**OER.DigiChem.nrw**

# Skript zu Videoproduktion

## Allgemeine Informationen

|  |  |
| --- | --- |
| Projekt | MestReNova |
| Themen | * Lifehacks |
| Verantwortlich | Hübel, Natascha / Krenzer, Julius |
| Autor | Hübel, Natascha |
| Datum | 2021.12.19 |
| 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 lernst Du einige Lifehacks kennen, die Dir das Arbeiten mit MestReNova erleichtern. |  |
|  | Screencast | Öffne zunächst ein beliebiges Spektrum. Ein hilfreiches Feature ist „Full View“. Um dieses zu aktivieren, setze unter „View“ den Haken bei „Full View“. Vergrößerst Du mit dem Shortcut „z“ einen Teil des Spektrums, siehst Du immer, wo Du Dich im Spektrum befindest. Außerdem kannst Du den betrachteten Ausschnitt über den blau markierten Bereich verschieben. Mit dem Shortcut „f“ kannst Du wieder das gesamte Spektrum sehen. |  |
|  | Screencast | Um manuell eine Kopplungskonstante zu bestimmen, kannst Du das „Crosshair“ verwenden. Nutze dafür den Shortcut „c“. Gehe mit dem Fadenkreuz zum ersten Peak, drücke die Maustaste und ziehe das Fadenkreuz zum zweiten Peak. Dir wird oberhalb des Cursors die Kopplungskonstante in Hz angezeigt.  Außerdem öffnet sich ein Fenster mit weiteren Informationen über den Cursor und den Abstand der beiden Punkte. |  |
|  | Screencast | Hast Du bereits eine Vermutung, wie die Struktur Deiner gemessenen Verbindung aussieht, kannst Du Dir von MestReNova das Spektrum vorhersagen lassen. |  |
|  | Tipp:  Zeichne das Molekül in ChemDraw! | Mein Tipp: Die Struktur des zu analysierenden Moleküls kannst Du am einfachsten in ChemDraw zeichnen und dann nach MestReNova kopieren. |  |
|  | Screencast | Hier ist zum Beispiel das Molekül Essigsäureethylester gezeigt, welches in ChemDraw kopiert und in MestReNova eingefügt wird. Unter „Prediction“ hast Du die Möglichkeit, Dir verschiedene Spektren vorhersagen zu lassen, zum Beispiel das 1H-NMR-Spektrum. Mit simulierten Spektren kannst Du genauso wie mit gemessenen Spektren umgehen. MestReNova nummeriert beim Einfügen des Moleküls die Atome und beim Vorhersagen auch die dazugehörigen Signale. Du kannst mit der Maus über die Atome hovern und das entsprechende Signal wird farblich hervorgehoben. |  |
|  | Hinweis:  Verlasse Dich nicht blind auf die Spektren-Vorhersage. | Mache Dir vor der Vorhersage Gedanken, welche Signale und Multiplizitäten bei Deinem Molekül zu erwarten sind. Die Funktion „Prediction“ soll Dir zur Orientierung dienen, da sie nicht immer zuverlässig ist. |  |
|  | Screencast | Bei komplexen Aufspaltungsmustern ist es vielfach hilfreich, den entsprechenden Bereich vergrößert darzustellen. Nutze dafür unter „View“ die Funktion „Expansion“ und wähle den darzustellenden Bereich aus. Alternativ kannst Du auch den Shortcut „e“ nutzen. Es erscheint ein Fenster, in dem der ausgewählte Bereich vergrößert dargestellt ist. Größe und Lage des eingefügten Feldes kannst Du frei bestimmen und die gelernten Funktionen wie gewohnt anwenden. |  |
|  | Hinweis:  Achte darauf, welches Spektrum ausgewählt ist. | Achte dabei darauf, welches Spektrum gerade ausgewählt ist. Dies erkennst Du an den grünen Umrandungspunkten. |  |
|  | Screencast | Um ein Spektrum auf die wesentlichen Aussagen zu beschränken, können Bereiche, in denen sich keine Signale befinden, ausgeschnitten werden. Nutze dafür den Shortcut „x“. Es erscheint ein Schneidewerkzeug, mit dem der zu entfernende Bereich ausgewählt werden kann. Dass ein Bereich ausgeschnitten wurde, wird durch den Doppelstrich auf der x-Achse und durch eine Unterbrechung des Spektrums kenntlich gemacht. |  |
|  | Screencast | Eine weitere hilfreiche Funktion ist die Darstellung von zwei oder mehr Spektren übereinander. Öffne dafür die beiden NMR-Spektren im gleichen Dokument und wähle diese mit gedrückter „Strg“-Taste aus. In der oberen Leiste erscheint ein neuer Reiter mit dem Namen „Stacked“. Mit einem Klick auf „Stack Items“ werden die Spektren übereinander angezeigt. Dies ist beispielsweise hilfreich um Verunreinigungen, in diesem Fall durch das Edukt, zu erkennen. |  |
|  | Outro - Greenscreen | In diesem DigiChem-Video hast Du gelernt, wie Du verschiedene Lifehacks in MestReNova anwendest. | Ca. 03:50 min. |