes Spektrum einblenden |
|  | Screencast | Alternativ kannst Du auch die Funktion „Auto Peak Picking“ nutzen. Öffne dazu das Spektrum noch einmal und referenziere auf das Lösungsmittel. Wähle „Auto Peak Picking“ unter dem Reiter „Analysis“. MestReNova markiert alle Signale und bestimmt die chemischen Verschiebungen. Sind Lösungsmittelreste, wie hier Wasser, in der Probe vorhanden, so werden diese beim „Auto Peak Picking“ von MestReNova zugeordnet.  Um das Spektrum übersichtlicher darzustellen, ist es hier sinnvoll, Signale, die nicht zum untersuchten Molekül gehören, zu entfernen. Mit einem Rechtsklick auf eine angezeigte chemische Verschiebung öffnet sich ein Menü, in welchem Du „Delete Peak“ auswählen kannst. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video wurde Dir gezeigt, wie Du die Übung zum Thema „Analysieren“ bearbeitest. | Ca. 03:30 min. |