**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Referenzieren |
| Verantwortlich | Schaper, Klaus / Krenzer, Julius |
| Autor | Krenzer, Julius |
| Datum | 2021.02.17 |
| Learning Outcome | Die Studierenden können NMR-Spektren mithilfe des Lösungsmittelsignals referenzieren |

## Skript

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Nr.** | **Medium** | **Gesprochener Text** | **Kommentar** |
|  | Intro - Greenscreen | Hallo, in diesem DigiChem-Video lernst Du, wie Du NMR-Spektren auf das Lösungsmittelsignal referenzierst. |  |
|  | Screencast | Als Beispiel ist hier das 1H-NMR-Spektrum einer unbekannten Substanz dargestellt. Auf der x‑Achse ist die chemische Verschiebung aufgetragen. Sie trägt die Einheit „parts per million“ und beinhaltet wichtige Aussagen über die Umgebung des betrachteten Kerns. So gibt die chemische Verschiebung erste Informationen zur Interpretation der Signale. |  |
|  | Screencast | Bevor Du die chemische Verschiebung bestimmst, muss das Spektrum auf das Lösungsmittel, oder besser, einen internen Standard referenziert werden. |  |
|  | Hinweis  Einige Lösungsmittel liefern mehrere Signale! | Beachte, dass Lösungsmittel mehrere Signale liefern können. |  |
|  | Screencast | Die Probe wird vor der Messung in deuteriertem Lösungsmittel gelöst. Der Deuterierungsgrad beträgt aber nicht 100 %, sodass die verbleibenden Protonen ein Lösungsmittelsignal liefern. Dieses kann zur Referenzierung verwendet werden, da die chemischen Verschiebungen der Lösungsmittel bekannt sind. |  |
|  | Screencast | Besser ist es, Tetramethylsilan als internen Standard zu verwenden. Die chemische Verschiebung von TMS ist per Definition 0 ppm. |  |
|  | Screencast | Um herauszufinden, in welchem Lösungsmittel ein Spektrum aufgenommen wurde, kannst Du unter dem Reiter „View“ durch Klicken auf „Parameters“ eine Tabelle mit Informationen über die Messung öffnen. Hier findest Du das Lösungsmittel, in diesem Fall deuteriertes Chloroform. |  |
|  | Screencast | Die Lage der Lösungsmittelsignale erhältst Du aus der Literatur. Das Signal von Chloroform liegt bei 7,26 ppm. Um Dein Spektrum zu referenzieren, musst Du das Lösungsmittelsignal auswählen. |  |
|  | Tipp  Mit dem Shortcut „z“ kann ein Ausschnitt vergrößert werden! | Mein Tipp: Vergrößere zunächst den Ausschnitt. Nutze hierzu die Taste „z“ für Zoom und markiere dann den Bereich, den Du vergrößern möchtest. |  |
|  | Screencast | Alternativ kannst Du unter dem Reiter „View“ das Symbol zum Vergrößern auswählen. Es empfiehlt sich jedoch, gerade bei grundlegenden Funktionen, die Shortcuts zu verwenden. Mit dem Mausrad kann die Intensität der Signale variiert werden. |  |
|  | Screencast | Um das Spektrum auf das Lösungsmittelsignal zu referenzieren, wähle unter dem Reiter „Analysis“ das Symbol „Reference“. Der Shortcut hierfür ist „L“.    Beim Markieren des Lösungsmittelsignals öffnet sich ein Fenster. Hier siehst Du die chemische Verschiebung des Signals in Deinem Spektrum.    Unter „New Shift“ kannst Du den Referenzwert für dein Lösungsmittel eingeben. Du kannst aber auch die Datenbank von MestReNova nutzen, indem Du auf „Solvents“ klickst und in der Liste das entsprechende Lösungsmittel suchst. In diesem Fall dient deuteriertes Chloroform als Lösungsmittel. Wähle das entsprechende Solvens und drücke „Ok“. Das Spektrum wird jetzt referenziert. |  |
|  | Screencast | Analog können 13C-Spektren referenziert werden.    Klicke auf „Reference“, markiere das Lösungsmittelsignal und wähle das entsprechende Lösungsmittel unter „Solvents“ aus. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video hast Du gelernt, wie Du NMR-Spektren im Programm MestReNova referenzierst. Jetzt kannst Du mit der Auswertung des Spektrums beginnen. | Ca. 03:30 min. |