**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * 2D-NMR-Spektren
 |
| Verantwortlich | Hübel, Natascha / Krenzer, Julius / Schaper, Klaus |
| Autor | Hübel, Natascha |
| Datum | 2022.01.03 |
| Learning Outcome | Die Studierenden lernen Anpassungen an 2D-Spektren vorzunehmen. |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video lernst Du, wie Du in MestReNova mit 2-dimensionalen NMR‑Spektren, kurz 2D-NMR-Spektren, umgehst. |  |
|  | Greenscreen | 2D-NMR-Spektren werden häufig zur Strukturaufklärung zu Rate gezogen. |  |
|  | Screencast | Hier ist das HSQC-NMR-Spektrum einer unbekannten Verbindung gezeigt. Die Auswertung von HSQC-Spektren wird Dir im Internet, in Lehrbüchern oder einer Vorlesung erklärt. |  |
|  | Screencast | Mit einem Rechtsklick auf das Spektrum öffnen sich die gewohnten Auswahlmöglichkeiten. Neu ist die Option „Show Traces“. Es werden die NMR-Spektren, auf denen das 2D-Spektrum basiert, oben und links angezeigt. In diesem Fall sind noch keine Spektren zu sehen, sondern nur die stark verrauschten Projektionen des 2D-Spektrums. Dafür müssen die Spektren zuerst in das aktuelle Dokument importiert werden.Gehe dazu wie gewohnt vor und ziehe die entsprechenden Ordner des 1H- und des 13C-Spektrums per Drag and Drop auf die Seite. Du siehst, dass nun automatisch oben das 1H- und links das 13C-Spektrum angezeigt wird. |  |
|  | Tipp:Öffne alle Spektren direkt am Anfang. | Mein Tipp: Du kannst auch alle Spektren gleichzeitig zu Beginn öffnen, indem Du die entsprechenden Ordner in das Dokument ziehst. |  |
|  | Screencast | Die Spektren werden automatisch zugeordnet und an der entsprechenden Position angezeigt.  |  |
|  | Hinweis | Sollten die Spektren nicht automatisch zugeordnet werden, kannst Du unter „File“, „Preferences“, „NMR“ und „Import“ kontrollieren, ob der Haken bei „Auto Attach Traces“ gesetzt ist.  | Screencast und Hinweis einblenden |
|  | Screencast | Befinden sich mehrere 1H- oder 13C-Spektren in der aktuellen Datei, kannst Du mit einem Rechtsklick auf einen Trace unter „Setup…“ die Spektren auswählen, die zu dem 2D-Spektrum gehören. |  |
|  | Screencast | Alternativ kannst Du die Spektren an die entsprechende Stelle ziehen. Um dies auszuprobieren, öffne ein weiteres 1H-NMR. Ziehe dies mit der Maus über den oberen Trace und lasse los. Das Spektrum wird ausgetauscht. Ersetze das Spektrum auf dem gleichen Weg wieder durch das richtige Spektrum. |  |
|  | Screencast | Mit dem Mausrad kannst Du wie gewohnt die Signalhöhe einstellen. Dies gilt auch für die Spektren oben und links. Dafür musst Du Dich mit der Maus über dem entsprechenden Spektrum befinden. |  |
|  | Screencast | Auch die Zoom-Funktion unter dem Shortcut „z“ wird wie üblich verwendet. Hier vergrößerst Du allerdings einen zweidimensionalen Bereich statt eines eindimensionalen Bereichs. |  |
|  | Screencast | Um das 2D-Spektrum zu referenzieren, müssen zunächst das 1H-Spektrum und das 13C-Spektrum referenziert werden. Gehe dazu wie gewohnt vor. Markiere mit dem Shortcut „l“ den Lösungsmittelpeak und wähle das entsprechende Lösungsmittel aus. Verfahre genauso für das andere Spektrum. Im 2D-Spektrum ist zu erkennen, dass die 2D-Signale noch nicht zu den externen Signalen passen. Gehe daher unter „Reference“ auf „Absolute Reference…“, entferne unten den Haken beim 13C-NMR und bestätige mit „OK“. Das 2D-Spektrum, das 1H-Spektrum und das 13C-Spektrum sind nun referenziert. |  |
|  | Screencast | Mit der Funktion „Auto Peak Picking“ werden die chemischen Verschiebungen im 1H- und im 13C-Spektrum an den entsprechenden Signalen angezeigt. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video hast Du gelernt, wie Du in MestReNova mit 2-dimensionalen NMR-Spektren umgehst. | Ca. 03:55 min. |