**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Multipletts analysieren
 |
| Verantwortlich | Schaper, Klaus / Krenzer, Julius |
| Autor | Krenzer, Julius |
| Datum | 2021.05.04 |
| Learning Outcome | Die Studierenden können Aufspaltungsmustert und Kopplungskonstanten in NMR-Spektren mit MestReNova bestimmen. |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video lernst Du, wie Du Signalaufspaltungen in Deinem NMR-Spektrum analysierst. Die Bestimmung der Aufspaltungsmuster und der Kopplungskonstanten ist ein wichtiger Bestandteil der Spektrenauswertung. Das Programm MestReNova bietet Funktionen, die Dir bei der Analyse von Multipletts helfen. |  |
|  | Screencast | Hier ist ein bereits referenziertes 1H-NMR-Spektrum gezeigt. Die Multiplett-Analyse kann automatisch oder manuell durchgeführt werden. Die Funktionen findest Du unter dem Reiter „Analysis“ im Abschnitt „Multiplets“. Für die automatische Analyse, wähle „Auto Multiplet Analysis“.  |  |
|  | Screencast | Wenn Du zuvor noch keine Signale markiert und ausgemessen hast, wird das gesamte Spektrum analysiert. Am oberen Rand werden die Positionen aller Signale angezeigt, die das Programm erkennt. Unterhalb des Spektrums werden die Werte der Integrale angegeben. |  |
|  | Screencast | Zusätzlich erscheint auf halber Höhe über den Signalen ein Feld mit Informationen. Jedem Signal wird darin ein Buchstabe zugeordnet. Dahinter steht in Klammern die Abkürzung für die Aufspaltung des Signals, zum Beispiel „s“ für Singulett und „d“ für Dublett. Die chemische Verschiebung wird ebenfalls im Kasten angezeigt. |  |
|  | Screencast | Durch Verunreinigungen hervorgerufene Signale werden dabei häufig erkannt und nicht analysiert. Auch das Lösungsmittelsignal und der Wasserpeak werden von MestReNova in der Regel automatisch identifiziert. Das Referenzieren auf das Lösungsmittel oder einen internen Standard ist dennoch manuell nötig. |  |
|  | Screencast | Hier ist ein weiteres Spektrum gezeigt. Um die manuelle Multiplett-Analyse zu aktivieren, benutze den Shortcut „J“ oder wähle im Abschnitt „Multiplets“ die Funktion „Manual“. Mit der linken Maustaste kannst Du den Bereich rot markieren, in dem die Signale erfasst und analysiert werden sollen. |  |
|  | Screencast | Betrachten wir nun dieses Triplett. Durch Doppelklick auf das Signal, kann dieses bearbeitet werden. Hier kann zum Beispiel der Name, das Aufspaltungsmuster oder das Integral manuell geändert werden. In diesem Fall handelt es sich um eine Methylgruppe, das Integral wird also als 3 definiert. Außerdem gibt es die Funktionen „Delete Multiplet Peak“ und „Add Multiplet Peak“, mit denen manuell Peaks hinzugefügt oder gelöscht werden können. So können Signale, die zum Beispiel durch Verunreinigungen hervorgerufen werden, entfernt und nicht erkannte Signale hinzugefügt werden. |  |
|  | Screencast | Um die Ergebnisse in einer wissenschaftlichen Arbeit anzugeben, müssen diese verschriftlicht werden. MestReNova bietet dafür die Funktion „Report Multiplet“. Es erscheint ein Textfeld mit den wichtigsten Informationen. Zuerst wird der untersuchte Kern, die Frequenz des Spektrometers und das Lösungsmittel angegeben. Dann folgen die Ergebnisse der Auswertung.  |  |
|  | Screencast | Der Text kann bei Bedarf kopiert und in ein Textverarbeitungsprogramm eingefügt werden. Das Format kannst Du unter dem Reiter „Tools“ über „Report“ und „Multiplets“ bearbeiten. Hier können die Formate von verschiedenen Zeitschriften übernommen oder manuell angepasst werden. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video hast Du gelernt, wie Du mit dem Programm MestReNova Multipletts in NMR-Spektren analysierst. Nutze dieses Wissen bei Deiner nächsten Auswertung. | Ca. 03:40 min. |