**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Lifehacks |
| Verantwortlich | Hübel, Natascha / Krenzer, Julius |
| Autor | Hübel, Natascha |
| Datum | 2022.01.20 |
| Learning Outcome | Die Studierenden lernen einige Funktionen und Tricks in MestReNova kennen. |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video wird Dir der Lösungsweg zur MestReNova-Übung zum Thema „Lifehacks“ vorgestellt. |  |
|  | Screencast | In der ersten Übungsaufgabe soll die Kopplungskonstante des einzigen Dubletts im Spektrum bestimmt werden. |  |
|  | Screencast | Hier ist das gegebene Spektrum gezeigt. Zunächst muss es auf das Lösungsmittel-Signal referenziert werden. Um herauszufinden, in welchem Lösungsmittel das Spektrum aufgenommen wurde, gehe auf den Reiter „View“ und setze den Haken bei „Parameters“. Es öffnet sich ein Fenster. Beim Eintrag „Solvent“ siehst Du, dass als Lösungsmittel deuteriertes Chloroform verwendet wurde. Suche das Signal des Lösungsmittels und wähle es mit dem Shortcut „l“ aus. Unter „Solvents“ findest Du den Eintrag zu deuteriertem Chloroform. Wähle diesen aus und bestätige mit „OK“. |  |
|  | Screencast | Hast Du die Funktion „Full View“ unter „View“ aktiviert, kannst Du das Dublett suchen, indem Du den blau markierten Bereich verschiebst. Bei 10,44 ppm findest Du das gesuchte Dublett. Um die Kopplungskonstante manuell zu bestimmen, zoome möglichst weit hinein und lasse Dir mit dem Shortcut „c“ das „Crosshair“ anzeigen. Ziehe das Fadenkreuz mit gedrückter linker Maustaste von einem Peak zum anderen. Dir wird eine Kopplungskonstante von 2,3 Hz angezeigt. |  |
|  | Screencast | In der zweiten Übungsaufgabe soll das Molekül Butanon in ChemDraw gezeichnet werden und in MestReNova die vermuteten Aufspaltungen im 1H-Spektrum mithilfe der „Prediction“-Funktion kontrolliert werden. |  |
|  | Screencast | Um das Molekül Butanon in ChemDraw zu zeichnen, wird zunächst das Kohlenstoff-Grundgerüst gezeichnet. Am zweiten Kohlenstoffatom fügst Du eine Doppelbindung ein. Mit dem Shortcut „o“ ergänzt Du das Sauerstoffatom der Keto-Gruppe und erhältst das fertige Butanon-Molekül. Solltest Du Schwierigkeiten beim Zeichnen des Moleküls haben, schaue Dir die Lernsequenzen zum Programm ChemDraw an. |  |
|  | Screencast | Füge nun das gezeichnete Butanon-Molekül per copy-and-paste auf eine leere Seite in MestReNova ein. Die Atome werden von MestReNova nummeriert. Zunächst musst Du Dir überlegen, welche Signale und Aufspaltungen Du erwartest.  Für die drei Wasserstoffatome am Kohlenstoffatom 1 ist ein Singulett mit einem Integral von 3 zu erwarten, da sich keine weiteren Wasserstoffatome in direkter Nähe befinden.  Am Kohlenstoffatom 3 befinden sich zwei Wasserstoffatome, was zu einem Integral von 2 führt. In direkter Nachbarschaft befinden sich drei weitere Wasserstoffatome, daher kommt es zu einer Multiplizität von 4, was einem Quartett entspricht.  Die Methyl-Gruppe des vierten Kohlenstoffatoms steht in direkter Nachbarschaft zu zwei Wasserstoffatomen. Daher wird ein Triplett mit einem Integral von 3 erwartet. |  |
|  | Screencast | Um diese Vermutungen zu überprüfen, lassen wir uns das 1H-NMR-Spektrum vorhersagen. Gehe dazu unter „Prediction“ auf „1H Spectrum“.  Wenn Du über die Atome hoverst siehst Du, dass die Wasserstoffkerne am Kohlenstoffatom Nummer 1 ein Singulett zeigen, die am Kohlenstoffatom Nummer 3 ein Quartett und die Wasserstoffkerne am Kohlenstoffatom Nummer 4 ein Triplett. Die vorher getroffenen Vermutungen konnten durch die Vorhersage gestützt werden. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video wurde Dir gezeigt, wie Du die Übung zum Thema „Lifehacks“ bearbeitest. | Ca. 03:40 min. |