

# LEHRINHALTE DER KERNRESONANZSPEKTROSKOPIE IM STUDIENGANG BACHELOR CHEMIE

## Bestandsaufnahme

Ziel dieser Erhebung war es, eine kompakte Empfehlung für die GDCh für die Ausbildung in der Kernresonanzspektroskopie (NMR) im Studiengang Bachelor Chemie zu erarbeiten.

An der Erhebung nahmen 16 deutsche Hochschulen teil. Namentlich: RWTH Aachen (Christoph Räuber), TU Berlin (Sebastian Kemper), Uni Bonn (Senada Nozinovic), TU Braunschweig (Kerstin Ibrom), TU Darmstadt (Christina Thiele), Goethe-Uni Frankfurt (Jan Ferner), TU Freiberg (Erica Brendler), Uni Hannover (Jörg Fohrer), Uni Heidelberg (Jürgen Graf), Uni Köln (Nils Schlörer), Uni Leipzig (Lothar Hennig, Jörg Matysik), JGU Mainz (Johannes Liermann), TU München (Gerd Gemecker), Uni Regensburg (Ilya Shenderovich), Uni Siegen (Thomas Paululat), Uni Tübingen (Klaus Eichele)(siehe Anlage).

Außerdem wurden NMR-Laborleiter aus der chemischen Industrie gefragt, welches Fachwissen sie von einem Chemiker (mit Bachelor-Abschluss) im Bereich der NMR-Analytik erwarten.

Beinahe an allen teilnehmenden Universitäten werden NMR-Lehrinhalte in Vorlesungen, Übungen/Seminaren und Praktika vermittelt. Während die Theorie immer in Vorlesungen und Seminaren behandelt wird, erfolgt die Einführung in die praktische Anwendung der Methode meist im Rahmen der synthetischen Praktika von organischer und anorganischer Chemie.

Die Lehrveranstaltungen beginnen mit einer Einführung in die physikalischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie, insgesamt liegt jedoch der Schwerpunkt meist auf der praktischen Anwendung. Daher werden in erster Linie die in der synthetischen Chemie am häufigsten vorkommenden Kerne  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$  und nur selten andere Kernarten diskutiert. Für die beiden genannten ist es dann zunächst das Ziel, die spektralen Parameter der chemischen Verschiebung und der Signalintensität vorzustellen, woraus sich im Spektrum Reinheitsgrade bzw. die Zusammensetzung von Gemischen bestimmen lassen. Als nächster spektraler Parameter folgt die skalare homonukleare Kopplung von Protonen. Hier wird in Aspekte der Topizität, der Abhängigkeit vom Diederwinkel (Karplus-Kurve) und der Interpretation von Spinsystemen eingeführt. Die Abhängigkeit der Linienbreite wird

an Beispielen zum chemischen Austausch vorgestellt. Zuletzt wird an fast allen in der Erhebung befragten Hochschulen die 2D-NMR eingeführt. Dabei werden die Standard-2D-NMR-Experimente (COSY, TOCSY und NOESY) erklärt. Parallel zu diesem an Experimenten orientierten Vorgehen werden Beispiele zunehmend schwierigerer Spektren von größeren Molekülen mit komplexeren Spinsystemen und überlagernden Signalen zugeordnet. Um diese vollständig zuordnen zu können, werden die heteronuklearen Experimente (insbesondere  $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HSQC und  $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HMBC, aber auch mit anderen Heterokernen) eingeführt.

In der Praxis wird die NMR zur Kontrolle der Synthesen aus den organischen und anorganischen Praktika eingesetzt. Hierbei wird, den finanziellen und örtlichen Gegebenheiten angepasst, manchmal jedes Produkt vermessen, manchmal nur ein Teil bzw. ausgewählte Produkte oder es wird auf Spektren alter Synthesen zurückgegriffen. Praktische Anwendung von 2D NMR Experimenten ist selten Bestandteil der Lehre.

Eine genaue Aussage über die Credit Points Verteilung (CP) in Bezug auf die NMR-Lehre ist schwierig. Häufig sind die NMR-Lehrinhalte Teil größerer Veranstaltungen wie analytischen Vorlesungen oder Grundpraktika, worin der Anteil nicht spezifiziert ist. Aus der Übersicht heraus kann man im Rahmen des Bachelor Chemie ca. 5 CP den Lehrinhalten der NMR zuweisen.

Ebenfalls schwankend ist der zeitliche Aufwand für die Studenten. In 10 bis 20 Vorlesungsstunden wird die Theorie der NMR behandelt. Dazu kommen nochmals ca. 12 Stunden Übungen und Seminare, sowie die Messung und Auswertung von ca. 10 Präparaten.

Die Befragung der NMR-Laborleiter aus der chemischen Industrie ergab eine ähnliche Einschätzung des Ausbildungsbedarfs wie bei den akademischen NMR-Labors: Neben der grundsätzlichen Notwendigkeit, den Bezug zwischen NMR-Experiment und chemischer Struktur herstellen zu können sollten Chemiker auf Grund der gewachsenen Bedeutung zweidimensionaler NMR-Experimente in der Lage sein, diese zu interpretieren oder zumindest eine Auswertung nachvollziehen zu können. Darüberhinaus sollte die Bedeutung für die in kommerziellen Labors verbreitete qNMR bekannt sein und das Spektrum moderner Anwendungen zumindest aufgezeigt werden. ... [Einfügen BASF (Jürgen) sobald verfügbar]

## Empfehlungen

Um die heutige Rolle der NMR-Spektroskopie in der Lehre adäquat darzustellen werden -je nach lokaler Strukturierung des Chemiestudiums - zwei Modelle vorgeschlagen:

Modell A: Zum einen wird für das B.Sc. ein NMR-spezifischer Vorlesungsteil oder eine eigenständige Vorlesung von mindestens 10 Stunden empfohlen, wenn sich in einem späteren Studienabschnitt (M.Sc.) eine darauf aufbauende Fortgeschrittenen-Vorlesung anschließt.

Modell B: Wenn andererseits der *gesamte* relevante Lehrstoff der Kernresonanzspektroskopie schon im B.Sc.-Studium vermittelt werden soll, dann sollte die doppelte Stundenzahl angesetzt werden.

Für die Anwendung des theoretischen Wissens durch die Studierenden in der späteren wissenschaftlichen Praxis ist darüber hinaus bei beiden Modellen eine Zahl von mindestens der Hälfte, besser aber eine mit der Vorlesung vergleichbare Anzahl von Stunden für die praktische Vermittlung der Spektreninterpretation in Form von Übungen oder Seminaren unerlässlich. Ergänzend dazu sollte auch ein gewisser Anteil an Messungen eigener Proben z.B. in Form eines bewerteten Praktikumsteils ermöglicht werden, um die Probenvorbereitung, die Ansetzung der Routinemessung, sowie Auswertung von teils verunreinigten Syntheseprodukten zu üben. Zusätzlich sollte die Aufbereitung der eigenen Daten für eine Publikation beinhaltet sein.

Inhaltlich können bei Modell A neben den Prinzipien der NMR-Spektroskopie und den oben genannten Kernaspekten der NMR-Spektren die Aussagen von eindimensionalen Methoden und deren Relevanz für Strukturparameter ausführlicher behandelt werden. Die praktische Ausbildung sollte in diesem Fall ausreichend sein, um die NMR-spektroskopischen Fragestellungen in diesem Studienabschnitt liegenden Praktika eigenständig zu lösen.

Bei Modell B wird empfohlen die Grundzüge der Methode kürzer gefasst darzustellen. Hier könnte die Überlappung mit entsprechenden Einführungen in Physik oder Physikalischer Chemie genutzt werden, um mehr Zeit für die Abhängigkeiten der spektralen Parameter zu erhalten und auch noch die grundlegenden 2D-Experimente (COSY, TOCSY, NOESY/ROESY, HSQC/HMOC, HMBC) einzuführen. Insgesamt sollte der Praxisbezug im Vordergrund stehen. Dazu gehört dann auch schon in diesem Stadium die Auswertung zweidimensionaler Spektren.

Von zentraler Bedeutung ist, den Studierenden zu vermitteln warum sie sich mit der Methode auseinandersetzen: Die NMR-Spektroskopie liefert mit dem *Strukturbeweis* die experimentelle „Rückversicherung“ für die synthetischen *Strukturvorschläge*. Ebenfalls sollte das enorme Potential, das die NMR darüber hinaus besitzt, unbedingt angerissen werden.