

Projektleitung: PD Dr. Klaus Schaper

scheLM NMR Spekt

NMR-Spektroskopie

Ausgangssituation

Die organische Synthese ist nicht nur eine wissenschaftliche Tätigkeit, sondern hat auch kreative und somit künstlerische Aspekte. In der synthetischen Chemie werden Stoffe geschaffen, die es vorher noch nie gab. 2012 waren 40 Mio. organische Verbindungen bekannt, 2018 waren es bereits 137 Mio. Die meisten dieser 97 Mio. neuen Verbindungen entstammen chemischen Laboratorien, nur ein Teil wurde aus der Natur isoliert.

Neben der Entwicklung immer neuer Verbindungen, ist aber auch die Analyse der erhaltenen Strukturen von Bedeutung. Nach der Synthese einer neuen Verbindung muss ein Strukturbeweis geführt werden. Das vielleicht wichtigste Werkzeug hierzu ist die NMR-Spektroskopie (nuclear magnetic resonance, kern-magnetische Resonanz).

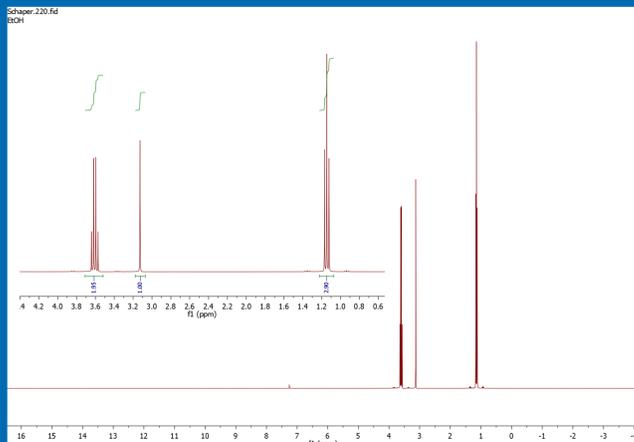


Abb.: 1 NMR-Spektrum von Ethanol (Alkohol)

Oben ist das NMR-Spektrum von Ethanol gezeigt (rot-braun), unten der gesamte Messbereich, oben eine Ausschnittsvergrößerung. Man erkennt drei Signale, jedes Signal hat eine Lage im Spektrum (horizontale Position), eine Intensität (Fläche unter der Kurve, oder Höhe der Stufe der grünen Kurve) und ein Muster (ganz links vier Linien, in der Mitte 1 Linie, rechts drei Linien).

Aus diesen spektralen Signaturen können Informationen über die chemische Struktur abgeleitet werden, oder in Umkehrung kann aus der chemischen Struktur die spektrale Signatur vorhergesagt werden. Tatsächlich ist der zweite Weg deutlich einfacher. Daraus resultiert auch die Strategie bei der Interpretation von NMR-Spektren. Chemiker*innen haben in der Regel eine Vorstellung, welche Substanzen synthetisiert werden sollen. Für dieses Produkt und für mögliche/erwartete Nebenprodukte werden dann spektrale Signaturen vorhergesagt. Anschließend werden die Spektren gemessen und die erhaltenen spektralen Signaturen werden mit den gemessenen verglichen.

Dieses Vorgehen setzt voraus, dass die Chemiker*innen in der Lage sind, diese spektralen Signaturen korrekt vorherzusagen.

Problem

Die Kompetenz, eine spektrale Signatur sicher und präzise vorherzusagen, erfordert einerseits das Verständnis der zugrundeliegenden Theorie, die in Vorlesungen vermittelt wird, andererseits ein erhebliches Maß an Training, welches in begleitenden Übungen vermittelt wird.

Es zeigt sich aber, dass sich viele Studierende unsicher fühlen, oder auch objektiv mehr Übung benötigen.

Ziele & Zielgruppen

Das hier beschriebene Modul wendet sich an alle Studierenden der organischen Chemie in den Fächern Biochemie, Chemie, Naturwissenschaften, Wirtschaftswissenschaften.

Umsetzung

Um die oben beschriebenen Bedürfnisse der Studierenden zu berücksichtigen, haben wir mit scheLM NMR Spekt ein Selbstlernmodul zur Vorhersage von NMR-Spektren entwickelt.

Einstellungen/Auswahl

Bitte wählen Sie den gewünschten Datensatz aus!

- einfache Moleküle
- komplexere Moleküle
- komplexe Moleküle mit NMR-aktiven Heteroatomen
- komplexe Moleküle mit diastereotopen Protonen

Bitte wählen Sie den gewünschten Testtyp aus!

- ohne chemische Verschiebung
- chemische Verschiebung schätzen (+/- 1 ppm)
- chemische Verschiebung berechnen (+/- 0.01 ppm)

Wie viele Beispiele wollen Sie bearbeiten?

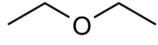
9

TestStarten

Abb.: 2 Auswahl der Einstellungen

Zunächst legen die Studierenden den Testmodus, sowie den Schwierigkeitsgrad der Aufgaben fest. Der Schwierigkeitsgrad kann so an den Fortschritt der Vorlesung und der Übungen angepasst werden. Im nächsten Schritt wird dann das erste Beispiel eingeblendet.

Test



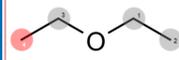
Nr.	Ident. j. n.	Anzahl:	2J	3J	4J	5J	Multiplizität	Bemerk.	Shift
1	2	1*	q						2.75
2	3	1*	t						1
3	Identisch mit 2								
4	Identisch mit 1								

Neustart Index = 1

Abb.: 3 Ein neues Beispiel

Man erkennt eine chemische Struktur, ein leeres graues Feld und eine leere Tabelle. Durch klicken auf die Atome werden Atome markiert und nummeriert (siehe graue Kreise in Abb. 4). Gleichzeitig wird für jedes Atom eine neue Zeile in die Tabelle eingefügt. Die Vorhersage geschieht dann durch Auswahl von Einträgen aus Auswahlfeldern. Anschließend werden die Antworten automatisch kontrolliert und die Ergebnisse eingeblendet.

Test



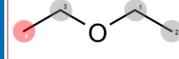
Nr.	Ident. j. n.	Anzahl:	2J	3J	4J	5J	Multiplizität	Bemerk.	Shift
1	2	1*	q						2.75
2	3	1*	t						1
3	Identisch mit 2								
4	Identisch mit 1								

Neustart Index = 1

Abb.: 4 Beispiel von Abb. 3, indem vier Atome markiert wurden

Bei der Kontrolle werden fehlende Atome eingeblendet (rosa Kreise) und fehlerhafte Felder rot hervorgehoben. Durch klicken auf den "Lösung-Button" kann anstelle der falschen Antwort, die richtige Lösung (blau) angezeigt werden. Durch nochmaliges klicken wird wieder die falsche Antwort angezeigt.

Test



Atom: 3, Identisch mit 2
Aus Symmetriegründen sind die Atome 1 und 3 identisch.
Anzeige löschen

Nr.	Ident. j. n.	Anzahl:	2J	3J	4J	5J	Multiplizität	Bemerk.	Shift
1	2	1*	q						2.75
2	3	1*	t						1
3	Identisch mit 1								
4	Identisch mit 2								

Neustart Index = 1

Abb.: 5 Wie Abb. 4, aber in Zeile 3 wurde die Lösung eingeblendet.

Zusätzlich gibt es neben jedem Feld einen Info-Button. Dieser erlaubt es, zusätzlich eine Erklärung zur richtigen Antwort einzublenden (siehe graues Feld rechts oben).

In dieser Form erlaubt das Modul den Studierenden, selbstständig mit einer zuverlässigen Fehlerkontrolle über die Übungen hinaus zu üben.

Technische Informationen

Zusätzlich zu der hier gezeigten Studierendenansicht haben wir auch eine Dozierendenansicht geschaffen, die es erlaubt, effizient und schnell weitere Beispiele zu generieren und Fehler zu korrigieren.

Das Lernmodul wurde auf unserer Lernplattform scheLM implementiert.

Ergebnisse und Ausblick

scheLM NMR Spekt ist zur Zeit in einer Erprobungsphase. Wir haben aber schon begeisterte Rückmeldung erhalten, weil wir bei den Studierenden einen Nerv getroffen haben und der Bedarf an diesem Modul offensichtlich war.

Ein ausführlicher Test unter Realbedingungen und eine anschließende Evaluation stehen aber noch aus.

Das Modul soll auf jeden Fall, aufbauend auf die bis dato implementierten 27 Beispiele, erweitert werden.