

Online-Lernressourcen für die Analyse-Software NMRium

Dozentin: Dr. Eva Ziegler

Berlin, den 21. März 2023

Inhalt

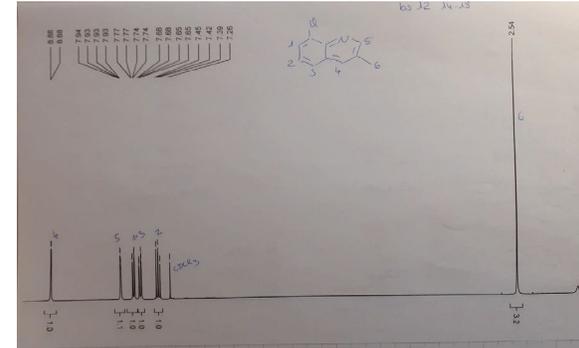
1. Vorstellung von des Projekts IDNMR
2. Vorstellung der Browsersoftware NMRium
3. Online-Lernressource für Einsteiger
4. Online-Lernressource für Fortgeschrittene
5. Fragen

1. Vorstellung des Projekts IDNMR

Ziel: Digitalisierung von NMR-Daten

Ist-Zustand:

- Auswertung von NMR-Spektren oft nicht digital
- Wichtige, einfach zugängliche Spektreninformationen werden oft nicht genutzt (z. Bsp. 2D-Spektren)
- Abspeicherung von zugeordneten NMR-Spektren oft nicht digital
- Kein (öffentlicher) Zugang zu zugeordneten NMR-Spektren
- Publikation von falschen Zuordnungen oder inkorrekten Strukturfolgerungen sind möglich



1. Vorstellung des Projekts IDNMR

Ziel: Digitalisierung der von NMR-Daten

Lösungsansatz:

- Bereitstellung einer Software zur einfachen, digitalen Bearbeitung und Auswertung von NMR-Rohdaten
- Bereitstellung einer kostenlosen Software zur Bearbeitung von NMR-Rohdaten

www.nmrium.org

- Bereitstellung einer Datenbank: <https://nmrxiv.org/>
- Vorgängersoftware: <https://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de/>

1. Vorstellung des Projekts IDNMR



Das Team:

- NMR-Spezialisten
- IT-Spezialisten
- Spezialisten für Didaktik und Lehre

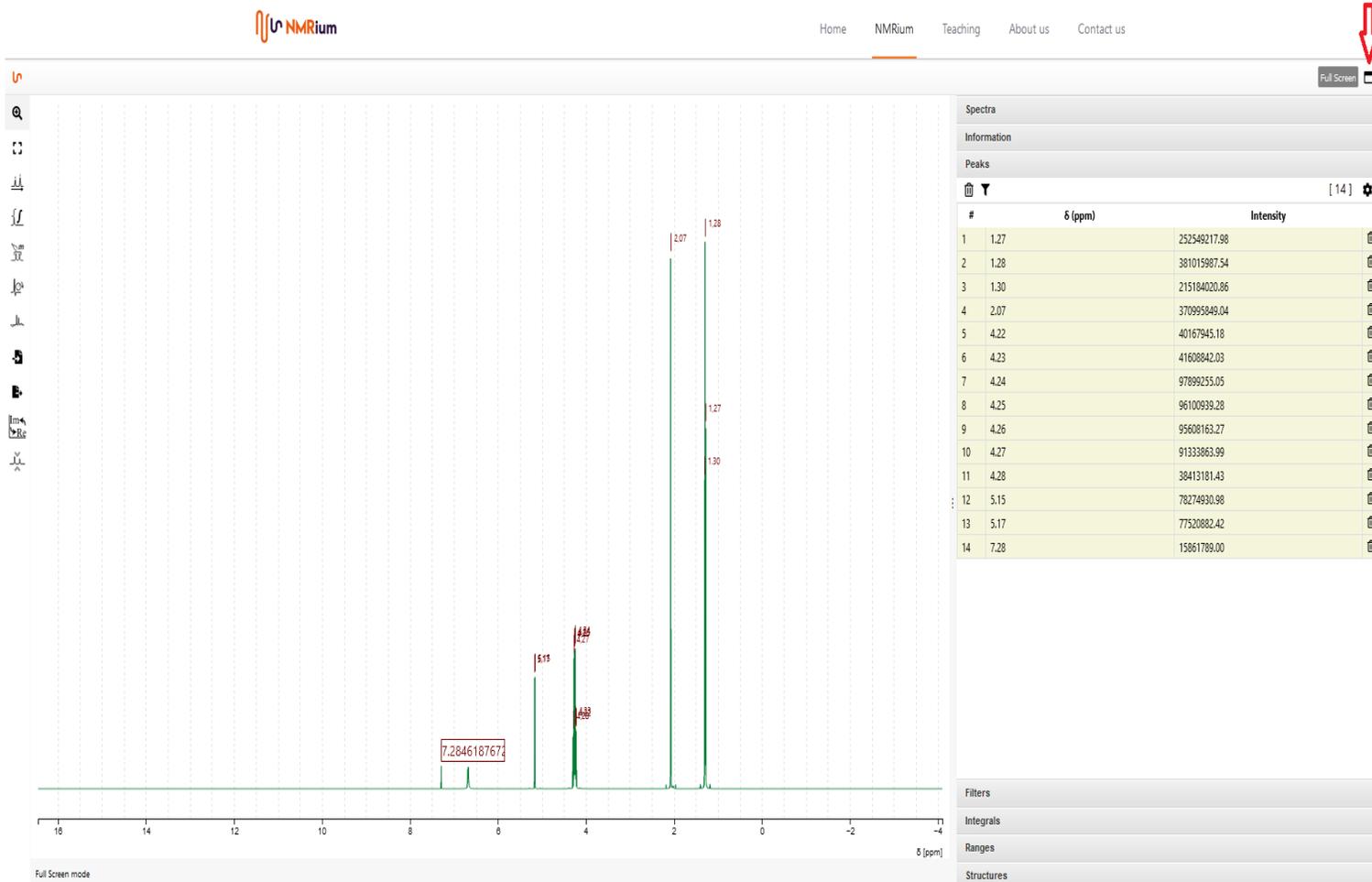
Beteiligte Universitäten:

- Johannes Gutenberg-Universität Mainz
- Universität zu Köln
- Friedrich-Schiller-Universität Jena
- De Montfort University Leicester, Großbritannien

Beteiligte Unternehmen:

- Zakodium (Lausanne, Schweiz)

2. Vorstellung der Browsersoftware NMRium



Homepage:

<https://www.nmrium.org/nmrium>

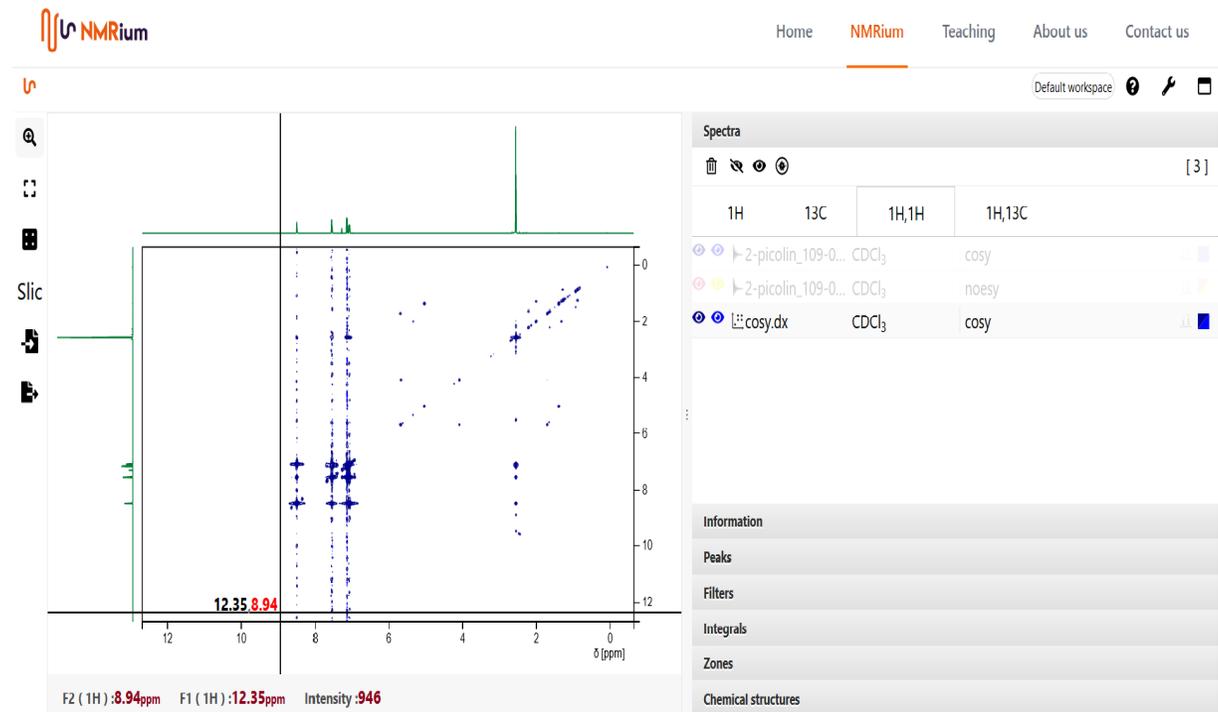
- Browser-Software
- Kostenlos
- Kann auch offline als App genutzt werden
- Intuitiv
- Spektrenvorhersage ist möglich
- Inklusive Handbuch
- **Inklusive Online-Lernressourcen**

aber: die Software befindet sich noch in der Entwicklung!

2. Vorstellung der Browsersoftware NMRium

Bearbeitungsmöglichkeiten von NMRium:

- Bearbeitung von NMR-Rohdaten folgender Kerne:
 - ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P
- Einfache Prozessierung von NMR-Rohdaten
- 1D-Spektren
- 2D-Spektren
 - z. B. COSY, HSQC, HMBC, NOESY
- Speicherung der zugeordneten Signale
- Vorhersage von ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren
- Unterstützung bei der Erstellung von Lernmaterialien für Dozenten



2. Vorstellung der Browsersoftware NMRium

Hilfestellungen zur Bedienung von NMRium:

→ Quickstart in deutscher und englischer Sprache

→ Online-Handbuch in englischer Sprache

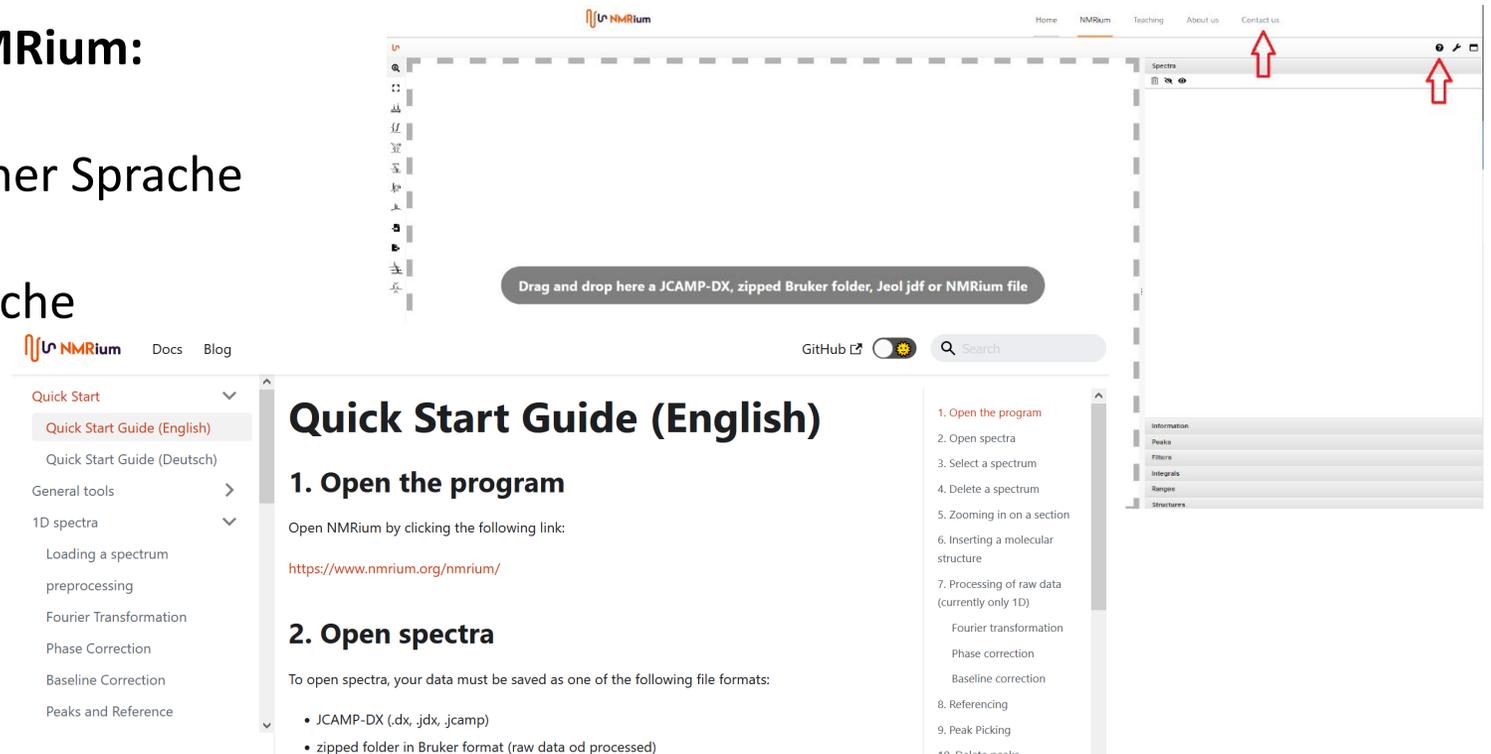
→ Textform und Bilder

→ Kurze Videos

→ Onlinekurse auf OLAT

→ Einsteiger-Kurs

→ Fortgeschrittenen-Kurs



Drag and drop here a JCAMP-DX, zipped Bruker folder, Jeol jdf or NMRium file

Quick Start Guide (English)

1. Open the program

Open NMRium by clicking the following link:

<https://www.nmrium.org/nmrium/>

2. Open spectra

To open spectra, your data must be saved as one of the following file formats:

- JCAMP-DX (.dx, .jdx, .jcamp)
- zipped folder in Bruker format (raw data od processed)

1. Open the program
2. Open spectra
3. Select a spectrum
4. Delete a spectrum
5. Zooming in on a section
6. Inserting a molecular structure
7. Processing of raw data (currently only 1D)
 - Fourier transformation
 - Phase correction
 - Baseline correction
8. Referencing
9. Peak Picking
10. Delete peaks

3. Online-Lernressource für Einsteiger

→ Plattform: OLAT

→ Einfache Übertragung auf andere Plattformen (z. B. Moodle)

→ Zielgruppe: Anfänger

→ Theoretische Voraussetzungen:

→ keine Vorkenntnisse zur Prozessierung und Bearbeitung der NMR-Rohdaten

→ theoretische NMR-Grundkenntnisse zur Zuordnung der Signale der vorgegebenen Spektren

→ Technische Voraussetzung:

→ Internetfähiger Computer, Laptop oder Smartphone

→ OLAT-Zugang (Gastzugang)

→ Lautsprecher oder Kopfhörer

→ Dauer: ca. 90 Minuten

3. Online-Lernressource für Einsteiger

[Administration](#)
✓ VERÖFFENTLICHT
Kursinfo
BESITZER
Mein Kurs

- NMRium für Einsteiger
- Einleitung
- ▾ Teil 1
 - Aufgabe 1**
 - ↳ NMR-Rohdaten: Beispiel 1
- Teil 2
- ↳ Linkliste

Aufgabe 1

Schauen Sie sich die Videos an, die in diesem Teil des Online-Kurses hinterlegt sind. Wir empfehlen Ihnen, sich an die vorgeschriebene Reihenfolge zu halten. Außerdem empfehlen wir Ihnen, sich die Videos im Vollbildmodus anzuschauen. Die im Beispiel verwendeten NMR-Rohdaten sind sowohl als Link als auch als gepzippte Bruker-Dateien hier im OLAT-Kurs hinterlegt. Sie können die vorgestellten Auswertungsschritte selbst nachmachen, entweder parallel zum Video, oder Sie gehen die Schritte im Anschluss an das Video durch. Falls etwas unklar ist, schauen Sie sich das Video noch einmal an.

Viel Erfolg!

Spektren

[Spektren direkt in NMRium bearbeiten](#)

0. Wichtige Funktionen
1. Daten laden und eine Molekülstruktur einfügen
2. Fourier-Transformation
3. Phasenkorrektur / Basislinienkorrektur
4. Analyse
5. Zuordnung
6. Speichern

Der Kurs kann in deutscher oder in englischer Sprache absolviert werden.

Der Kurs ist kostenlos.

3. Online-Lernressource für Einsteiger

Navigation bar of the NMRium interface. It includes a back arrow, the course title "NMRium für Einsteiger", a green "VERÖFFENTLICHT" status indicator, "Administration" and "Status" links, a "Kursinfo" link with a lightbulb icon, a "BESITZER" role dropdown, and "Rolle" and "Mein Kurs" links with navigation arrows.

- NMRium für Einsteiger
 - Einleitung
 - Teil 1
 - Aufgabe 1**
 - NMR-Rohdaten: Beispiel 1
 - Teil 2
 - Linkliste

Aufgabe 1

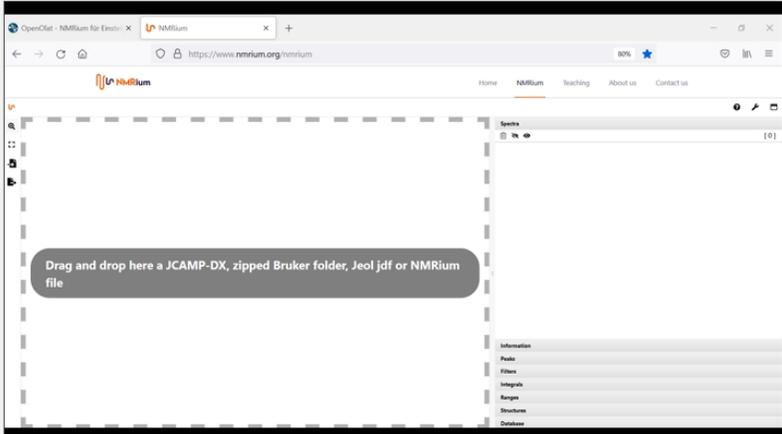
Schauen Sie sich die Videos an, die in diesem Teil des Online-Kurses hinterlegt sind. Wir empfehlen Ihnen, sich an die vorgeschriebene Reihenfolge zu halten. Außerdem empfehlen wir Ihnen, sich die Videos im Vollbildmodus anzuschauen. Die im Beispiel verwendeten NMR-Rohdaten sind sowohl als Link als auch als gezippte Bruker-Dateien hier im OLAT-Kurs hinterlegt. Sie können die vorgestellten Auswertungsschritte selbst nachmachen, entweder parallel zum Video, oder Sie gehen die Schritte im Anschluss an das Video durch. Falls etwas unklar ist, schauen Sie sich das Video noch einmal an.

Viel Erfolg!

Spektren

Spektren direkt in NMRium bearbeiten

0. Wichtige Funktionen



1. Daten laden und eine Molekülstruktur einfügen

4. Online-Lernressource f. Fortgeschrittene

- Plattform: OLAT
 - Einfache Übertragung auf andere Plattformen (z. B. Moodle)
- Zielgruppe: Teilnehmer, die bereits mit NMRium gearbeitet haben
- Theoretische Voraussetzungen:
 - Kenntnisse zur Prozessierung und Bearbeitung von NMR-Rohdaten werden vorausgesetzt
 - theoretische Kenntnisse der Zuordnung von Signalen und der Bestimmung von Kopplungskonstanten werden vorausgesetzt
 - theoretische NMR-Grundkenntnisse zur Auswertung von 2D-NMR-Spektren werden vorausgesetzt
- Technische Voraussetzung:
 - Internetfähiger Computer, Laptop oder Smartphone
 - OLAT-Zugang (Gastzugang)
 - Lautsprecher oder Kopfhörer
- Dauer: ca. 60 Minuten

4. Online-Lernressource f. Fortgeschrittene

Administration
VERÖFFENTLICHT Status
Kursinfo
BESITZER Rolle
Mein Kurs

- NMRium für Fortgeschrittene
 - Einleitung
 - Herzlich Willkommen
 - Videos der Einleitung
 - Teil 1
 - Aufgabe 1**
 - NMR-Rohdaten: Beispiel 1
 - Teil 2
 - Aufgabe 2
 - NMR-Rohdaten: Beispiel 2
 - Linkliste

Aufgabe 1

Schauen Sie sich die Videos an, die in diesem Teil des Online-Kurses hinterlegt sind. Wir empfehlen Ihnen, sich an die vorgegebene Reihenfolge zu halten. Außerdem empfehlen wir Ihnen, sich die Videos im Vollbildmodus anzuschauen. Die im Beispiel verwendeten NMR-Rohdaten sind sowohl als Link als auch als gezippte Bruker-Dateien hier im OLAT-Kurs hinterlegt. Sie können die vorgestellten Auswertungsschritte selbst nachmachen, entweder parallel zum Video, oder Sie gehen die Schritte im Anschluss an das Video durch. Falls etwas unklar ist, schauen Sie sich das Video noch einmal an.

Viel Erfolg!

Spektren

Spektren direkt in NMRium bearbeiten

1. Spektren laden und für 2D NMR auswählen
2. Zonen bestimmen
3. Zuordnung
4. Weitere Funktionen bei der 2D NMR Auswertung

Der Kurs kann in deutscher oder in englischer Sprache absolviert werden.

Der Kurs ist kostenlos.

4. Online-Lernressource f. Fortgeschrittene

Administration
VERÖFFENTLICHT Status
Kursinfo
BESITZER Rolle
Mein Kurs

- NMRium für Fortgeschrittene
 - Einleitung
 - Herzlich Willkommen
 - Videos der Einleitung
 - Teil 1
 - Aufgabe 1
 - NMR-Rohdaten: Beispiel 1
 - Teil 2
 - Aufgabe 2**
 - NMR-Rohdaten: Beispiel 2
 - Linkliste

Aufgabe 2

Schauen Sie sich nun die Videos der Aufgabe 2 an. Diese Videos beschäftigen sich mit der Bestimmung von Kopplungskonstanten. [Seite bearbeiten](#)
 Problemstellungen werden in jedem Video komplexer. Es wird gezeigt, wie Sie mit Hilfe von NMRium die Kopplungskonstanten einfach bestimmen können.

Viel Erfolg!

Spektren

Spektren direkt in NMRium bearbeiten

1. Manuelle Bestimmung von Kopplungskonstanten
2. Kopplungskonstanten mit Hilfe von Ranges bestimmen
3. Kopplungskonstanten überlagerter Signale
4. Kopplungskonstanten von zwei überlagerten Molekülen

5. Fragen

Haben Sie Fragen?