



MASTERARBEIT / MASTER'S THESIS

Titel der Masterarbeit / Title of the Master's Thesis

„NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment“

verfasst von / submitted by

Tamina Malitz, BEd

angestrebter akademischer Grad / in partial fulfilment of the requirements for the degree of
Master of Education (MEd)

Wien, 2022 / Vienna 2022

Studienkennzahl lt. Studienblatt /
degree programme code as it appears on
the student record sheet:

UA 199 504 520 02

Studienrichtung lt. Studienblatt /
degree programme as it appears on
the student record sheet:

Masterstudium Lehramt Sek (AB)
Unterrichtsfach Chemie und Unterrichtsfach
Mathematik

Betreut von / Supervisor:

Assoz. Prof. Dr. Dennis Kurzbach

Abstract (D)

Alkoholische Mixgetränke wie Long Drinks oder Cocktails spielen eine wichtige Rolle in der Lebenswelt von Jugendlichen. Im Zuge des Projektes *NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment* wird in dieser Masterarbeit ein Konzept für einen Workshoptag im Rahmen des Schüler*innenlabors ELKE^{AUSTRIA} erarbeitet. Die Schüler*innen lernen dabei die NMR-Spektroskopie theoretisch und praktisch als naturwissenschaftliche Forschungsmethode kennen. Im Zuge des innovativen Lernangebotes wird sowohl eine qualitative Laborphase mit klassischen Nachweisexperimenten als auch eine anschließende Messung des Probenspektrums mit Hilfe eines ¹H-NMR Spektrometers für Schüler*innen nach dem *Design-Based Research Cycle* (Euler & Sloane, 2014) erstellt. Die Materialien wurden nach einem ersten Testlauf mit Expert*innen aus dem Fachbereich NMR evaluiert und überarbeitet. Die Erkenntnisse aus der weiteren Durchführung an der Universität Wien mit Schüler*innen wurden abschließend zusammengefasst und diskutiert.

Abstract (E)

Alcoholic drinks like long drinks and cocktails play an important role in adolescents' everyday life. As a part of the project *NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment* this master thesis aims to create a concept for a workshop based on the students' laboratory ELKE^{AUSTRIA} in which students learn about the theory and practical use of NMR spectroscopy as an important scientific research method. The innovative learning environment includes a qualitative analysis laboratory phase followed by a second ¹H-NMR laboratory phase to measure an unknown long drink sample. The project follows the design-based research approach after Euler and Sloane (2014) in which contents are first evaluated by NMR experts. After an optimisation phase the workshop took place at the university of Vienna. The results of this first test are summarised and discussed at the end of this thesis.

Inhaltsverzeichnis

Abstract (D)	i
Abstract (E)	i
1. Einleitung	1
2. Theoretischer Hintergrund	2
2.1. Alkoholische Mixgetränke im Unterrichtsfach Chemie	2
2.2. Außerschulischer Lernort ELKE	4
2.3. NMR-Spektroskopie zur Analyse von Inhaltsstoffen von Lebensmitteln.....	5
3. Fachliche Klärung der ^1H -NMR-Spektroskopie	7
3.1. Sachanalyse.....	7
3.1.1. Grundlagen der ^1H -NMR-Spektroskopie	7
3.1.2. Auswertung eines ^1H -NMR-Spektrums	12
3.2. Didaktische Transformation und Rekonstruktion	16
4. Methodisches Design	17
4.1. Zielsetzung.....	17
4.2. Forschungsmethodischer Zugang	17
4.3. Entwicklung von Experimenten	19
4.3.1. Laborphase II	20
4.3.2. Laborphase I	23
4.4. Entwurf eines Konzeptes für einen Experimentiertag	26
4.4.1. Rahmenbedingungen	26
4.4.2. Ablauf des Experimentiertages.....	27
4.4.2.1. Planungsmatrix	29
4.4.3. Didaktische Überlegungen	32
5. Testlauf mit Expert*innen	34
5.1. Laborphase I	34
5.2. Laborphase II	37
6. Durchführung des Experimentiertages	40
6.1. Erkenntnisse aus der Praxis.....	41

7.	Zusammenfassung und Ausblick.....	45
8.	Literaturverzeichnis	47
9.	Abbildungsverzeichnis.....	50
10.	Tabellenverzeichnis	51
11.	Anhang	52
11.1.	Transkript.....	52
11.2.	Vortragsfolien Input NMR-Spektroskopie	60
11.3.	Beobachtungsbogen Betreuer*innen	69
11.4.	Cocktailkarte	70
11.5.	Laborbuch.....	70

1. Einleitung

Diese Arbeit wurde im Zuge des interdisziplinären fachdidaktischen Projektes *NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment*, welches vom Hochschuljubiläumsfond der Stadt Wien gefördert wurde, verfasst. Ziel des Projektes ist es, das Thema *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR) Spektroskopie, in Bezug auf Long Drinks für Schüler*innen aufzubereiten und somit einerseits Interesse für diese chemische Forschungsmethode zu schaffen, als auch die wissenschaftliche Urteilskompetenz der Schüler*inne im Umgang mit alkoholischen Mixgetränken zu fördern (Groß et al., 2020).

Betrachtet man das österreichische Schulsystem, so erhalten die Schüler*innen im Falle eines Schulabschlusses in einer Allgemeinbildenden Höheren Schule eine chemische Bildung im Umfang von 6 Jahreswochenstunden. Geht man davon aus, dass in der Sekundarstufe II der zuvor behandelte Stoff wiederholt wird, so wird man sich nicht wundern, wenn im Schulunterricht meistens kaum Zeit für die Themen und Methoden der modernen chemischen Forschung bleibt. Diese erfordern oftmals ein breites Basiswissen und können im Schulunterricht dann ohnehin nur theoretisch behandelt werden, da die Kosten für die Laborgeräte das Schulbudget typischerweise übersteigen. Eine Möglichkeit im Schulunterricht einen größeren Bezug zur naturwissenschaftlichen Praxis herzustellen, sind Lehrausgänge und Exkursionen. Um die Verbindung zur Forschung herzustellen, eignet sich die Universität als außerschulischer Lernort, an dem die Schüler*innen authentische Forschungsmethoden kennenlernen können (Dähnhardt et. al, 2007).

Die Umsetzung des Projektes soll dementsprechend als innovatives Unterrichtsangebot im Zuge eines Workshoptages an der Fakultät für Chemie der Universität Wien im Schüler*innenlabor ELKE^{AUSTRIA} stattfinden. Im Rahmen dieser Masterarbeit wird ein passendes Konzept sowie passende Materialien für den Experimentiertag erstellt, welche im Anschluss evaluiert werden. Das Thema alkoholische Mixgetränke bietet dafür viele Bezüge zum Lebensalltag der Jugendlichen sowie zu ernährungswissenschaftlichen Aspekten. Diese Arbeit umfasst daher nur den chemiespezifischen Teil des Projektes und fokussiert sich auf die Entwicklung passender qualitativer Experimente als Nachweismethode für Long Drinks sowie die didaktische Aufarbeitung der NMR-Spektroskopie für Schüler*innen der Sekundarstufe II.

2. Theoretischer Hintergrund

Um ein innovatives Lernangebot zu alkoholischen Mixgetränken sowie der NMR-Spektroskopie zu erstellen, soll dieses an die Lebenswelt der Schüler*innen anknüpfen und ihnen die Bedeutung dieser Themen im Alltag aufzeigen. Eine Umsetzung des Projektes im Rahmen des außerschulischen Lernortes ELKE^{AUSTRIA} bringt hier sowohl für die Lernenden als auch für die Universität und die Studierenden viele Vorteile mit sich.

2.1. Alkoholische Mixgetränke im Unterrichtsfach Chemie

Ein wichtiger Themenbereich der Fachdidaktik Chemie ist laut Barke (2018) der Aspekt „Alltag und Chemie“, wobei hier die Ursprünge vieler Schüler*innenvorstellungen liegen. Diese aus Alltags- und Lebenserfahrungen entstandenen Vorstellungen zu den Fachinhalten der Chemie beeinflussen das Lernen und sind meistens schon sehr gefestigt, wenn die Schüler*innen erstmals in Kontakt mit dem Unterrichtsfach Chemie kommen. Im Anfangsunterricht erkennt man dies oft durch die Nutzung der Alltagssprache zur Beschreibung von chemischen Phänomenen, wobei hier durch genaues Zuhören die Präkonzepte der Schüler*innen aufgegriffen werden können. Vorhandene Schüler*innenvorstellungen haben nun einerseits den Nachteil, dass vorliegende Präkonzepte teilweise nicht mit den naturwissenschaftlichen Erkenntnissen übereinstimmen und andererseits den Vorteil, dass durch kognitive Konfliktsituationen das Interesse und die Neugierde der Lernenden für die Fachinhalte erhöht werden können (Barke, 2018).

Bezieht man den Alltag und die Lebenswelt der Jugendlichen in den Unterricht ein, steigt nach Barke (2018) die intrinsische Motivation der Lernenden. Das Thema alkoholische Mixgetränke bringt einen starken Alltagsbezug und viele fachliche Facetten für den Chemieunterricht mit sich. Welche Relevanz das Thema für Schüler*innen in Österreich hat, kann mit Hilfe diverser Statistiken aufgezeigt werden:

Obwohl der Erwerb und Konsum von Bier und Wein in Österreich laut Jugendschutzgesetz erst ab einem Alter von 16 Jahren, höherprozentige Spirituose dann erst ab 18 Jahren in der Öffentlichkeit erlaubt sind, liegt das Einstiegsalter für den Alkoholkonsum bei 13 bis 15 Jahren. Grundsätzlich ist seit Beginn des Jahrhunderts ein Rückgang des Alkoholkonsums bei Jugendlichen zu verzeichnen, jedoch liegt Österreich im europäischen Vergleich sehr weit vorne (Skala, 2020). Betrachtet man die Ergebnisse der WHO-Studie HBSC (*Health Behaviour in School-aged Children*) vom Jahre 2018, so sind die beliebtesten alkoholhaltigen Getränke bei Schüler*innen der 9. und 11. Schulstufe Bier und Wein, jedoch sind die so genannten „Alkopops“ weiterhin im Trend, wie in Tabelle 1 ersichtlich ist (Felder-Puig et al., 2019). Unter Alkopops versteht man alkoholische Mischgetränke, oft in Kombination mit Fruchtsäften,

welche einen hohen Zuckeranteil aufweisen. Diese werden seit Ende der 1990er Jahre verkauft und sind auf Grund ihres süßen Geschmacks, welcher den bitteren Alkoholgeschmack oft nicht mehr wahrnehmen lässt, vor allem bei Jugendlichen beliebt (Tossmann & Weber, 2008).

*Tabelle 1: Konsum (mindestens einmal wöchentlich) von alkoholischen Getränken bei Schüler*innen der 9. und 11. Schulstufe (erstellt nach Felder-Puig et al., 2019)*

	männlich		weiblich	
	9.	11.	9.	11.
Bier	19,4%	39,4%	8,0%	11,8%
Wein	7,8%	18,9%	9,0%	22,9%
Spirituosen	11,2%	23,7%	10,7%	18,8%
Alkopops	9,9%	17,5%	10,0%	16,0%
Andere alkoholische Getränke	11,1%	16,6%	10,6%	17,2%

Abgesehen von Alkopops, sind weitere alkoholische Mischgetränke in Kombination mit Energy Drinks populär. Die *European Food Safety Authority* gibt in einem Bericht aus dem Jahr 2013 an, dass 68% der befragten Jugendlichen (gesamt 31.070) zumindest einmal in den letzten 12 Monaten einen Energy Drink konsumiert haben. Davon haben 53% der Teilnehmer*innen ein gemeinsames Trinken mit Alkohol angegeben. Betrachtet man nur die Ergebnisse für Österreich, liegt der Konsum von Alkohol in Kombination mit Energy Drinks bei unter 18-jährigen bei 71% (Zucconi et al., 2013).

Erwägt man die Folgen des Konsums von Alkohol mit einem hoch coffeinhaltigen Mixgetränk, so sind hier die negativen Effekte im Vergleich zu Alkoholkonsum ohne Energy Drinks verstärkt. Bekannte Folgen des Alkoholkonsums sind laut Marczinski und Fillmore (2014) die Tendenz zum *Binge Drinking* (extensiver Konsum von Alkohol), alkoholisiertes Fahrverhalten, risikohaftes Sexualverhalten oder die Entwicklung einer Alkoholabhängigkeit. Allein durch die Coffeinzugabe können schon Nebeneffekte wie eine erhöhte Herzfrequenz sowie ein steigender Blutdruck festgestellt werden. (Marczinski & Fillmore, 2014).

Diese Daten zeigen, dass alkoholische Mixgetränke einen Teil der Lebenswelt von Jugendlichen bilden und eine reflektierte und gesundheitsförderliche Auseinandersetzung mit diesen sinnvoll ist. Angebote bzw. Materialien für den Schulunterricht, welche gezielt die Urteils- und Entscheidungskompetenzen der Jugendlichen zu diesem Thema fördern, gibt es bisher nur wenige (Groß et al., 2020).

Das Thema Alkohol kann in vielen Unterrichtsfächern, wie Chemie, Biologie, Ernährung und Haushalt oder Geschichte und Politische Bildung, aufgegriffen werden. Durch die hohe

Alltagsrelevanz eignet sich das Thema für einen problem- und praxisorientierten Zugang (Tossmann & Weber, 2008). Um nicht nur den chemischen Aspekt des Themas, sondern auch die gesellschaftliche Relevanz und die gesundheitlichen Auswirkungen miteinzubeziehen, bietet sich hier ein interdisziplinärer Zugang in Verbindungen mit der Ernährungs- und Verbraucher*innenbildung an (Groß et al., 2020).

2.2. Außerschulischer Lernort ELKE

Bei dem außerschulischen Lernort ELKE handelt es sich um ein Labor für Schüler*innen, welche sowohl an der Universität Köln als auch an der Universität Wien, durch unterschiedliche Themenangebote für das Fach Chemie begeistert werden sollen. Der Name ELKE steht für das *Experimentieren, Lernen und Kompetenzen erwerben*, einerseits als klassisches Laborsetting für Schüler*innen und gleichzeitig als Lehr-Lern-Erfahrung für Studierende. Für die Betreuung der Schüler*innen während des Labors werden gezielt Studierende aus dem Lehramtstudium Chemie eingesetzt, welche durch die Praxiserfahrung im Umgang mit den Lernenden ihre Lehrkompetenzen erweitern können. Die Inhalte des Labors sollen als außerschulischer Lernort mit direkter curricularer Anbindung dienen, damit sie an das innerschulische Lernen anknüpfen können (Groß & Schumacher, 2020).



Abbildung 1: Außerschulischer Lernort ELKE (Groß & Schumacher, 2020)

Außerschulische Lernorte in Form eines Schüler*innenlabors bieten den Lernenden viele Möglichkeiten, ihr Interesse für Naturwissenschaft und Technik zu steigern. Somit können Schüler*innen durch die Teilnahme ihre Vorstellung von naturwissenschaftlich-technischen Berufsbildern reflektieren und im Idealfall mehr Begeisterung für diese, oft mit Abneigung oder Angst behafteten Unterrichtsfächer, aufbringen. Durch das authentische Arbeiten und die selbstständige Auseinandersetzung mit Forschungsthemen wird auch das Lernen in diesem außerschulischen Rahmen begünstigt. Weiters ist es an vielen Schulstandorten oft nicht möglich, ein zeitgemäßes Bild von der naturwissenschaftlichen Forschung zu vermitteln, da die benötigten Geräte und Materialien nicht vorhanden sind. Ein Lehrausgang in ein modernes Labor bietet somit die Chance, aktuelle Forschungsmethoden kennenzulernen und die Bedeutung der naturwissenschaftlichen Forschung für die Gesellschaft zu erkennen (Dähnhardt et. al, 2007).

Oftmals besuchen Schulklassen außerschulische Lernorte, jedoch werden die dort behandelten Themen nicht weiter im Unterricht aufgegriffen (Steffensky, 2007). Das Schüler*innenlabor ELKE legt hier Wert auf eine gute Einbettung in den Unterricht und stellt oft zusätzliches Vor- bzw. Nachbereitungsmaterial für die Lehrkraft zur Verfügung. Knüpfen die Themen der Lehrausgänge nicht an das Vorwissen der Schüler*innen an, kann dies vor Ort zu Schwierigkeiten bei der Lösung der Aufgabenstellungen führen. Daher werden in Rahmen von ELKE flexible Lernmaterialien erstellt, welche didaktisch an die Zielgruppe angepasst werden können (Groß & Schumacher, 2018).

Ein weiterer Aspekt des Schüler*innenlabors ist die Lehr-Lerngelegenheit für Studierende. Diese können hier erste Erfahrungen im Umgang mit Schüler*innenvorstellungen sammeln und einen Theorie-Praxis-Bezug zu den Inhalten des Lehramtstudiums aufbauen. In den Schüler*innenlaboren spricht man oft von idealen Lernsituationen, da meistens die Motivation der Lernenden größer ist, ein Thema sehr ausführlich ohne Zeitdruck behandelt werden kann und die Lerngruppen sehr klein sind. Somit können die angehenden Lehrkräfte hier in einem geschützten Rahmen ihre Lehrkompetenzen erweitern und gleichzeitig ihr fachliches Wissen stärken (Steffensky, 2007).

2.3. NMR-Spektroskopie zur Analyse von Inhaltsstoffen von Lebensmitteln

Ausgehend von alkoholischen Mixgetränken erreicht man in einem schulischen Laborsetting schnell die Grenzen der Analysemöglichkeiten. Zwar lässt sich Alkohol durch unterschiedliche

qualitative Experimente, wie der Brennprobe oder mittels Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung nachweisen, jedoch sind diese Versuche sehr zeitaufwändig und geben keine genaue Auskunft, ob es sich hier wirklich um Ethanol oder einen anderen Alkohol handelt (Russek, 2020). Betrachtet man weitere Analysemethoden, welche beispielsweise in der Forschung oder der Industrie verwendet werden, stößt man auf die Methode der *Nuclear Magnetic Resonance* (kurz NMR) oder Kernmagnetresonanz-Spektroskopie. Im Alltag wird diese oft mit der Magnetresonanztomographie (MRT) verbunden. Hier wird das Prinzip der NMR-Spektroskopie genutzt, um den Wasserstoffgehalt des menschlichen Gewebes nachzuweisen und damit beispielsweise tumoröses Gewebe nachzuweisen (aprentas, 2017). Dieser Anwendungsbereich ist jedoch nur ein Teil des Potentials dieser Analysemethode, sehr häufig wird sie zur Charakterisierung und damit einhergehenden Qualitätskontrollen (Authentizität, Haltbarkeit, Ursprungskontrolle etc.) von Nahrungsmittelkomponenten, auch *food profiling* genannt, verwendet. Dabei gilt speziell die ^1H -NMR-Spektroskopie als aufstrebende Technik in Bezug auf die Produktion, Verarbeitung und Lagerung von Nahrungsmitteln (Lamanna, 2013).

Die Vorteile dieser Methode gegenüber den zuvor beschriebenen, qualitativen Nachweismethoden sind vor allem die kurzen Messzeiten, sowie die geringe Menge an Probenmaterial. Auf Grund der hohen Anschaffungskosten des NMR-Spektrometers ist diese Methode dem schulischen Chemieunterricht im Regelfall vorenthalten, wobei die Grundzüge der Analysemethode in diversen Schulbüchern angeführt werden (Magyar et al., 2020).

Mit Hilfe eines NMR-Spektrums ist es oft möglich, die gesamte Struktur eines Moleküls aufzuklären, wodurch sich viele Anwendungsgebiete ergeben (Bruice & Reiser, 2011).

In Bezug auf das Thema alkoholische Mixgetränke sei hier die Qualitätskontrolle von industriell hergestellten Getränken, wie etwa Soft Drinks angeführt. Diverse Lebensmittelgesetze regeln die Obergrenze an Coffein, Süßungsmitteln oder Konservierungsstoffe, welche mit Hilfe der NMR-Analysemethode quantitativ nachgewiesen werden können (Ackermann et al., 2016).

In Bezug auf Trinkalkohole findet die NMR-Spektroskopie oft Nutzen bei der Qualitätskontrolle und dem Herkunftsvergleich von Wein (Anastasiadi et al. 2009). Hier gibt es bereits eine kommerziell erhältliche Version eines vollautomatisierten Spektrometers (*Wine-Screener* der Firma Bruker), mit Hilfe dessen Weinbauern ohne chemische Vorkenntnisse, die Komponenten ihres Produktes überprüfen können (Ackermann et al., 2016).

Das genaue Messprinzip dieser Analysemethode sowie die Vorgehensweise bei der Interpretation eines NMR-Spektrums, bezogen auf die ^1H -NMR-Spektrometrie, wird im nächsten Kapitel, erörtert.

3. Fachliche Klärung der ^1H -NMR-Spektroskopie

Um das Fachgebiet der NMR-Spektroskopie in den Experimentiertag einzugliedern und später eine didaktische Transformation sowie Rekonstruktion des Themengebietes durchzuführen, wird die ^1H -NMR-Spektroskopie zunächst im Zuge einer Sachanalyse fachlich aufgearbeitet.

3.1. Sachanalyse

Eine wiederkehrende Herausforderung in den unterschiedlichen Teilgebieten der naturwissenschaftlichen Forschung ist die korrekte strukturelle Aufklärung chemischer Verbindungen auf der Teilchenebene. Durch das Wissen über die Zusammensetzung und Struktur einer Verbindung oder eines Moleküls können einerseits Vorhersagen über Reaktionen getroffen werden oder es kann auch eine natürlich vorkommende Verbindung im Labor analysiert werden (aprentas, 2017). Im Laufe der Zeit wurden unterschiedliche Methoden zur Strukturaufklärung entwickelt, wobei im Jahre 1946 erstmals magnetische Kernresonanzsignale nachgewiesen werden konnten (Morris, 2019).

Die Entwicklung der NMR-Spektroskopie wurde von unterschiedlichen Naturwissenschaftler*innen geprägt und von 1902 bis 2003 mit acht Nobelpreisen ausgezeichnet. Die Kernresonanzspektroskopie wird heutzutage sowohl von Chemiker*innen, Physiker*innen, Biochemiker*innen als auch Mediziner*innen genutzt und spielt eine wichtige Rolle in der naturwissenschaftlichen Forschung (aprentas, 2017).

3.1.1. Grundlagen der ^1H -NMR-Spektroskopie

Das elektromagnetische Spektrum liefert die Grundlage für alle elektromagnetischen Spektroskopie-Methoden, zu denen auch die NMR-Spektroskopie zählt. Bei Spektroskopie handelt es sich generell um eine physikalische Methode zur quantitativen Messung der Absorption oder Emission von elektromagnetischer Strahlung. Je nach Analysemethode muss eine passende Wellenlänge zur Messung verwendet werden (siehe Abbildung 2). Bei der Kernmagnetresonanzspektroskopie wird eine Änderung des Atomkernspins durch Absorption hervorgerufen, welche im Bereich der Radiowellen bei einer Wellenlänge von 1 bis 100m auftritt. (aprentas, 2017)

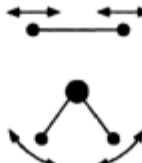
Wellenlänge	$1 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^1$ nm	
Frequenz	$3 \cdot 10^8$	$3 \cdot 10^{12}$	$3 \cdot 10^{13}$	$3 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{16}$ Hz	
Spektralbereich	Radiowellen	Mikrowellen	Infrarot		VIS	Ultraviolett	Röntgen
Anregungsfähiges System	 Spinänderung von Atomkernen	 Molekülrotationen	 Atom und Atomgruppen Molekülschwingungen		 Valenzelektronen Elektronenanregung		 Anregung von Rumpfelektronen
Methode	NMR	Mikrowellen	IR		UV/VIS		Röntgenfluoreszenz

Abbildung 2: Anregungsarten der elektromagnetischen Spektroskopie (modifiziert nach aprentas, 2017)

Eine Möglichkeit, um das Messprinzip der NMR-Spektroskopie vereinfacht darzustellen, ist das Modell eines Atomkernes als Stabmagnet (Keeler, 2010). Durch die Zusammensetzung der elektrisch positiv geladenen Protonen und der neutralen Neutronen entsteht im Atomkern ein Drehimpuls, welcher als Kernspin bezeichnet wird. Es handelt sich dabei um ein rein quantenmechanisches Phänomen, welches anschaulich nicht zu erklären ist. Der Kernspin eines Atoms wird mit der Kernspinquantenzahl I beschrieben. Je nach Atomkern ergeben sich hierfür positive ganzzahlige oder halbzahlige Werte. Die Atomkerne drehen sich in diesem Modell um ihre eigene Hauptachse, wobei durch die Bewegung ihrer elektrischen Ladung bei Kernen mit $I \neq 0$ ein Magnetfeld erzeugt wird. Die Ausrichtung dieses Magnetfeldes ist abhängig von der Drehrichtung des Magneten. Liegt ein halbzahliger Wert für die Spinquantenzahl vor (durch eine ungerade Anzahl der Protonen und bzw. oder Neutronen), dann ergeben sich für das magnetische Moment μ zwei gleich große, entgegengesetzte Werte für die beiden Richtungen (aprentas, 2017; Bruice & Reiser, 2011; Keeler, 2010).

Der Gesamtdrehimpuls P kann mit Hilfe der nachstehenden Formeln berechnet werden, wobei h die Planck'sche Konstante bezeichnet.

$$P = \frac{h}{2\pi} \cdot \sqrt{I(I+1)}$$

Formel 1: Gesamtdrehimpuls P

Das gyromagnetische Verhältnis γ wird mit dem Quotienten des magnetischen Moment μ und dem Gesamtdrehimpuls P beschrieben und gibt Auskunft über die Nachweisempfindlichkeit eines bestimmten Atomkernes in der Magnetresonanzspektroskopie.

$$\gamma = \frac{\mu}{P}$$

Formel 2: Gyromagnetisches Verhältnis γ

Daraus kann man schließen, dass nicht magnetisch aktive Atomkerne eine gerade Massenzahl und eine gerade Ordnungszahl besitzen (Kernspinquantenzahl $I = 0$). Dies hat zur Folge, dass beispielsweise die Atomkerne von ^{16}O oder ^{12}C nicht für die NMR-Spektroskopie genutzt werden können, obwohl ihr natürliches Vorkommen sehr hoch wäre. Alternativ zeigen ^1H -Atomkerne mit nur einem Proton und keinem Neutron eine magnetische Aktivität und werden durch ihre natürliche Häufigkeit von ca. 99,985% für viele Messungen in der organischen Chemie verwendet. Weitere relevante Isotope für die Kernmagnetresonanzspektroskopie sind ^{13}C , ^{31}P oder ^{19}F (aprentas, 2017; Keeler, 2010).

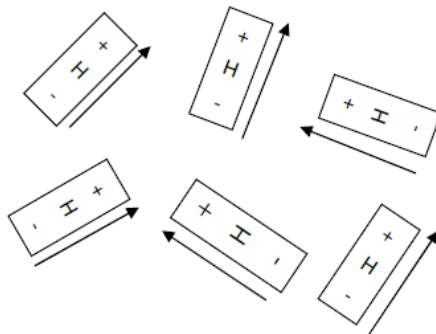


Abbildung 3: ^1H -Atomkerne als Stabmagneten

Ausgehend von diesem Modell, lässt sich das Messprinzip der ^1H -NMR-Spektroskopie, wie folgt beschreiben: In der Abbildung 3 sind mehrere ^1H -Atome in Form von Stabmagneten dargestellt. Zunächst ist die Ausrichtung ihres Magnetfeldes beliebig. Wird jedoch ein äußeres, homogenes Magnetfeld angelegt (siehe Abbildung 4), orientieren sich die Atomkerne parallel (mit) oder antiparallel (gegen) die magnetischen Feldlinien des Magnetfeldes B_0 . Dadurch entstehen unterschiedliche Energieniveaus, welche sich für die ^1H -Atomkerne mit

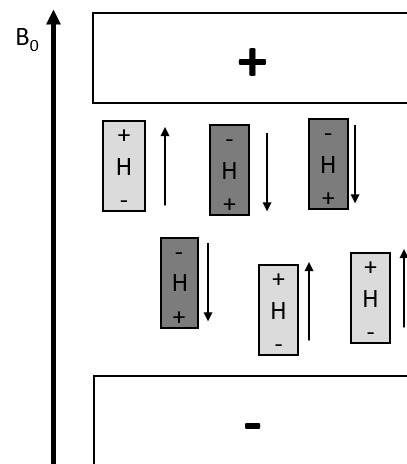


Abbildung 4: Ausrichtung der ^1H -Atomkerne nach dem Anlegen eines äußeren Magnetfeldes

einem Kernspin von $I = \frac{1}{2}$ folgendermaßen beschreiben lassen: Richtet sich ein Atomkern parallel zum Magnetfeld aus, wird hierfür Energie abgegeben und der neue Zustand ist energieärmer. Bei einer antiparallelen Ausrichtung kann dies als eine Umorientierung der magnetischen Richtung beschrieben werden. Es wird ein Energiebetrag aufgenommen und ein Zustand höherer Energie erreicht (aprentas, 2017, Keeler, 2010).

Ein Wechsel dieser Energieniveaus ist durch Zufuhr von Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung möglich (siehe Abbildung 5). Zahlenmäßig befinden sich mehr Atomkerne im energieärmeren Zustand parallel zum Magnetfeld, wodurch eine Absorption gegenüber einer Emission bevorzugt wirkt. Hierfür muss die eingestrahlte Energie genau die Resonanzfrequenz des Atomkernes treffen. Die benötigte Energie hängt von der Stärke des Magnetfeldes B_0 sowie vom gyromagnetischen Verhältnis γ des Atomkernes ab. Je stärker das Magnetfeld ist, desto größer wird der Energieunterschied zwischen den Besetzungszuständen. Damit ergibt sich die nachstehende Resonanzbedingung:

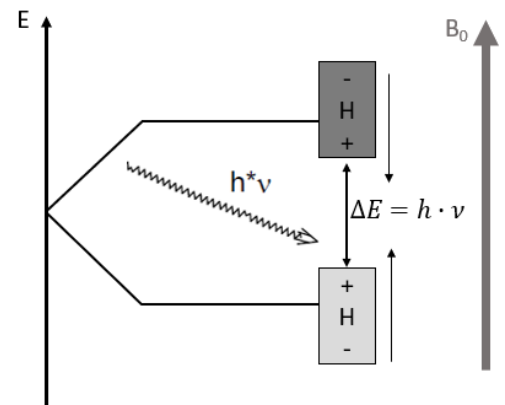


Abbildung 5: Wechsel der Energieniveaus

$$\Delta E = h \cdot \nu = \frac{h}{2\pi} \cdot \gamma \cdot B_0$$

Formel 3: Energiedifferenz

Kommt es zu diesem Resonanzfall, erfolgt eine Spin-Umkehrung und Energie wird absorbiert. Möchte man diese Bedingung technisch umsetzen, wäre ν die Arbeitsfrequenz des Spektrometers, welche sowohl vom Magnetfeld B_0 als auch dem gyromagnetischen Verhältnis γ der untersuchten Probe abhängt (Bienz et al., 2016; Bruice & Reiser, 2011).

Dieses Prinzip macht sich die NMR-Spektroskopie zu nutzen. Bei der *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* wird daher ein Atomkern (*Nuclear*) bzw. ein Molekül in ein äußeres Magnetfeld gebracht. Elektromagnetische Wellen im Bereich der Radiofrequenz werden eingestrahlt, um so die benötigte Energie für eine Resonanz des Atomkerns, also die Umkehrung des Kernspins, aufzubringen. Die durch die Atomkerne absorbierte Energie wird gemessen. Das Signal wird technisch verstärkt und durch einen Computer ausgewertet und mathematisch umgewandelt. Als Ergebnis erhält man ein NMR-Spektrum, welches charakteristisch für die untersuchten Atome bzw. das Molekül ist (Bruice & Reiser, 2011).

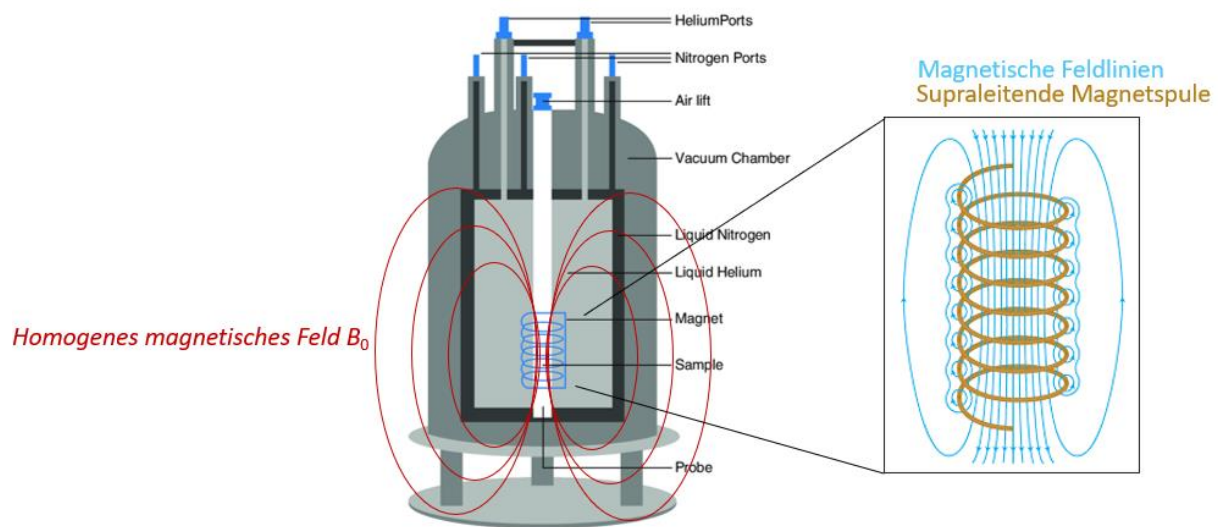


Abbildung 6: Aufbau eines Spektrometers (Kurzbach, 2020)

In der obenstehenden Abbildung 6 sieht man den allgemeinen Aufbau eines Spektrometers für die NMR-Spektroskopie. Die Probe wird genau in die Mitte des Magnetfeldes, der supraleitenden Spule, eingebracht. Der beidseitig offene Zylinder, in dem sich der Magnet befindet, wird von einem doppelten Dewargefäß umfaßt, welches im Inneren mit flüssigem Helium (Sdp. -269°C) und von außen mit flüssigem Stickstoff (Sdp. -196°C) gekühlt wird. An das Spektrometer ist ein Hochfrequenzsender sowie -empfänger angeschlossen, welche das Signal auch entsprechend verstärken können und es an eine PC-Workstation für die mathematische Auswertung des Signales weiterleiten (Bruice & Reiser, 2011).

3.1.2. Auswertung eines ^1H -NMR-Spektrums

Misst man ein ^1H -NMR-Spektrum einer Verbindung, erhält man für jedes Proton ein Signal, welches eine gewisse Lage auf der Frequenz-Achse hat, die abhängig von ihrer chemischen Umgebung bei einer unterschiedlichen Frequenz vorliegt. Diese chemische Verschiebung entsteht aufgrund der Elektronendichte um den zu messenden Kern, welche das Magnetfeld des Spektrometers abschirmen oder entschirmen kann. Liegt eine hohe Elektronendichte vor, wird ein Magnetfeld induziert, welches dem äußeren Magnetfeld entgegenwirkt. Benachbarte Atomkerne werden somit abgeschirmt und es erfolgt eine Verschiebung Richtung Hochfeld bei niedrigeren Frequenzen. Eine entgegengesetzte Verschiebung Richtung Tieffeld liegt bei abgeschirmten Atomkernen auf Grund der niedrigen Elektronendichte vor. Die Elektronendichte der Atomkerne wird von unterschiedlichen Faktoren beeinflusst, wie zum Beispiel durch induktive oder mesomere Effekte (Bruice & Reiser, 2011).

Bei den ^1H -Resonanzlinien wird die chemische Verschiebung auch stark durch die Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen beeinflusst, wodurch die Wasserstoffatome austauschbar sind und für benachbarte Gruppen keinen eindeutigen Spin aufweisen. Dieser Effekt wirkt sich auch auf die später beschriebene Spin-Spin-Kopplung aus. Zuletzt haben noch experimentelle Rahmenbedingungen wie das verwendete Lösungsmittel, pH-Wert, Temperatur und die Konzentration der Probe einen Einfluss auf die chemische Verschiebung (aprentas, 2017).

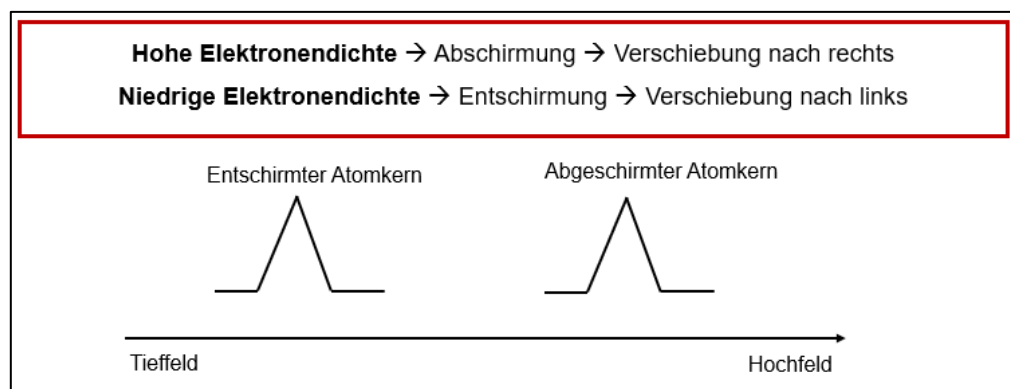


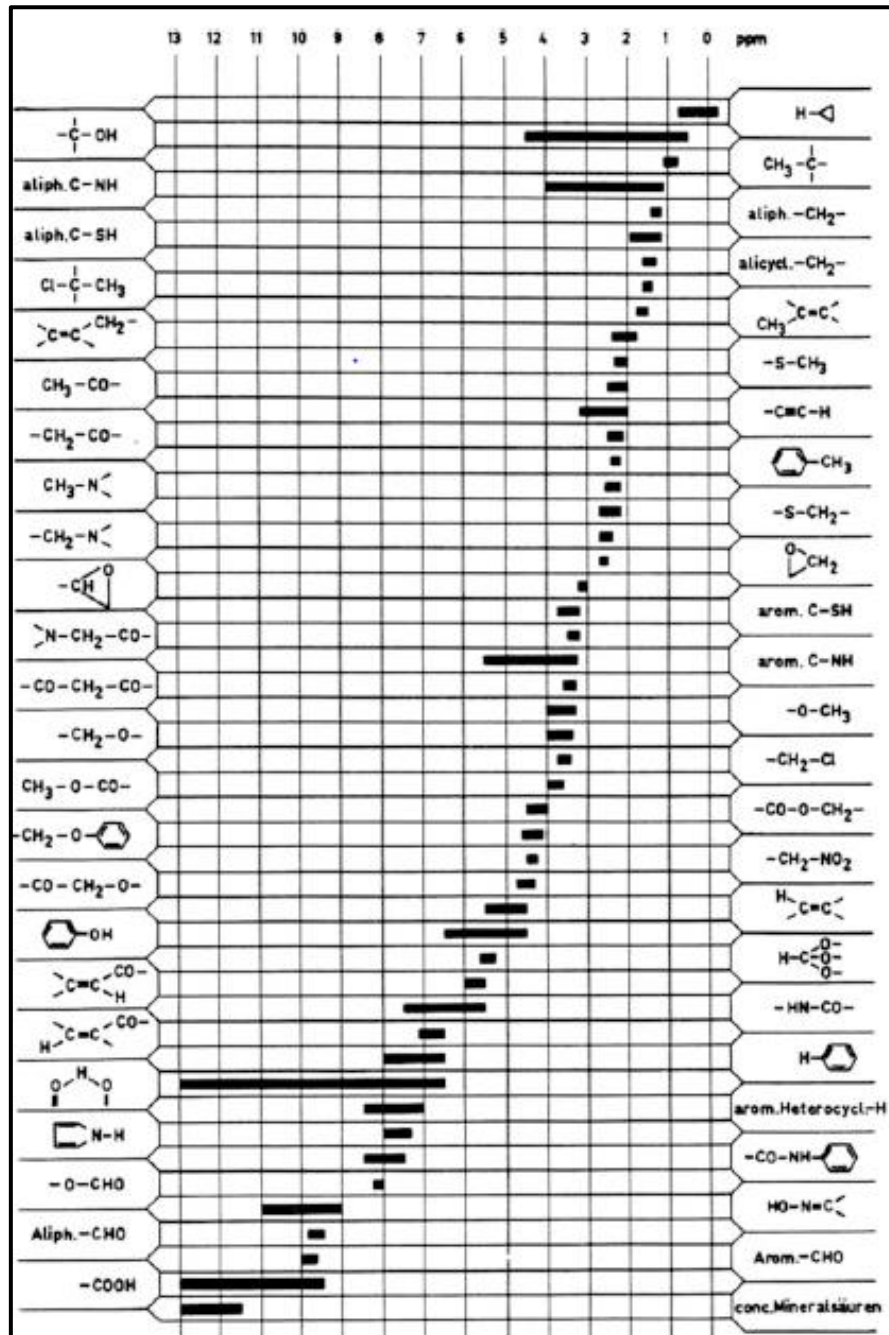
Abbildung 7: Chemische Verschiebung

Um eine chemische Verschiebung anzugeben, muss ein Vergleichswert herangezogen werden. Als Standard wird Tetramethylsilan TMS verwendet und als Referenzwert mit einer Verschiebung von 0 *ppm* (*parts per million*) festgelegt. Alle weiteren Signale werden als Abweichung von diesem Referenzwert in *ppm* angegeben.

Aus historischen Gründen befindet sich das Hochfeld auf der rechten Seite des Spektrums und das Tieffeld auf der linken, wodurch das Referenzsignal mit TMS auf der rechten Seite

der x-Achse liegt. Die Beschriftung der x-Achse in ppm erfolgt somit aufsteigend von rechts nach links (Bruice & Reiser, 2011).

Tabelle 2: Hilfestellung zur Interpretation von ^1H -NMR-Spektren (modifiziert nach aprentas 2017)



Man spricht von chemisch äquivalenten Atomkernen eines Moleküls, wenn sich diese durch Symmetrioperationen ineinander überführen lassen (Bienz et al., 2016). Betrachtete man die Verbindung Ethanol, so liegen hier drei unterschiedliche chemische Umgebungen für die Wasserstoffatome vor. Die Protonen der drei drehbaren Methylgruppen sind chemisch äquivalente Protonen, da sie eine gleichwertige Umgebung vorweisen, wodurch sie im ^1H -

NMR-Spektrum zu einem gemeinsamen Signal führen. Dasselbe gilt für die Protonen der Methylengruppe. Der an den elektronegativen Sauerstoff gebundene Wasserstoff wird am stärksten entschirmt und liegt daher im Tieffeld. Als nächstes folgt die Methylengruppe und rechts im Hochfeld liegt die Methylgruppe, da sie den größten Abstand zum Sauerstoff vorweist (Bruice & Reiser, 2011).

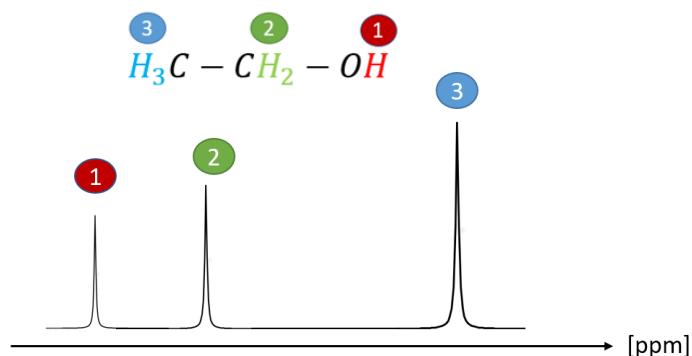


Abbildung 8: Chemische Verschiebung am Beispiel von Ethanol

Wie in Abbildung 8 dargestellt, ist die Höhe der Signale unterschiedlich. Diese Intensität der Signale kann mit Hilfe der Anzahl der chemisch äquivalenten Protonen beschrieben werden. Die Methylgruppe enthält hier am meisten Wasserstoffatome, wodurch ihr Signal auch am größten ist. Da man keine exakt scharfen Signale messen kann, werden diese als glockenförmige Peaks (Lorenzfunktion) dargestellt. Die Anzahl der beteiligten Atome kann mittels der Fläche der Signale berechnet werden (Bruice & Reiser, 2011).

Als dritter wichtiger Faktor für die Charakteristik eines ^1H -NMR -Spektrums ist die Spin-Spin-Koppelung zu erwähnen. Jeder Atomkern besitzt selbst ein kleines Magnetfeld, dessen Resonanz durch die Nähe der benachbarten Atomkerne mit unterschiedlicher Umgebung beeinflusst wird. Es kommt zu einer Aufspaltung des Signals in symmetrisch angeordnete Teillinien, welche durch die mathematischen Regeln des Pascal'schen Dreiecks vorhergesagt werden können (siehe Abbildung 9) (Bruice & Reiser, 2011) .

Anzahl der Nachbarn	Pascal'sches Dreieck	Aufspaltung
0	1	Singulett - 1 Signal
1	1 1	Dublett – 2 Signale
2	1 2 1	Triplet – 3 Signale
3	1 3 3 1	Quartett – 4 Signale
4	1 4 6 4 1	Quintett – 5 Signale
5	1 5 10 10 5 1	Sextett – 6 Signale

Abbildung 9: Aufspaltung der Signale auf Grund der Spin-Spin-Koppelung (erstellt nach Bienz et al, 2016)

Am Beispiel von Ethanol erfährt die Methylgruppe eine Spin-Spin-Kopplung mit den zwei Protonen der Methylengruppe. Auf Grund der zwei benachbarten Protonen erfolgt eine Aufspaltung in ein Triplett. Die Methylengruppe selbst hat vier Nachbarn und würde zu einem Quintett führen. Für das Signal des am Sauerstoff gebundenen Protons würde folglich ein Triplett vermutet werden, da dieses mit der Methylengruppen zwei Nachbarn besitzt. Misst man jedoch das Spektrum (siehe Abbildung 10) eines Trinkalkohols, liegt hier ein Singulett vor. Weiters zeigt die Methylengruppe eine Aufspaltung in ein Quartett. Wie man an diesem Beispiel bereits erkennt, überlagern sich die unterschiedlichen Signale oftmals. Ethanol liegt hier nicht in seiner reinen Form vor und die OH-Gruppe von Ethanol unterliegt einem Protonenaustausch mit der OH-Gruppe des Wassers. Somit erfährt die Methylengruppe nur die Spin-Spin-Kopplung durch drei Nachbarn (Quartett) und die an den Sauerstoff gebundenen Protonen werden als chemisch äquivalente Protonen ohne Nachbarn zu einem Singulett zusammengefasst (Bruice & Reiser, 2011).

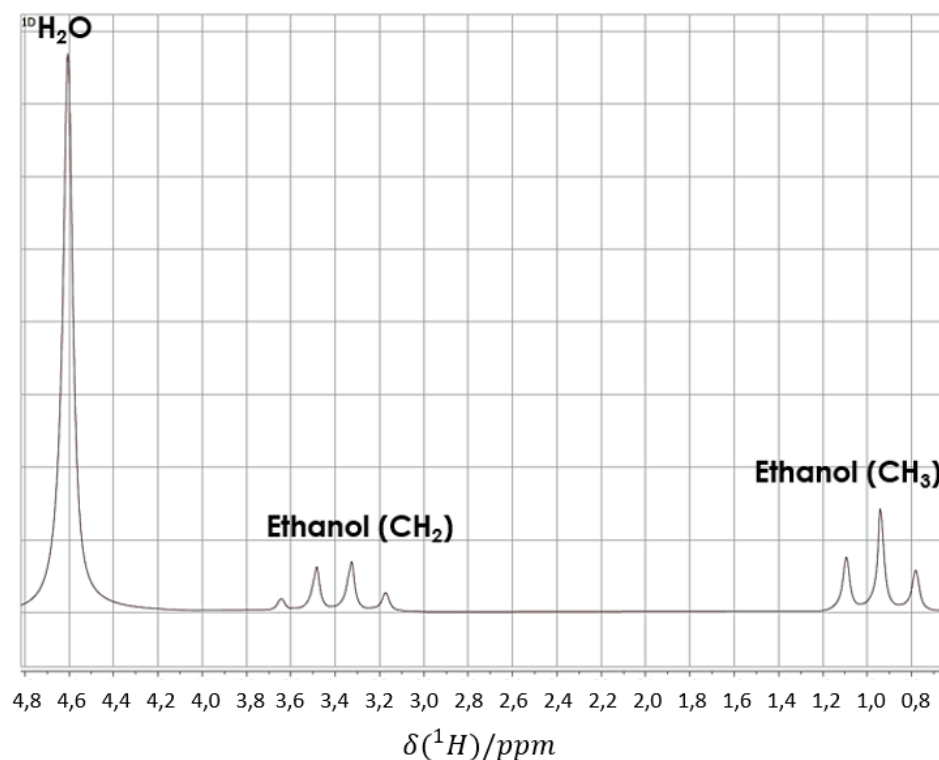


Abbildung 10: ^1H -NMR-Spektrum eines Trinkalkohols (hier Vodka)

3.2. Didaktische Transformation und Rekonstruktion

Da die NMR-Spektroskopie ein sehr komplexes Themengebiet ist, wird für den Experimentiertag eine didaktische Transformation für eine 12. Schulstufe angedacht. Die Lernenden sollen hier die Grundlagen der organischen sowie analytischen Chemie bereits beherrschen, da ansonsten die Interpretation der NMR-Spektren nicht möglich ist. Ziel der Aufbereitung ist es, die Grundzüge der NMR-Spektroskopie zu vermitteln und damit in der Praxis einfache ^1H -NMR-Spektren von alkoholischen Mixgetränken zu interpretieren.

Um eine Überforderung der Lernenden zu vermeiden, wird auf die Verwendung von nicht zwingend nötigen Zusammenhängen, basierend auf der didaktischen Reduktion, verzichtet. Methodisch soll die Thematik im Zuge eines interaktiven Vortrages vermittelt werden, wobei viele praktische Bezüge und Beispiele angedacht sind.

Ausgehend von anderen spektroskopischen Analysemethoden, wie etwa der UV/VIS-Spektroskopie, welche den Lernenden bereits bekannt sein sollte, wird mit Hilfe des Modells des Atomkernes als Stabmagneten die NMR-Spektroskopie eingeführt (aprentas, 2017). Die genauen Bedingungen für die Entstehung eines magnetischen Moments sollen hier nicht näher erörtert werden, da sie für das Verständnis der Messgrundlagen nicht notwendig sind. Das Anlegen eines äußeren Magnetfeldes kann in der Praxis mit Hilfe einer Magnetspule demonstriert werden. Hier können die Lernenden die Kraft des Magnetfeldes auf einen kleinen Stabmagneten nachvollziehen, indem sie diesen in die Mitte des Feldes halten und versuchen, ihn zu drehen. Weiters kann man die unterschiedlichen Ausrichtungen des Magnetfeldes mittels Gaußmeters messen. Diese praktischen Erfahrungen, begleitend zu einem theoretischen Input, sollen das Verständnis der Lernenden zu den Messgrundlagen der NMR-Spektroskopie fördern. Für die Theorievermittlung werden Vortragsunterlagen für eine schüler*innengerechte Vermittlung erstellt, welche den oben genannten Grundsätzen entsprechen (siehe Anhang, Kapitel 11.2).

Bei der Interpretation der NMR-Spektren sollen die Lernenden die Grundlagen der chemischen Verschiebung, der Spin-Spin-Koppelung sowie der Signalintensität kennenlernen. Für die Messung und Charakterisierung der selbst gemessenen Spektren ist es jedoch nicht notwendig, dass die Schüler*innen alle Signale eines Spektrums eindeutig identifizieren können. In der Fachsprache wird hier von einem NMR *finger printing* gesprochen, wobei nach charakteristischen Signalen einer Komponente Ausschau gehalten wird und diese Verbindung so in einer Probe nachgewiesen werden kann. Diese Methode wird auch in der Nahrungsmittelforschung verwendet, zum Beispiel zur Analyse des Einflusses der Erntezeit auf Agrarprodukte (Santucci et al., 2015).

Bezogen auf die alkoholischen Mixgetränke sollen die Lernenden hier eine unbekannte Probe eines Long Drinks analysieren und mit Hilfe von Vergleichsspektren die Inhaltsstoffe bestimmen.

4. Methodisches Design

Um ein passendes Design für einen Workshoptag zur NMR-Spektroskopie als interdisziplinäres Projekt zwischen den Unterrichtsfächern Chemie und Haushaltsökonomie und Ernährung zu finden, wurde ausgehend von den Zielen des Projektes ein passender forschungsmethodischer Zugang gewählt und ein Konzept für die Umsetzung erarbeitet.

4.1. Zielsetzung

Das Hauptziel dieser Arbeit lautet wie folgt:

- Entwicklung eines innovativen Lernangebotes für Schüler*innen der Sekundarstufe II zum Thema alkoholische Mixgetränke und NMR-Spektroskopie.

Um dieses Ziel zu erreichen, wurden die folgenden Nebenziele formuliert:

- Entwicklung von Experimenten zum qualitativen Nachweis von Inhaltsstoffen von Long Drinks.
- Didaktische Transformation und Reduktion der Prinzipien der NMR-Spektroskopie für Schüler*innen der Sekundarstufe II
- Entwurf eines Konzeptes für einen Experimentiertag im Rahmen des außerschulischen Lernortes ELKE^{AUSTRIA}.
- Erstellung von Materialien zur Begleitung dieses Lernangebotes für Schüler*innen als auch Lehrpersonen.
- Testung der Materialien durch Expert*innen aus dem Fachbereich NMR.
- Praktische Durchführung inklusive Evaluation des geplanten Experimentiertages.

4.2. Forschungsmethodischer Zugang

Ausgehend von Eulers und Sloanes *Design-Based Research Cycle* (2014) wurde an einem innovativen Lernangebot zum Thema *NMR for Food Profiling* gearbeitet. Im Fokus steht ein Workshoptag, bei dem die Lernenden möglichst interaktiv und selbstständig die Methode der NMR-Spektroskopie kennenlernen sollen. Um die intrinsische Motivation der Lernenden zu aktivieren, soll die Analysemethode im Zuge eines Fallbeispiels zu alkoholischen

Mixgetränken vorgestellt werden. Angelehnt an das Modell des Forschenden Lernens soll die Neugierde der Schüler*innen zuerst geweckt werden, damit sie im Anschluss möglichst autonom und zugleich strukturiert durch das Lernsetting geleitet werden können (Reitinger, 2013).

Daraus ergibt sich die Problemstellung, ein Konzept für einen Experimentiertag aufzustellen, bei dem die Inhaltstoffe einer Long Drink Probe mit Hilfe von unterschiedlichen qualitativen Experimenten sowie der NMR-Spektroskopie herausgefunden werden können.

Zur Konzeption dieses Experimentiertages wurde zu Beginn nach ähnlichen Ansätzen in der Literatur gesucht, in denen die NMR-Spektroskopie sowie alkoholische Mixgetränke bereits didaktisch für die Sekundarstufe aufbereitet wurden. Im Zuge des Projektes wurde bereits ein erster Konzeptentwurf von Groß et al. (2020) entwickelt, welcher in dieser Arbeit neu aufbereitet wird. Dabei wurden Experimente zur qualitativen Analyse von Long Drinks recherchiert und getestet werden, um Cocktails mit passenden Inhaltsstoffen zu finden.

Um passende Materialien auszuarbeiten, wurden die Rahmenbedingungen für die Umsetzung konkretisiert und ein Laborbuch wurde als Lernprodukt für den Workshoptag erstellt. Dieses wurde einem ersten Testlauf durch Expert*innen unterzogen und anschließend überarbeitet. Das überarbeitete Konzept wurde danach mit Schüler*innen getestet.

Wie in der nachfolgenden Abbildung 11 zu sehen, wurde in diesem Forschungsprojekt vor allem der erste Teil des *Design-Based Research Cycles* abgedeckt (siehe blaue hinterlegte Felder), indem ein Konzept erstellt und dieses anschließend durch die Evaluation der Testläufe verbessert wurde. Die Umsetzung und Evaluierung des Workshops mit Schüler*innen wurde in dieser Arbeit nur aus der Perspektive der Betreuungspersonen angeführt, da dies ansonsten den Rahmen der Masterarbeit überschritten hätte.

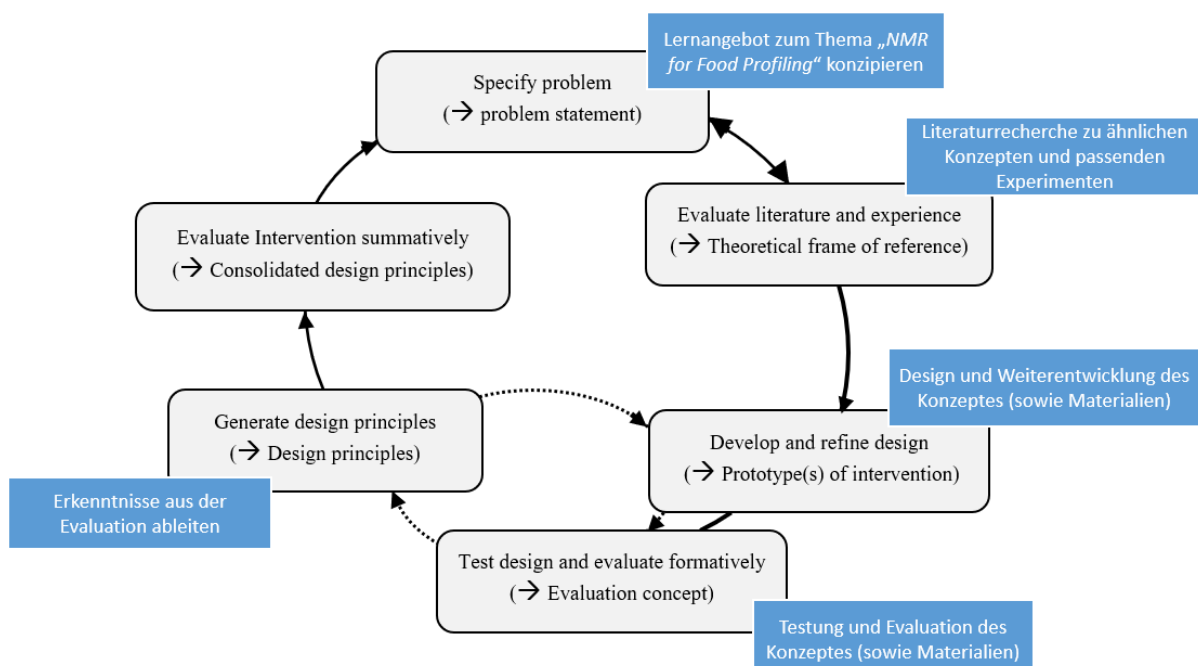


Abbildung 11: Design-Based Research Cycle mit Projektbezug (erstellt nach Euler & Sloane, 2014)

4.3. Entwicklung von Experimenten

Für die Entwicklung von passenden Experimenten für den Experimentiertag wurde zuerst in der Literatur nach ähnlichen Konzepten gesucht, wo die NMR-Spektroskopie in Bezug auf alkoholische Mixgetränke eine Anwendung für den Schulunterricht findet. Dabei wurden zwei nennenswerte Beispiele gefunden, welche als Anregung für die entwickelten Experimente dienten:

Bei einem Projekt in den Vereinigten Staaten wurde, durch eine Kooperation der University of Wisconsin und einer lokalen *High School*, die Möglichkeit geschaffen, die NMR-Spektroskopie praktisch an der Schule selbst durchzuführen. Hierfür wurden kleine, portable Low-Field Spektrometer von der Universität zur Verfügung gestellt. Die Lernenden hatten den Auftrag eine Isopropyl Alkohol-Probe mit unbekannter Konzentration zu analysieren. Die Ergebnisse ihrer Messung konnten die Lernenden im Anschluss mathematisch überprüfen. Durch die NMR-Spektroskopie soll so ein besseres Verständnis für die Stöchiometrie von chemische Verbindungen, Berechnungen der Dichte sowie Volumprozent geschaffen werden (Bonjour et al., 2015).

Ähnlich zu dem geplanten Workshop wurde bei einem Praktikum ein fiktiver Kriminalfall als Ausgangssituation zur Analyse von populären Soft Drinks mit Hilfe der NMR-Spektroskopie verwendet. Der *High School* Schüler sammelt dabei Erfahrungen in der praktischen Laborarbeit und lernt die NMR-Spektroskopie als Fingerprinting Analyseinstrument zur Identifikation einer unbekannten Probe kennen. Im Zuge des Praktikums werden dem Teilnehmer Reflexionsfragen gestellt, welche ihm die Limitationen der NMR-Spektroskopie, wie etwa die Überlagerung von Signalen in einer ähnlichen chemischen Umgebung, aufzeigen (Wilson et al., 1999).

Ausgehend von den Beispielen aus der Literatur wurden verschiedene Ideen zur Analyse von Long Drinks mittels NMR-Spektroskopie gesammelt. Für die Entwicklung von passenden Experimenten wurden unterschiedliche klassische Long Drinks, wie etwa Cuba Libre, der bereits im Projektentwurf von Groß et al. verwendet wurde, herangezogen (Groß et al., 2020). Auf Grund der Beliebtheit von Energy Drinks in Kombination mit Alkohol bei jungen Erwachsenen wurde der Long Drink Vodka Red Bull als unbekannte Probe gewählt (Linden-Carmichael & Lau-Barraco, 2017). Im Anschluss wurden die Experimente für die beiden Laborphasen erörtert, wobei die Laborphase II als Ausgangspunkt verwendet wurde, um weitere passende qualitative Experimente zu erarbeiten.

4.3.1. Laborphase II

Verwendet man den Energy Drink der Firma Red Bull, so besteht eine Dose Red Bull laut dem Hersteller (siehe Etikett auf der Dose) aus Wasser, Saccharose, Glucose, Säuerungsmittel (Zitronensäure), Kohlensäure, Taurin (0,4%), Säureregulatoren (Natriumcarbonate, Magnesiumcarbonate), Coffein (0,03%), Vitamine (Niacin, Pantothensäure, B6, B12), Aromen und Farbstoffen (Zuckerulör, Riboflavine). Da der Cocktail in der ^1H -NMR-Spektroskopie eindeutig identifizierbar sein muss, wurde zuerst das Spektrum von Red Bull gemessen und analysiert (siehe Abbildung 12). Nachdem viele Inhaltsstoffe nur in geringen Mengen vorhanden sind, kann man, wie in der Abbildung zu sehen, nur die Signale des Wasseranteils, des Zuckers sowie des Zitrats (Zitronensäure) eindeutig identifizieren. Coffein und Taurin liegen jeweils in sehr geringen Mengen vor, sodass ihre Signale zu einem großen Teil mit denen der Glucose überlagern. Für eine genaue Charakterisierung der Peaks wurden die Spektren der Inhaltsstoffe Glucose, Fructose, Zitronensäure, Taurin und Coffein (jeweils in Wasser gelöst) gemessen.

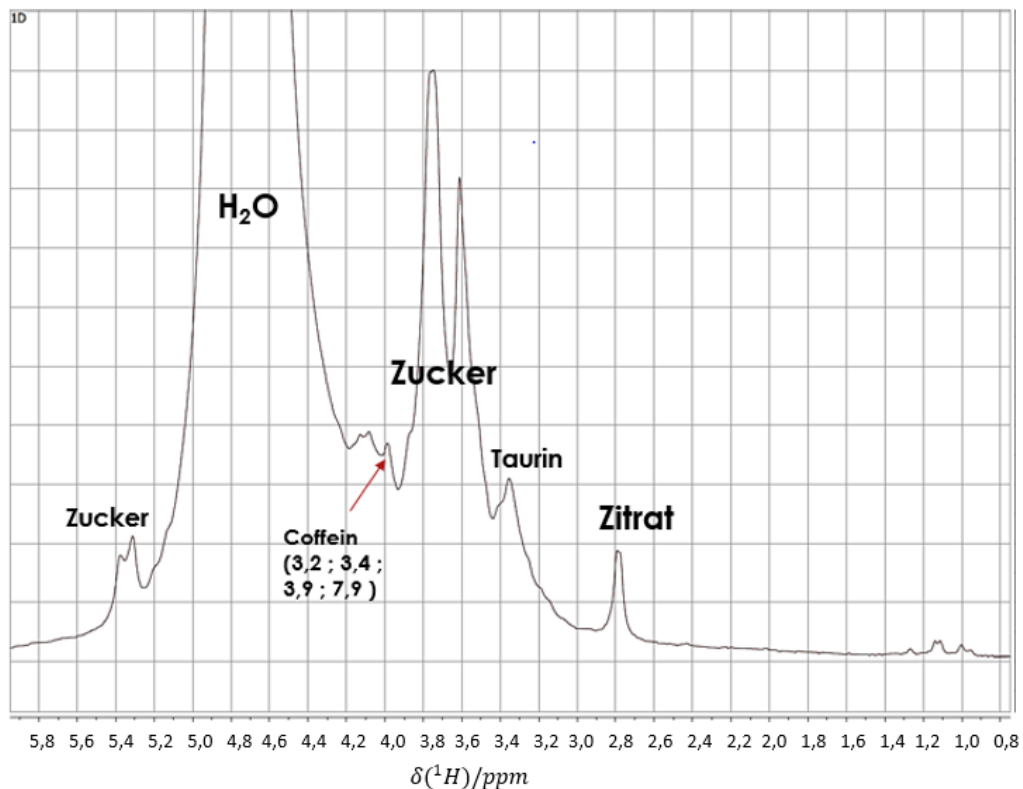


Abbildung 12: ^1H -NMR-Spektrum von Red Bull Energy Drink

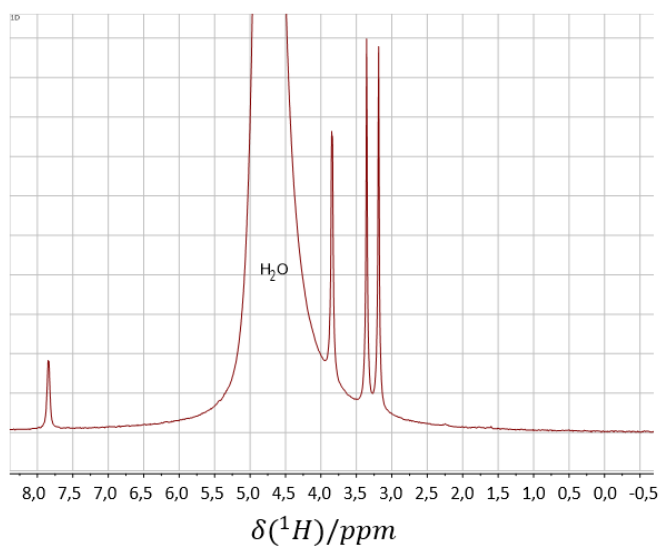


Abbildung 14: ^1H -NMR-Spektrum Coffein

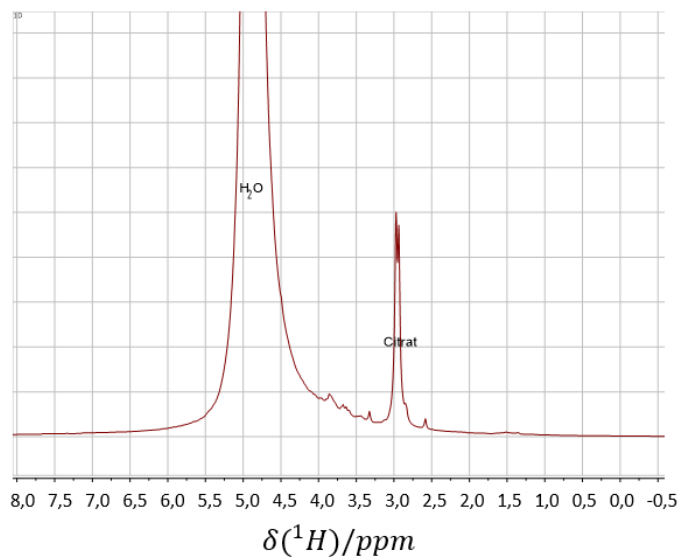


Abbildung 13: ^1H -NMR-Spektrum Zitrat (in Limettensaft)

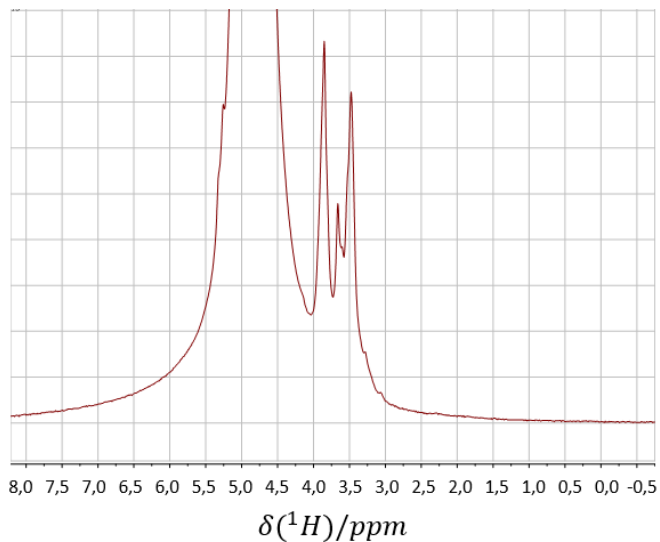


Abbildung 15: ^1H -NMR-Spektrum D-Glucose

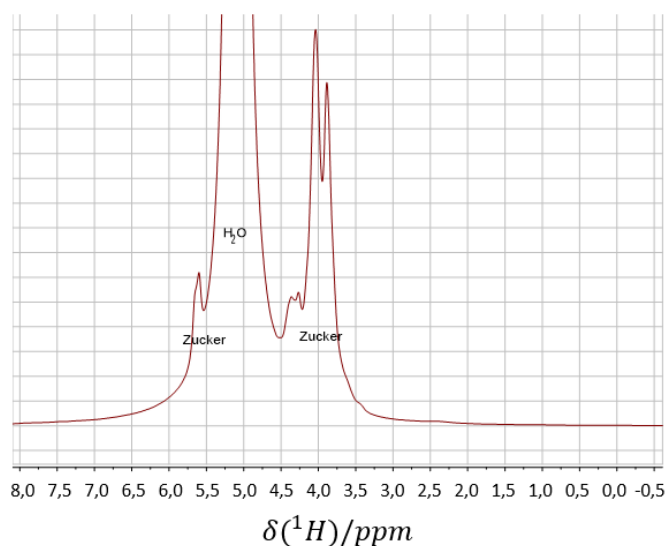


Abbildung 16: ^1H -NMR-Spektrum Saccharose

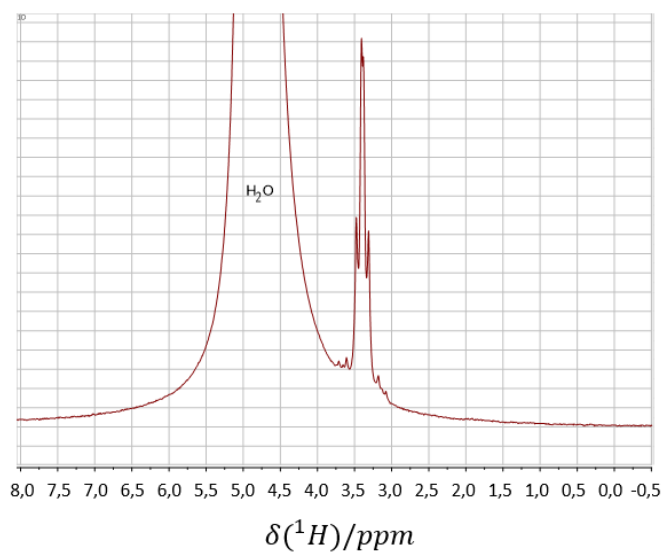


Abbildung 17: ^1H -NMR-Spektrum Taurin

Um eine vereinfachte Identifikation der unbekannten Probe zu ermöglichen, wurde im Zuge der Laborphase II dem Long Drink eine geringe Menge an Coffein und Taurin hinzugefügt. Vor allem das Signal von Coffein bei 7,9 ppm erleichtert die Charakterisierung des Cocktails, da in diesem Skalenbereich ansonsten kein Signal vorliegt, welches mit dem Peak des Coffeins überlagern könnte. In der Abbildung 18 sieht man nun das Spektrum des aufbereiteten Red Bull Energy Drinks. Für den Long Drink wurde im Verhältnis 1:4 Vodka (Spektrum siehe Abbildung 19) zum Energy Drink hinzugefügt und abschließend das Spektrum der unbekannten Probe gemessen (Abbildung 20).

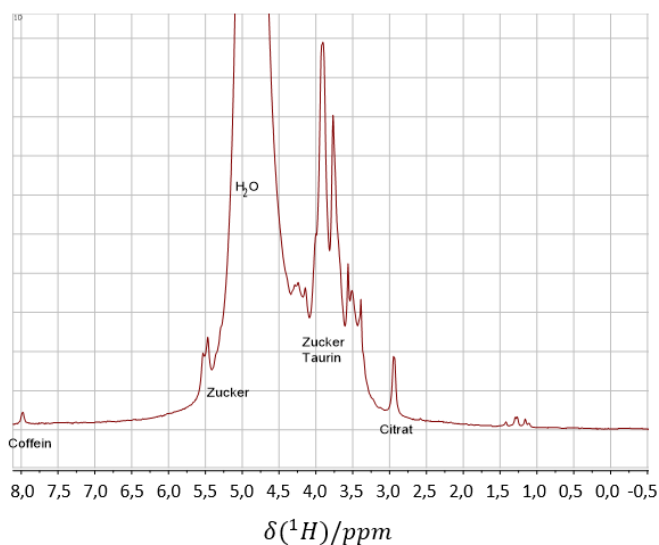


Abbildung 18: ^1H -NMR-Spektrum Red Bull Energy Drink aufbereitet mit Taurin und Coffein

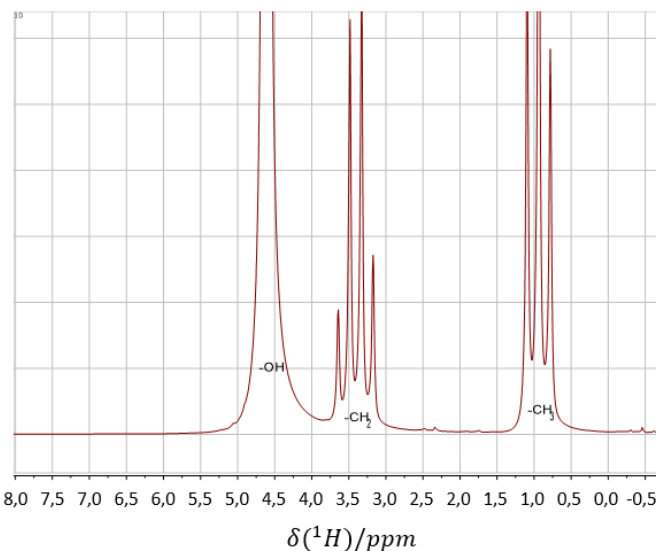


Abbildung 19: ^1H -NMR-Spektrum Vodka

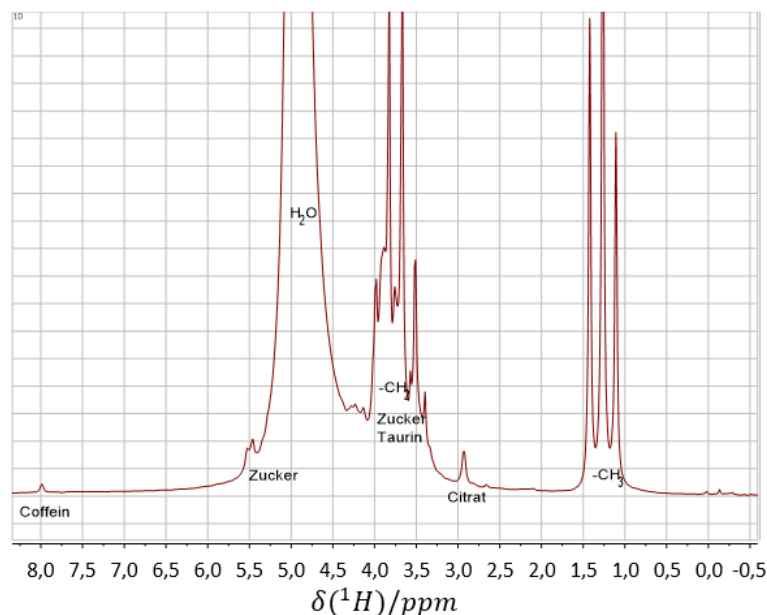


Abbildung 20: ^1H -NMR-Spektrum der unbekannten Probe (Vodka Red Bull, aufbereitet)

Die Signale der Methylengruppe überlagern in der unbekannten Probe die Peaks von Zucker, Taurin und Coffein, sind jedoch auf Grund der höheren Konzentration eindeutig identifizierbar. Ausgehend von diesem Spektrum sowie der charakteristischen braungelben Farbe des

Energy Drinks, wurde nach möglichen ähnlichen Long Drinks gesucht, welche sich mit Hilfe einer ^1H -NMR Messung eindeutig von Vodka Red Bull unterscheiden lassen. Hier wurden die Cocktails Mojito (Rum, Sodawasser, Saccharose sowie Limettensaft) sowie Vodka Mate (Vodka, Club Mate) gewählt. Die ^1H -NMR-Spektren sind in Abbildung 21 und Abbildung 22 zu sehen.

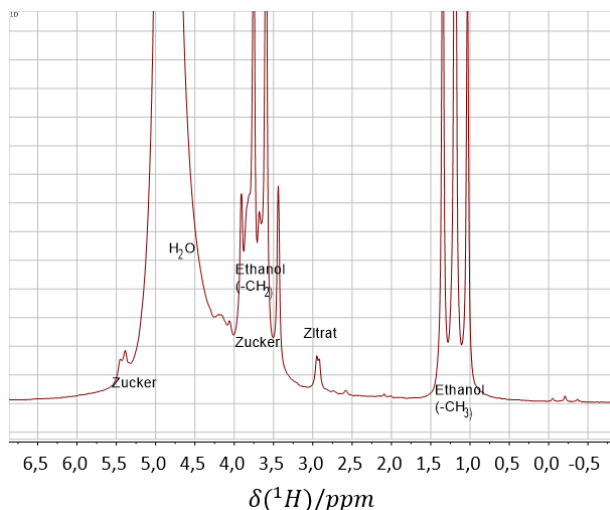


Abbildung 21: ^1H -NMR-Spektrum Mojito

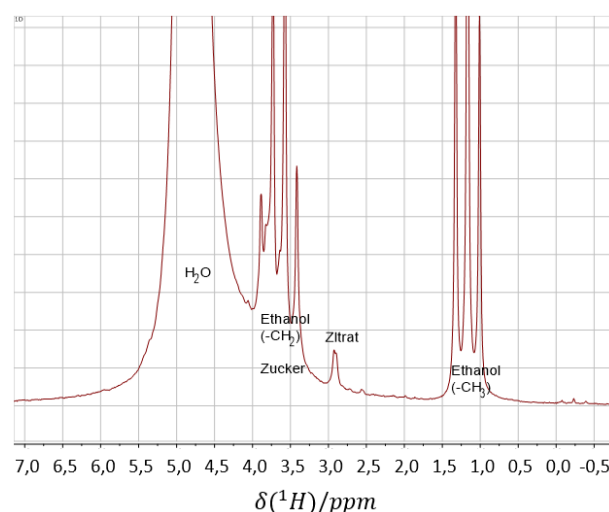


Abbildung 22: ^1H -NMR-Spektrum Vodka Mate

Für die Experimente in der Laborphase II messen die Schüler*innen das Spektrum der unbekannten Probe sowie von möglichen Inhaltsstoffen und können somit das Spektrum von Vodka Red Bull auswerten. Da man von den drei Cocktails Vodka Red Bull, Mojito und Vodka Mate ausgeht, benötigt man für Vergleichsspektren die Substanzen Vodka, Rum, Sodawasser, Limettensaft, Saccharose, Glucose, Taurin, Coffein, Club Mate und Red Bull, welche auf einem Materialtisch für die Laborphase II bereitgestellt werden.

4.3.2. Laborphase I

Da für den Workshoptag auch eine erste qualitative Laborphase vorgesehen ist, welche der NMR-Spektroskopie vorangeht, wurde ausgehend von den drei bereits genannten Long Drinks eine Cocktailkarte (siehe Laborbuch) erstellt. Alle weiteren Long Drinks sollten dabei entweder durch ihre Zusammensetzung mit Hilfe von qualitativen Experimenten oder durch ihre Farbe von den Schüler*innen in der Laborphase I ausgeschlossen werden können. Im Anschluss wurden die unterschiedlichen Nachweisversuche kurz angeführt und die Auswahl didaktisch erläutert. Im Laborbuch findet man zu jedem qualitativen Experiment eine kurze Hintergrundinformation. In der Tabelle 3 ist eine Übersicht der Nachweisergebnisse aufgelistet. Für die Durchführung dieser Laborphase steht den Lernenden zusätzlich ein allgemeiner Materialtisch mit den folgenden Lebensmitteln zur Verfügung: Red Bull Energy

Drink, Red Bull Energy Drink zuckerfrei, Haushaltszucker (Saccharose). Traubenzucker (Glucose), Tomatensaft, Ananassaft, Ginger Ale, Club Mate, Mineralwasser, Zitronensaft, Limettensaft, Tabasco, Cola, Kokosmilch, Eiklar, Sahne, Vodka, Whiskey, Blue Curacao und Rum.

Tabelle 3: Ergebnisse der qualitativen Experimente aus Laborphase I

Cocktails	Farbe	Fehling	Protein	Ethanol	Stärke
Vodka Red Bull (=unbekannte Probe)	Braun/ gelb	Positiv (P)	Negativ (N)	P	N
Red Bull zuckerfrei	P	N	N	N	N
Mojito	P	P	N	P	N
Whiskey Sour	P	P	P	P	N
Piña Colada	P/N	P	P	P	N
Vodka Mate	P	P	N	P	N
Bloody Mary	N	N	N	P	N
Vodka Wellness	N	N	N	P	N
Cuba Libre	N	P	N	P	N
Swimming Pool	N	P	P	P	N
Ginger Ale Mix	P	P	N	N	N

Fehling Nachweis: Die Reaktion mit dem Fehling Reagenz dient dem Nachweis der Aldehyde-Gruppe der vorhandenen Einfachzucker. Durch die Redoxreaktion verfärbt sich die Lösung beim Erhitzen von blau zu orange-rot und ist für die Schüler*innen eindeutig nachweisbar (Wollrab, 2009).

Obwohl es sich hierbei um einen klassischen Schulversuch handelt, wird mit wenig Vorwissen der Lernenden gerechnet, da Kohlenhydrate oftmals erst am Ende der 12. Schulstufe behandelt werden. Anhand der Reaktion des Fehling-Reagenz kann an diesem Versuch das Prinzip von Redoxreaktionen wiederholt werden.

Ethanol Nachweis:

Die Schüler*innen haben hier die Wahl zwischen zwei unterschiedlichen Ethanolnachweisen, welche nach Russek (2020) für den Workshop adaptiert wurden. Um den Forschungsprozess der Lernenden möglichst realitätsnahe zu gestalten, soll ihnen anhand der beiden Versuche aufgezeigt werden, dass es in der naturwissenschaftlichen Forschung oftmals mehrere Ansätze gibt, um eine Forschungsfrage zu beantworten.

- a. Nachweis mittels Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung: Durch die Reaktion von Ethanol mit Ammoniumcer(IV)nitrat bildet sich ein orange-roter Farbkomplex, der sich rasch löst
- b. Nachweis durch die Brennprobe: Um Ethanol im Long Drink mittels Brennprobe nachzuweisen, wird eine größere Alkoholkonzentration benötigt. Dafür wird die Probe in einem Kolben erhitzt und der Dampf durch ein Glasrohr geleitet. Im Anschluss wird das Ethanol-Dampf-Gemisch als Nachweis entzündet.

pH-Wert Bestimmung: Dieser Nachweis soll keine eindeutigen Ergebnisse liefern und den Schüler*innen die Limitation der pH-Wert Messung bei einer unbekannten Zusammensetzung der Lösung aufzeigen. Mit Hilfe der Universalindikatorteststreifen kann man überprüfen, ob die vorliegende Probe eine saure oder basische Lösung ist und diesen pH-Wert mit denen der Inhaltsstoffen der anderen Cocktails vergleichen. Da in der Cocktailkarte keine genauen Mengenangaben vorgegeben sind und der pH-Wert von der Konzentration der H^+ -Ionen der jeweiligen Lösung abhängig ist, kann auf Grund des pH-Wertes nur eine Schätzung angegeben werden, welche Inhaltsstoffe vermutlich in der unbekannten Probe enthalten sind (Mortimer et al., 2020).

Protein Nachweis: Da drei Long Drinks der Cocktailkarte Proteine in Form von Eiklar bzw. Sahne enthalten, kann ein Proteinnachweis mittels Denaturierung durchgeführt werden. Hierfür soll die unbekannte Probe sowie eine Vergleichssubstanz, welche mit Sicherheit Eiweiß enthält, mit einer Salzsäurelösung versetzt werden. Durch die Änderung des pH-Wertes kommt es zu einer Denaturierung des Eiweißes, wodurch seine Struktur verändert wird. Alternativ könnte die Denaturierung auch durch das Erhitzen oder die Zugabe von Salzen durchgeführt werden. Diese Reaktion sollte den Schüler*innen bereits aus dem Alltag, etwa beim Anbraten eines Spiegeleies, bekannt sein (Wollrab, 2009).

Stärke Nachweis: Stärke ist als Polysaccharid in vielen pflanzlichen Lebensmitteln wie etwa Kartoffeln, Getreidesamen, Reis, Mais oder Bohnen enthalten. Sie besteht grundsätzlich aus Amylose und Amylopektin und kann mit Hilfe der Lugol'schen Lösung nachgewiesen werden. Durch die Zugabe dieser Lösung, welche aus Iod und Kaliumiodid besteht, wird Iod in der Amylose-Helix eingeschlossen und die Stärkelösung verfärbt sich blau (Wollrab, 2009). Diese Nachweisreaktion soll die Schüler*innen an eine sinnhafte Auswahl der möglichen Versuche erinnern. Ist die Planung der gewählten Nachweise gut durchdacht, sollten die Lernenden feststellen, dass der Stärkenachweis keine hilfreichen Erkenntnisse liefern wird, weil keiner der angegebenen Cocktails Stärke enthält.

4.4. Entwurf eines Konzeptes für einen Experimentiertag

In diesem Kapitel wird das Konzept für die Durchführung des Experimentiertages „NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment“ dargestellt. Das dargestellte Konzept ist angelehnt an den Projektentwurf von Groß et al. (2020) und wurde mit einer neuen Fallgeschichte und sowie abgeänderten Aufgabenstellungen weiterentwickelt. Die Rahmenbedingungen sowie der Ablauf des Workshoptages werden im Anschluss vorgestellt und mit didaktischen Überlegungen begründet.

4.4.1. Rahmenbedingungen

Um ein passendes Konzept zu entwickeln, wurde zuerst die Zielgruppe für den Workshoptag genauer charakterisiert. Basierend auf dem benötigten Vorwissen für die durchzuführenden chemischen Experimente, als auch für das Verständnis der Grundlagen der NMR-Spektroskopie, wurde die 12. Schulstufe (8. Klasse) einer Allgemeinbildenden Höheren Schule ausgewählt. Hier wäre auch eine andere Lerngruppe, beispielsweise aus einem Wahlpflichtfach Chemie, möglich. Das Thema des Workshops lässt sich nach dem Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung (2022) in die zwei folgenden fachlichen Bereiche des Chemielehrplanes der 8. Klasse einordnen:

Struktur und Reaktion

- *Zusammenhänge von Struktur und Eigenschaften am Beispiel von Kohlenwasserstoffverbindungen inklusive funktioneller Gruppen und Arten der Isomerie beschreiben.*

Chemische Grundlagen des Lebens

- *Die Wichtigkeit einer gesundheitsbewussten Lebensführung an Beispielen aus der Lebensmittelchemie diskutieren.*
- *Durch kritisch reflektierenden Einsatz von differenzierten Stoffkenntnissen zu Ernährungsempfehlungen Stellung beziehen.*
- *Gesundheitsfördernden und bewussten Umgang mit Stoffen der Alltagswelt am Beispiel von Genussmitteln und Drogen diskutieren.*

Die Durchführung des Experimentiertages soll im Zuge des ELKE^{AUSTRIA} Labors am Institut für Chemie der Universität Wien stattfinden.

4.4.2. Ablauf des Experimentiertages

Da der Experimentiertag aus praktischen Laborphasen, theoretischen Lehreinheiten sowie Plenumsdiskussionen besteht, wurde der Ablauf mit Hilfe der Abbildung 23 in acht Phasen unterteilt. Während der Einführung in den Labortag erhalten die Schüler*innen einen kurzen Überblick über den Tagesablauf. Mit Hilfe einer Fallgeschichte (siehe Laborbuch, S. 3) begeben sich die Schüler*innen in die Rollen von Chemiestudent*innen, welche das Geheimnis um das Cocktailrezept auf einer Party zu lösen probieren. In Kleingruppen von zwei bis drei Personen starten die Lernenden in die erste Laborphase und arbeiten an der Identifikation der unbekannten Cocktailprobe.

Das begleitenden Laborbuch enthält hier alle benötigten Versuchsanleitungen sowie Organisationshilfen für die Planung der Experimente. Die Lehrperson bzw. die Betreuungspersonen erhalten ein eigenes Exemplar mit den zu erwartenden Ergebnissen (siehe Anhang S. 70).

Im Labor selbst bekommen die Kleingruppen jeweils eine Box mit allen benötigten Materialien sowie Chemikalien. Für die Vergleichssubstanzen wird ein Materialtisch mit den unterschiedlichen Mixgetränken, Alkoholen und anderen Lebensmitteln vorbereitet. Um die Auswahl der möglichen Long Drinks einzuschränken, gibt es im Laborbuch eine Karte mit 11 möglichen Cocktails, welche die Lernenden nach der Laborphase 1 auf maximal drei alkoholische Mischgetränke einschränken sollen. Die dabei möglichen Experimente

wurden bereits im vorherigen Kapitel genauer erörtert. Zusätzlich soll auch ein Ausschluss auf Grund der Farbe des Getränkes möglich sein.

Für die Zwischenbesprechung wird erwartet, dass die Schüler*innen die unbekannte Probe nicht eindeutig charakterisieren konnten und sie die Cocktails Mojito, Vodka Red Bull oder Vodka Mate in der unbekannten Probe vermuten. Da hier die qualitativen Nachweisreaktionen keine weitere Auskunft geben, wird eine neue Analysemethode benötigt. An diesem Punkt soll die NMR-Spektroskopie als neue Methode im Zuge eines fachlichen Inputs vorgestellt werden. In der Laborphase II messen die Lernenden das Spektrum der unbekannten Probe sowie mögliche Vergleichssubstanzen, um die Inhaltsstoffe eindeutig nachweisen zu können. Bei der

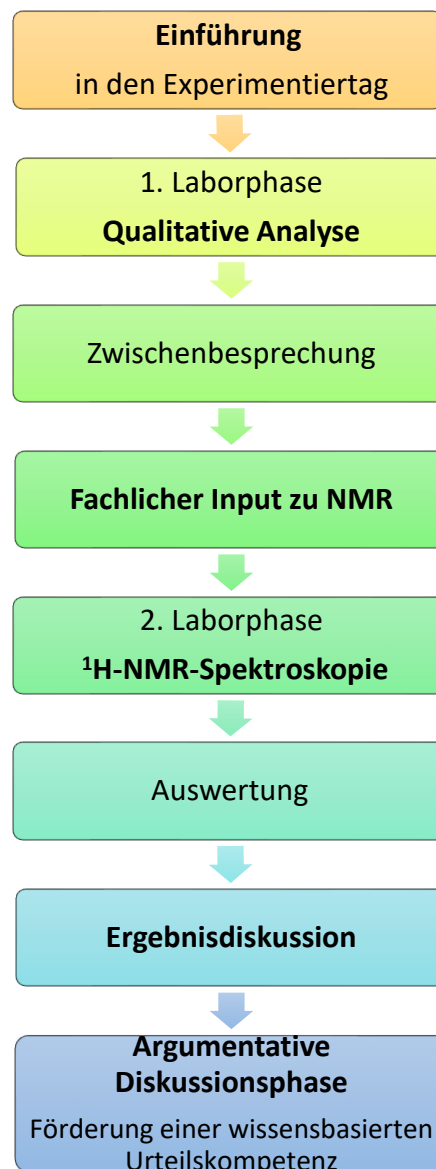


Abbildung 23: Ablauf des Experimentiertages

Auswertung der Messergebnisse soll somit nicht nur der Cocktail identifiziert, sondern auch die Zusammensetzung des erhaltenen Spektrums verstanden werden. In der Ergebnisdiskussion werden die unterschiedlichen Vorgehensweisen der Kleingruppen verglichen und offene Fragen geklärt. Eine Evaluation des gesamten Experimentiertages mit Hilfe eines Fragebogens für die Schüler*innen als auch die Betreuer*innen bildet den Abschluss des Workshops an der Universität. Weiters sind Materialien für eine argumentative Diskussionsphase geplant, welche zur Förderung der wissensbasierten Urteilskompetenz in Bezug auf den Konsum von alkoholischen Mixgetränken dienen sollen. Da diese Arbeit sich jedoch nur mit den chemiedidaktischen Aspekten des Projektes befasst, wird hier nicht genauer darauf eingegangen.

Die genauen Abläufe, sowie den zeitlichen Planungsverlauf, können der Planungsmatrix im nächsten Kapitel entnommen werden. Dabei werden die Aufgaben der Betreuer*innen als „Aktivitäten der Lehrperson“ zusammengefasst.

4.4.2.1. Planungsmatrix

Zeit	Phase	Inhalt	Aktivität der Lernende	Aktivität der Lehrperson	Materialien
5min	Begrüßung	Begrüßung und Tagesüberblick	Stellen mögliche Fragen zum Ablauf	Präsentiert Tagesüberblick	Graphik zum Ablauf des Experimentiertages
5min	Gruppeneinteilung		Finden sich in 2-3er Gruppen zusammen.	Teilt Lernende in Gruppen ein.	
5min	Einstieg	Fallgeschichte und Laborsicherheitsunterweisung	Hören der Lehrperson zu und stellen mögliche Fragen.	- Präsentiert die Fallgeschichte - Erklärt das weitere Vorgehen und die Ziele der 1. Laborphase. - Demonstriert Cocktailglas mit der unbekannten Probe - Hält eine Sicherheitseinschulung für die folgenden Experimente - Beantwortet mögliche Fragen der Lernenden	Fallgeschichte, Cocktailglas mit unbekannter Probe (Vodka Red Bull)
10min	Vorbereitungen für Laborphase 1	Die Lernende erhalten ein Laborbuch, einen Labormantel und eine Schutzbrille. In der Kleingruppe planen sie ihre weitere Vorgehensweise mit passenden	- Lesen sich die Cocktailrezepte sowie die Liste der Nachweisreaktionen durch - Stellen eine Hypothese auf, um welchen Cocktail es sich handeln könnte - Schließen bereits erste Cocktail aus (Farbausschluss) - Planen qualitative Nachweisreaktionen mittels der Liste an möglichen	- Fragestellung wird wiederholt - Teilt Unterlagen aus - Unterstützung bei Problemen - Überprüft Planungen der Lernenden	Laborbuch, Materialientisch, Stifte, Labormantel, Schutzbrille

		Experimenten mit Hilfe des Laborbuches.	Nachweisreaktionen sowie dem Materialtisch		
45min	Laborphase 1	Qualitative Experimente	- Führen geplante Nachweisreaktionen durch - Notieren ihre Beobachtungen und Ergebnisse im Laborbuch - Überprüfen Hypothese oder stellen eine neue auf	- Unterstützt bei Experimenten - Sorgt für die Einhaltung der Sicherheitsvorkehrungen sowie eine ordnungsgemäße Entsorgung der Chemikalien	Laborbuch, Materialtisch, Stifte, Labormantel, Schutzbrille, Box mit Versuchsmaterialien
5min	Zwischenbesprechung	Präsentation der ersten Ergebnisse & Plenumsdiskussion über weiteres Vorgehen	- Präsentieren ihre vorläufigen Ergebnisse sowie ihr Vorgehen - Stellen eventuell neue Hypothese auf	- Leitet Plenumsdiskussion und Präsentation an - Mögliche Fehleranalyse	Laborbuch
PAUSE					
30min	Fachlicher Input NMR	Überblick über Grundlagen der NMR-Spektroskopie sowie der Auswertung der ^1H -NMR-Spektren Übungen zum Auswerten der Spektren	- Hören zu und füllen Lücken im Fachtext (Laborbuch) aus - Stellen Fragen zu NMR-Spektroskopie - Bearbeiten die Übungsbeispiele	- Gibt einen Überblick über die Grundlagen der NMR-Spektroskopie - Demonstriert die Stärke des Magnetfeldes mit Hilfe einer Halbach Array Magneten sowie eines Gaußmeters - Beantwortet Fragen der SuS - Gibt Übungsbeispiele vor und hilft bei der Bearbeitung - Kontrolliert die Übungsbeispiele	PowerPoint Präsentation, Laborbuch, Halbach Array Magnet, Gaußmeter, kleiner Stabmagnet
15min	Vorbereitung für NMR	Auswahl der Materialien für Vergleichsspektren	- Wählen Inhaltstoffe vom Materialtisch aus, welche als Vergleichsspektren dienen sollen	- Führt die Lernenden zurück zu eigentlicher Fragestellung - Erklärt Vorgehensweise sowie Ziele der 2. Laborphase - Hilft bei Fragestellungen	Materialtisch, Laborbuch

45min	Laborphase 2	Messung und erste Auswertung der ^1H -NMR-Spektren	- SuS bereiten die Proben für Messung vor - Messen die Spektren - Bearbeiten Spektren am PC - Messen eventuell weitere Spektren - Werten die Spektren aus - Identifizieren und charakterisieren die Inhaltstoffe der unbekannten Probe	- Hilft bei Vorbereitungen der Proben - Führt die Messungen mit den Lernenden durch - Sorgt für die Einhaltung der Sicherheitsvorkehrungen sowie eine ordnungsgemäße Entsorgung - Unterstützt bei der Auswertung der Spektren - Hilft bei möglichen Fragen sowie Problemen	Labormantel, Schutzbrille, Materialtisch, Box mit Versuchsmaterialien, NMR-Spektrometer mit PC-Workstation und Drucker, Textmarker zur Auswertung der Spektren
10min	Abschluss-diskussion	Präsentation und Diskussion der Ergebnisse	- Präsentieren ihre Ergebnisse - Diskutieren über Vorgehensweise	- Leitet Präsentation und Diskussion an - Leitet eine mögliche Fehleranalyse	Laborbuch
10min	Evaluation	Evaluation des Workshops mit Hilfe eines Fragebogens	- Schriftliche Beantwortung des Fragebogens	- Ausgeben des Fragebogens für die Lernenden - Ausfüllen des Fragebogens für die Lehrperson	Fragebogen Lernende sowie Lehrperson
offen	Argumentative Diskussionsphase	Förderung einer wissensbasierten Urteilskompetenz.	<i>Noch offen</i>	<i>Noch offen</i>	<i>Noch offen</i>

4.4.3. Didaktische Überlegungen

Um eine genauere Vorstellung von der Zielgruppe zu erhalten, wurden bei der Planung drei unterschiedliche Anforderungsniveaus berücksichtigt. Nach Peifer et al. (2011) soll die erste Stufe „Einsteiger*innen“ ein geringes Komplexitätsniveau vorweisen und die Lernenden arbeiten strikt nach einer Versuchsvorschrift. In der nächsten Stufe der „Fortgeschrittenen“ werden die Aufgaben durch anwendungsorientierte Beispiele komplexer und die Zielgruppe muss vermehrt auf ihr Vorwissen zurückgreifen, um die Fragestellungen lösen zu können. Die letzte Stufe der „Expert*innen“ erhöht die Anforderungen, indem nun das Problemlösende Experimentieren im Vordergrund steht. Dabei starten die Schüler*innen mit selbst aufgestellten Hypothesen, welche sie mit Hilfe von Experimenten überprüfen möchten. Die Lernenden trainieren dabei nicht nur das praktische Experimentieren, sondern auch die Kompetenz der Erkenntnisgewinnung. Da die vorliegenden Materialien den Schüler*innen keine exakte Planung vorgeben, sondern sie beispielsweise in Laborphase I individuell entscheiden können, welche Versuche für sie relevant sind, ist der Workshop für das Niveau der Expert*innen ausgerichtet. Dieses Level des Experimentierens ist vor allem in einem universitären Schüler*innenlabor möglich, da hier ausreichend Betreuungspersonal gegeben ist und kein Mangel an technischen Geräten besteht. Je nach Größe der Schulklasse wäre eine Betreuungsperson für zwei bis drei Kleingruppen ideal, dies ist jedoch stark abhängig vom mitgebrachten Vorwissen und der Selbstständigkeit der Lernenden. Würde man die erste Laborphase an einer Schule durchführen, könnte man die Liste der Nachweisreaktionen oder die Auswahl der Cocktails einschränken, um das benötigte Material sowie das Anforderungsniveau zu reduzieren.

Da im Workshop das selbstständige Arbeiten und Planen der Lernenden gefördert werden soll, ist es in der Laborphase I nicht das Ziel, dass alle Nachweisreaktionen durchgeführt werden. Hier sollen die Teilnehmer*innen vorab überlegen, welche Aussage ein positiver Nachweis hätte und mit Hilfe des angeführten Flussdiagramms eine sinnvolle Reihenfolge planen. Dabei gibt es mehrere Lösungswege, da einige der Long Drinks durch mehrere Nachweise ausgeschlossen werden können. Auch wird die Farbe eines Getränkes oftmals unterschiedlich wahrgenommen, so könnten zum Beispiel manche Lernenden den Cocktail Piña Colada schon auf Grund der Farbe ausschließen und andere erst nach dem negativen Eiweißnachweis der unbekannten Probe. Die unterschiedlichen Vorgangsweisen der Schüler*innen sollen dabei in der Zwischenbesprechung diskutiert werden.

Damit während den Laborphasen ein übersichtliches Arbeiten der Schüler*innen bestehen und die Experimente ohne lange Vorbereitungsarbeit durchgeführt werden können, besitzt jede

Kleingruppe eine eigene Materialienbox mit den nötigen Laborgeräten sowie Chemikalien. Die Konzentrationen sind hier in Hinblick auf die Sicherheit der Schüler*innen absichtlich möglichst gering gewählt.

Weiters ist es für den Workshoptag notwendig, dass die Lernenden bereits ausreichendes Vorwissen in der organischen Chemie mitbringen und mit den Grundlagen der elektromagnetischen Spektroskopie vertraut sind. Dafür muss der Zeitpunkt des Workshops an die jeweilige Jahresplanung des Chemieunterrichts der Klasse angepasst werden.

Das selbstständige Experimentieren sollte bereits in der Schule geübt worden sein. Sind diese Punkte nicht gegeben, könnten die Betreuungspersonen, während dem Workshop vermehrt eingreifen und den Kleingruppen bei ihren Aufgaben Hilfestellungen geben. Auch wäre es bei Schwierigkeiten spontan möglich, das gesamte Konzept an das Level der „Einsteiger*innen“ oder „Fortgeschrittene“ anzupassen, indem man beispielsweise die Reihenfolge der Nachweisexperimente vorgibt oder nicht weiterführende Experimente, wie den Stärkenachweis, streicht. Bei sehr leistungsstarken Gruppen kann man beispielsweise zur Überbrückung von Wartezeiten, während den beiden Laborphasen weitere Lebensmittel auf ihre Inhaltsstoffe untersucht lassen.

Zur Aktivierung der Schüler*innen am Beginn des Workshops wurde ein Fallbeispiel gewählt, welches einen Bezug zum Alltag der Lernende herstellen soll. Da alkoholische Mixgetränke sehr beliebt bei Jugendlichen sind und in der 12. Schulstufe ein Großteil der Klasse bereits legal hochprozentigen Alkohol konsumieren darf, wird damit gerechnet, dass viele der aufgelisteten Cocktails den Schüler*innen bereits bekannt sind. Da sie nun die Rolle von Chemiestudent*innen übernehmen, soll hier gleich ein weiterführender Bildungsweg aufgezeigt werden. Durch die Durchführung des Workshops an der Universität und den direkten Kontakt zu Student*innen in der Rolle der Betreuungspersonen, können hier erste Kontakte zur Universität geknüpft werden.

Mit Hilfe dieser didaktischen Überlegungen und durch eine flexible, schüler*innenzentrierte Vorgehensweise der Betreuungspersonen sollte das Konzept des Workshops in der Praxis bestmöglich umgesetzt werden können.

5. Testlauf mit Expert*innen

Zur Evaluierung der selbst erstellten Materialien wurde ein Testlauf des Workshops gestartet. Der Fokus lag dabei auf den qualitativen Experimenten in Laborphase I sowie der Auswertung der NMR-Spektren in Laborphase II. Es sollte überprüft werden, ob das Konzept des Experimentiertages, ausgehend von der beschriebenen Fallgeschichte für Expert*innen, nachvollziehbar ist und der rote Faden eingehalten werden kann, oder ob bei der praktischen Durchführung nicht bedachte Problemstellungen auftreten. Als Testpersonen wurden ein*e Doktoratsstudent*in sowie ein*e Masterstudent*in aus dem Fachbereich NMR gewählt, welche durch ihr Expert*innenwissen gezielt Feedback sowie Verbesserungsvorschläge zum Workshoptag geben konnten. Im Anschluss wurden der Ablauf und die Ergebnisse des Testlaufes sowie die daraus schlussgefolgerten Veränderungen der Materialien, bezogen auf die jeweilige Laborphase, erörtert.

5.1. Laborphase I

Zu Beginn der ersten Laborphase wurde den Expert*innen getrennt voneinander der Einstieg in den Experimentiertag präsentiert. Da vor allem zu Beginn mit unterschiedlichen Problemlösestrategien zu rechnen ist, soll die erste Planung der qualitativen Experimente allein erfolgen. Die Testpersonen wurden dazu aufgefordert, ihre Vorgehensweise zur Einschränkung der Long Drink Auswahl schriftlich festzuhalten und im Anschluss mit der zweiten Testperson zu vergleichen. Im Folgenden werden die Ergebnisse dieses Testlaufes, welche auf Grund von Beobachtungen, schriftlichen Notizen sowie anschließende Gespräche mit den Teilnehmer*innen gesammelt werden, dargelegt:

Zu Beginn der Testung zeigte sich, dass die ursprünglich erstellte Planungstabelle (siehe Tabelle 4) in der Praxis schlecht angenommen wurde und die Teilnehmer*innen hauptsächlich mit der Checkliste (Abbildung 24) gearbeitet haben.

Tabelle 4: Ursprünglich erstellte Planungstabelle

Geplante Nachweisreaktion	Beobachtete Reaktion der		Schlussfolgerung
	Probe	Blindprobe	

Checkliste für Laborphase I

Name des Cocktails	X (falls ausgeschlossen)	Folgende Beobachtungen führen zum Ausschluss dieses Cocktails
Mojito		
Whiskey Sour	X	Beweisnachweis negativ in Probe
Zuckerfreies Red Bull	X	Fuchsnachweis positiv
Vodka Wellness	X	Farbunterschied
Cuba Libre		pH-Wert von Cola und Limone → 5 Proben pH-Wert = 4
Pina Colada	X	Konsistenz
Swimming Pool	X	Farbunterschied
Vodka Mate		
Vodka Red Bull		
Bloody Mary	X	Farbunterschied
Vodka Apfelsaft		

Checkliste für Laborphase I

Name des Cocktails	X (falls ausgeschlossen)	Folgende Beobachtungen führen zum Ausschluss dieses Cocktails
Mojito		
Whiskey Sour	X	Limettennachweis negativ
Zuckerfreies Red Bull	X	Die unbekannte Probe enthält Zucker (Fehling-Nachweis)
Vodka Wellness	X	Farbe
Cuba Libre	X	pH Wert
Pina Colada	X	Die Farbe passt nicht
Swimming Pool	X	idem.
Vodka Mate		
Vodka Red Bull		
Bloody Mary	X	Farbe
Vodka Apfelsaft	X	

Abbildung 24: Checkliste der Testpersonen

Für eine übersichtlichere Vorgehensweise wurde von einer Testperson, je nach Verlauf des Experimentes, unterschiedliche Lösungswege angeschrieben, während die andere Person nur den ersten Versuch in der Planung notierte.

Bei der Aufstellung der Hypothese vermuteten beide Testpersonen einen Red Bull Energy Drink-haltigen Long Drink in der unbekannten Probe. Eine Person verwies hier auf den markanten Geruch der Probe, welcher sehr ähnlich zu dem bekannten Energy Drink sei.

Der Farbausschluss der Cocktails führte zu neuen Ergebnissen, da hier der Cocktail Cuba Libre nicht ausgeschlossen wurden. Weiters hat eine Testperson den Drink Piña Colada auf Grund seine Konsistenz und nicht bezogen auf die Farbe, verworfen.

In der Planung der Nachweisreaktionen gab es den Ansatz, zuerst den pH-Wert der Inhaltsstoffe zu vergleichen und so eine eindeutige Auswahl zu treffen. Die zweite Testperson schlug eine Überprüfung des Zuckergehaltes, gefolgt von einem Ethanol Nachweis mittels Ammoniumcernitrat und anschließend einen Proteinnachweis vor.

In der gemeinsamen Umsetzung stellten die Teilnehmer*innen fest, dass sie durch die pH-Wert Bestimmung zwar den Cocktail Cuba Libre ausschließen können, jedoch keine eindeutige Identifikation der unbekannten Probe möglich war. Im weiteren Verlauf wurde die Planung der zweiten Testperson umgesetzt. Da zum Zeitpunkt des Testlaufes der Cocktail

Ginger Ale Mix kein Teil der Cocktailkarte war, stellten die Testperson nach dem positiven Zuckernachweis fest, dass kein Ethanolnachweis nötig sei. Diese Entscheidung konnte getroffen werden, da hier Red Bull zuckerfrei der einzige alkoholfreie Cocktail war und dieser bereits ausgeschlossen werden konnte. Nach der Durchführung des Proteinnachweises wurde das erwartete Ergebnis der drei übrigen Cocktails erreicht und der Testlauf dieser Laborphase wurde beendet.

Zusammengefasst konnte beobachtet werden, dass die Testpersonen das Ziel der ersten Laborphase ohne Schwierigkeiten erreichen konnten und es keine Verständnisprobleme bei der Durchführung der einzelnen Arbeitsschritte gab. Der Aufbau und das Design des Laborbuches wurden im Anschluss an den Testlauf als sehr positiv bewertet. Bei der Planung der Versuche wurde festgestellt, dass die Teilnehmer*innen sehr oft im Laborbuch nach den Abbildungen der einzelnen Cocktails suchten und sich hier eine übersichtliche Cocktailkarte mit allen Getränken anbieten würde.

Durch die oben genannten Ergebnisse des Testlaufes der Laborphase I konnten die Workshopmaterialien entsprechend den folgenden Punkten designt werden:

- Die Auswahl der möglichen Cocktails wird um den alkoholfreien Drink Ginger Ale Mix anstatt Vodka Apfelsaft ergänzt, damit der Ethanol Nachweis zwingend durchzuführen ist.
- Das Laborbuch wurde um das Flussdiagramm zur Planung der Versuche (siehe Laborbuch, S. 7-8) erweitert.
- Die beobachtete Reaktion der einzelnen Nachweisreaktionen wird nicht mehr auf der Planungstabelle (siehe Tabelle 4) eingetragen, sondern direkt bei den einzelnen Versuchsanleitungen in ein Beobachtungsfeld (siehe Laborbuch, S. 11-16).
- Für eine gute Übersicht der möglichen Cocktails wurde ein farbiges Poster mit allen Long Drinks erstellt (siehe Anhang S. 70) und die Cocktailkarte im Laborbuch wurde auf eine Übersichtsseite verkürzt (Laborbuch, S. 4)
- Für die Durchführung des Workshops wird die unbekannte Probe mindestens einen Tag vorab hergestellt und zur Neutralisierung des Geruches in den Abzug gestellt.

5.2. Laborphase II

In der zweiten Laborphase lag der Fokus der Testung auf der Auswertung der ^1H -NMR-Spektren durch die Expert*innen. Da die Vorbereitung und Messung der NMR Proben für diese keine Schwierigkeiten darstellten, wurden für den Testlauf alle wichtigen Vergleichsspektren der Inhaltsstoffe sowie das Spektrum der unbekannten Probe vorab gemessen und ausgedruckt bereitgestellt (siehe Laborbuch, Betreuer*innen, S.27-29). Die Beschriftung der einzelnen Peaks lag jedoch noch nicht vor.

Für die Durchführung des zweiten Teils der Testung wurde die Methode des lauten Denkens verwendet. Diese Methode der qualitativen Forschung zeigt die unterschiedlichen Denkvorgänge und Prozesse zur Entscheidungstreffung und Problemlösung auf und wird in vielen Forschungsbereichen, wie etwa der Unterrichts- oder Problemlöseforschung, verwendet (Konrad, 2020).

Hierfür wurden die Teilnehmer*innen aufgefordert, alle ihre Gedanken bei der Identifikation der Spektren kontinuierlich laut auszusprechen. Alle Bearbeitungsschritte sollten kommuniziert und begründet werden, damit später aus dem beobachteten Vorgehen der Expert*innen Hilfestellungen für die Workshopteilnehmer*innen abgeleitet werden können. Am Ende der Auswertung sollten die Proband*innen über mögliche aufgetretene Schwierigkeiten sprechen und selbst Hilfestellungen für das Lesen eines NMR-Spektrums mit Hilfe von Vergleichsspektren formulieren. Der beschriebene Testlauf wurde mittels Audiodatei aufgenommen und transkribiert. Das Transkript ist im Anhang (siehe S. 52) zu finden. Da der Fokus dieser Testung auf dem Inhalt der Expert*innendiskussion lag, wurde auf einen Zeitstempel verzichtet und mittels Zeilennummer zitiert. Die Gesamtdauer der Testphase lag bei 20 Minuten und 58 Sekunden.

Während der Testung konnte beobachtet werden, dass sich die Expert*innen zuerst einen Überblick verschaffen haben, indem sie das Spektrum der unbekannten Probe mit den Spektren der einzelnen Inhaltsstoffe verglichen. Die Testpersonen schlossen hier zuerst den Limettensaft aus (Zeile 7), da im Spektrum der unbekannten Probe der Peak des Zitrates nicht eindeutig als Dublett zu erkennen war. Damit kamen sie gleich zu Beginn schon zum gewünschten Ergebnis, dass es sich bei der Probe um dem Cocktail Vodka Red Bull handeln müsse (Zeile 19-20). Zur Ergebnissicherung wurden hier die Inhaltsstoffe dieses Cocktails weiter verglichen, wobei die Entscheidung der Expert*innen bei Vodka Red Bull bleibt. Der Fokus bei der Interpretation lag auf den charakteristischen Peaks der einzelnen Inhaltsstoffe (Zeile 25), die auf Grund ihrer Lage auf der x-Achse verglichen wurden (Zeile 29, 47-48).

Auf Nachfrage der Testleitung wurden die Peaks der einzelnen Inhaltsstoffe im Spektrum der unbekannten Probe möglichst genau beschriftet. Die Testpersonen konnten hier das Signal des Ethanols eindeutig zuordnen (Zeile 68-70). Bei den weiteren Peaks wurde sofort darauf

hingewiesen, dass es sich dabei um Überlagerungen von Substanzen wie Saccharose, Taurin und Coffein handeln könnte und dadurch die genaue Charakterisierung schwierig sei (Zeile 72-77, 111-114). Durch das Vorwissen der Expert*innen konnte weiters das Signal des Wasser bei 4,7 ppm ohne Zweifel festgelegt werden (Zeile 79, 177).

Es wurde von den Testpersonen darauf hingewiesen, dass es wichtig sei, sich einen guten Überblick zu verschaffen und zuerst die eindeutig zuordbaren Peaks der einzelnen Inhaltsstoffe mit dem Spektrum der unbekannten Probe zu vergleichen, da auf Grund der Überlagerungen nicht alle Signale im Probenspektrum charakterisierbar sind (Zeile 122-131). Im weiteren Verlauf der Testung kam die Frage auf, ob der unscharfe Peak bei 3 ppm in der unbekannten Probe doch ein Dublett sei und somit Limettensaft in der Probe enthalten wäre (Zeile 132-135).

Da die Testpersonen nicht wussten, ob in Red Bull Zitrat enthalten ist, wurde in Folge ihre Long Drink Wahl mit dem Peak des Coffeins auf der linken Seite des Probenspektrums begründet, welcher nur im Spektrum von Red Bull und der unbekannte Probe vorkam (Zeile 146, 196-203). Bei der Testung wurde vermehrt darauf hingewiesen, dass die vorliegenden Spektren nicht dieselbe Skalierung haben und etwa bei Club Mate die Skala auf der x-Achse bei 6 ppm endet, in der unbekannten Probe jedoch noch ein Peak bei 8 ppm auftritt (Zeile 147-153). Trotz der verkürzten Skala wurden die vorliegenden Signale der unbekannten Probe aber ähnlicher zu denen von Red Bull als zu Club Mate beurteilt (Zeile 155-159).

Betrachtet man die gesamte Vorgehensweise der Testpersonen bei der Bearbeitung der Aufgabenstellung, so lässt sich diese mit dem Lösen eines Puzzles vergleichen. Ausgehend von einzelnen Peaks bzw. Inhaltsstoffen wurde das gesamte Spektrum der Probe im Laufe der Testung immer genauer charakterisiert.

Zur Veranschaulichung der Signale wurde von den Testpersonen eine farbige Markierung sowie Beschriftung der Peaks vorgenommen (Abbildung 25).

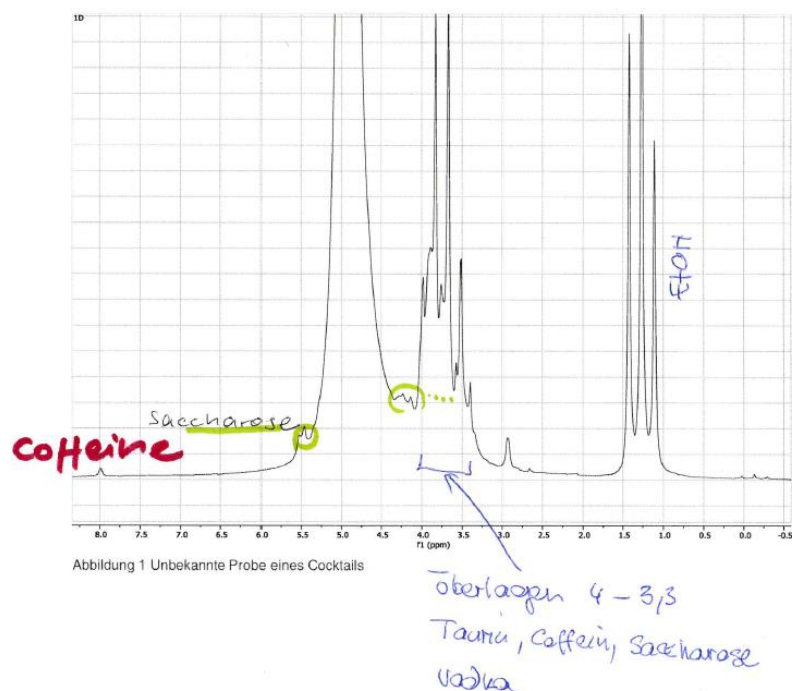


Abbildung 25: Bearbeitetes Spektrum der unbekannten Probe

Zum Abschluss wurden die Expert*innen noch nach Tipps gefragt, welche sie den Schüler*innen für das Interpretieren der NMR-Spektren mitgeben würden (Zeile 237). Diese wurden ausgehend von den Aussagen der Testpersonen wie folgt zusammengefasst (Zeile 240-243, 245-248, 251-256):

- Betrachtet zu Beginn die Spektren der einzelnen Inhaltsstoffe.
- Sucht die speziellen Signale raus, die nur in diesem Inhaltsstoff (Einzelspektrum) vorhanden sind.
- Vergleicht diese Signale mit denen der ungekannten Probe.
- Wendet mit Hilfe der Cocktailkarte das Ausschlussprinzip in Falle von Unsicherheiten an.

Diese Hilfestellungen sollen bei der praktischen Durchführung mit Schulklassen von den Betreuungspersonen an die Lernenden weitergegeben werden. Falls zu wenige Betreuer*innen vorhanden wären, könnte man diese auch mit Hilfe von Tippkarten den Schüler*innen zur Verfügung stellen.

Die aufgetretenen Schwierigkeiten, wie etwa die unterschiedliche Skalierung der Spektren, sind für die praktische Durchführung nicht relevant, da hier die Schüler*innen das Spektrum selbst messen und über ein Computerprogramm individuell den Ausschnitt wählen können.

Zusammengefasst lässt sich feststellen, dass die Testungen beider Laborphasen sehr erfolgreich verlaufen sind und das Feedback der Expert*innen bis auf kleine Anmerkungen sehr positiv war. Es traten nur wenige Schwierigkeiten auf, wodurch die Testpersonen alle Aufgaben ohne wirkliche Probleme lösen konnten. Die bereits genannten Verbesserungsvorschläge werden eingearbeitet und die Workshopmaterialien werden auf die im Anhang vorliegenden Endversion aktualisiert (S. 70).

6. Durchführung des Experimentiertages

Für die praktische Durchführung des Experimentiertages an der Universität Wien mit Schüler*innen wurden zwei 8. Klassen aus dem Bundes- und Realgymnasium Albertgasse (BGRG 8) ausgewählt. Die beiden Abschlussklassen bestanden jeweils aus 17 bzw. 18 Schüler*innen, wobei jene aus dem Realgymnasium gesamt fünf Jahreswochenstunden Chemie, sowie vier Jahreswochenstunden naturwissenschaftliches Labor in der Oberstufe vorweisen konnten. Im Gymnasiumsweig beschränkt sich der Chemieunterricht auf die üblichen vier Jahreswochenstunden.

Für die Umsetzung des Konzepts wurden der 14. und der 15. Februar 2022, jeweils von 8:00 bis 13:00 Uhr, festgelegt. Auf Grund der zu diesem Zeitpunkt geltenden Covid-19 Sicherheitsvorkehrungen wurde zusätzliche Zeit für das Betreten der Universität sowie für Maskenpausen eingerechnet. Die beiden Klassen durchliefen unabhängig voneinander den Workshop an einem Vormittag, wobei bereits Erkenntnisse des ersten Experimentiertages in die Durchführung am nächsten Tag einfließen. Für die Betreuung des Workshops wurden zusätzlich zum Projektteam fünf Master- sowie Doktoratsstudent*innen, aus dem Fachbereich der NMR, eingebunden. Der erste Experimentiertag wurde mittels Video für weitere didaktische Forschungen aufgezeichnet. Aus den Aufnahmematerialien wurde das Video „Schüler*innen im Labor: NMR for Food Profiling“ auf dem YouTube Kanal der Universität Wien veröffentlicht (<https://www.youtube.com/watch?v=G3OXMip9oLM>).

Vorab wurden die benötigten Chemikalien und Materialien in Experimentierboxen für die jeweilige Kleingruppe gesammelt und das Laborbuch ausgedruckt für jede Person zur Verfügung gestellt. Die Betreuer*innen erhielten eine Einschulung und das Labor, sowie der Hörsaal wurden für den Workshop entsprechend vorbereitet. Für die Laborphasen wurde ein allgemeiner Materialtisch (siehe Abbildung 26) mit den benötigten Lebensmitteln aufgestellt.



Abbildung 26: Materialtisch

Die PC-Workstation mit dem Spektrometer für die ^1H -NMR-Messungen ist in Abbildung 27 zu sehen.



Abbildung 27: PC-Workstation mit ^1H -NMR-Spektrometer

Für die Erhebung des Feedbacks wurden Fragebögen für die Schüler*innen und die Lehrperson als auch ein Beobachtungsbogen für die Betreuungspersonen durch das Projektteam vorbereitet. Die Vorlage zum Beobachtungsbogen (siehe Anhang S. 60) stammt aus dem Schüler*innenlabor ELKE. Um den Rahmen dieser Masterarbeit einzuhalten, wird im folgenden Kapitel nur auf die Ergebnisse aus den Beobachtungsbögen der Betreuer*innen näher eingegangen.

6.1. Erkenntnisse aus der Praxis

Die praktische Durchführung des Workshoptages verlief an beiden Tagen sehr positiv. In beiden Klassen war es für alle Lernenden möglich, dem Konzept des Workshops zu folgen und auf das erwartete Ergebnis zu kommen. Der Wechsel zwischen den einzelnen Laborphasen sowie den Räumlichkeiten der Universität verlief ohne Probleme. Der zeitliche Rahmen wurde, bis auf die Wartezeit bei der NMR-Messung in der Laborphase II, gut eingehalten. Im Folgenden werden die Erkenntnisse, bezogen auf die jeweilige Phase des Workshops, erörtert, wobei an manchen Stellen Bezug auf den Beobachtungsbogen der Betreuungspersonen genommen wird:

Der Einstieg in den Experimentiertag über die zuvor erwähnte Fallgeschichte verlief ohne besondere Vorkommnisse. Die Schüler*innen stellten hier an beiden Tagen keine Verständnisfragen und konnten den Arbeitsanweisungen folgen.

In der Laborphase I konnte man beobachten, dass die Schüler*innen an beiden Tagen unterschiedlich lange mit der Planung der Experimente beschäftigt waren. In manchen Kleingruppen wurde sofort mit dem ersten Experiment begonnen, in anderen lange über die jeweilige Vorgehensweise diskutiert. Es zeigte sich, dass viele der Lernenden bisher nur wenig Erfahrung im selbstständigen Planen eines Experimentes gemacht hatten und manche Schüler*innen hier wenig Sicherheit hatten, wodurch die Betreuer*innen oftmals um Bestätigung einer möglichen Planung gefragt wurden (Beobachtungsbogen 2). Die meisten Gruppen schlossen gleich zu Beginn einige Long Drinks durch die unterschiedliche Farbe aus, andere Gruppen wurden erst durch die Betreuungspersonen auf dieses Unterscheidungsmerkmal aufmerksam gemacht. In dieser Laborphase mussten die Lernenden auch wiederholt auf die Sicherheitsvorkehrungen im Labor aufmerksam gemacht werden, obwohl diese zu Beginn vom Projektteam erklärt wurden (Beobachtungsbogen 3). Da ein*e Student*in maximal zwei Kleingruppen betreute, kam es selten zu Wartezeiten bei Fragen. Für eine erneute Durchführung wäre ein größerer Betreuungsmaßstab möglich, da die Betreuungspersonen durch ihre bisher gesammelten Erfahrungen bereits am zweiten Tag sehr schnell und gezielt auf die Fragen der Lernenden antworten konnten. Beim praktischen Teil des Arbeitens konnte man beobachten, dass klare Arbeitsanweisungen sehr wichtig waren. Am ersten Tag wurden die Schüler*innen allein vom Vortragssaal in den Laborsaal entlassen. Am zweiten Tag wurde im Laborsaal nochmals kurz auf die Arbeitsanweisungen hingewiesen und vor Ort der Materialtisch sowie die Sicherheitsvorkehrungen aufgezeigt. Somit gab es bei der zweiten Durchführung weniger Unklarheiten über das Auffinden der zusätzlichen Materialien und die Sicherheitsvorkehrungen wurden von den Schüler*innen vermehrt berücksichtigt. Da der Großteil der Materialien bereits vorbereitet in den jeweiligen Materialboxen der Kleingruppen bereitstand, konnten die Teilnehmer*innen direkt starten und im Laborsaal hatte man einen guten Überblick, da die Lernenden ihren Platz nicht oft verlassen mussten (Beobachtungsbogen 4). In dieser Laborphase stellten die englischsprachigen Studierenden fest, dass die Lernenden oftmals überfordert mit dem Wechsel der Arbeitssprache waren und häufiger die deutschsprachigen Betreuungspersonen um Hilfe baten (Beobachtungsbögen 1 und 2).

In der Besprechung der Zwischenergebnisse wurden von den Lernenden viele unterschiedliche Vorgehensweisen präsentiert. Obwohl die Schüler*innen ihre Auswahl zuerst mit den Nachweisexperimenten präsentierten, wurden hier von manchen Gruppen die Long

Drinks Mojito sowie Vodka Mate auf Grund des charakteristischen Geruches der unbekannten Probe nach Red Bull ausgeschlossen. Der intensive Geruch wurde trotz der Probenvorbereitung von einigen Schüler*innen gleich zu Beginn wahrgenommen, jedoch wurde hier auf eine Begründung mit Hilfe der Nachweisexperimente hingewiesen. Somit hatten die Lernenden zwar eine eindeutige Hypothese, mussten diese aber noch auf einem anderen Weg in der darauffolgenden Laborphase II beweisen.

Beim fachlichen Input zur NMR-Spektroskopie war es eine Herausforderung, den vorhandenen Wissensstand der Schüler*innen einzuschätzen. Bei der Durchführung am ersten Tag konnte man beobachten, dass die Klasse viele der vorkommenden Begriffe, wie zum Beispiel Methylgruppe, Elektronendichte etc., nicht gleich einordnen konnte. Somit hatten viele Lernende Probleme beim Lösen der Übungsaufgaben und das parallele Ausfüllen des Lückentextes während des Vortrages führte bei manchen zu Missverständnissen. Am zweiten Tag konnte direkt darauf reagiert werden, indem manche Begriffe nochmals erklärt wurden, organische Verbindungen zur besseren Vorstellung an die Tafel gezeichnet wurden und die Lernenden direkt auf das Eintragen der wichtigen Begriffe im Laborbuch hingewiesen wurden. Die Übungsaufgaben wurden bei der zweiten Durchführung auch als Schnelldenkeraufgaben für das Ende der Laborphase II angedacht, da diese nicht zwingend für die richtige Interpretation der NMR-Spektren notwendig waren. Während des Vortrages sorgte vor allem das Video zum Resonanzphänomen für großes Erstaunen. Besonders aufmerksam wurde auch bei den weiteren Alltagsbezügen sowie bei der Vorführung mit Hilfe des Magneten zugehört.

In der Laborphase II gelang es allen Schüler*innen ihr zuvor neu erlerntes Wissen über die NMR-Spektroskopie praktisch auf die Aufgabenstellung anzuwenden. Da für die Durchführung des Workshops nur ein Spektrometer im Labor zur Verfügung stand, kam es hier zu Wartezeiten bei den Kleingruppen. Um diese zu verkürzen, konnten einzelne Gruppe auf das NMR-Zentrum der Universität Wien ausweichen und dort ihre Proben messen. Jedoch nahm dies auf Grund der räumlichen Distanz sehr viel Zeit in Anspruch, sodass pro Tag nur zwei bis drei Gruppen diese Möglichkeit hatten. Am zweiten Tag konnte hier die Wartezeit zusätzlich durch ein vereinfachtes Ausdrucken der NMR-Spektren optimiert werden (Beobachtungsbogen 3). Einige Lernende, welche am Beginn zu wenige Vergleichssubstanzen ausgewählt hatten, tauschten sich hier auch mit anderen Gruppen aus, um nicht erneut eine Messung durchführen zu müssen. Bei der Interpretation der Spektren wurden die Betreuungspersonen sehr häufig miteingebunden, da viele Schüler*innen hier noch Fragen hatten. Am Ende des Workshops kamen alle Gruppen zu einem eindeutigen Ergebnis und konnten den Experimentiertag mit Erfolg abschließen.

In der abschließenden mündlichen Feedbackrunde mit den Schüler*innen wurde das Konzept des Experimentiertages sehr gelobt und das Design des Laborbuches positiv hervorgehoben. Die Lernenden fühlten sich bei einigen Aufgaben herausgefordert, jedoch auch gut betreut. Der Geruch der unbekannten Probe wurde, wie zuvor schon erwähnt, von manchen als kontraproduktiv angemerkt. Die Methode der NMR-Spektroskopie war für viele sehr komplex, jedoch wurde sie auf Grund der sofortigen praktischen Umsetzung für die Lernenden etwas greifbarer. Das Setting des Workshops in den Räumlichkeiten der Universität und die Betreuung durch Studierende wurde in der Feedbackrunde auch positiv vermerkt.

Zusammenfasst lässt sich das Konzept des Experimentiertages *NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment* sowie die erstellten Materialien als erfolgreich bezeichnen. Die Aufgabenstellungen konnten von allen Schüler*innen umgesetzt werden und die erwarteten Ergebnisse wurden erreicht. Einzelne Phasen des Workshops können noch optimiert werden, wie etwa die Strukturierung der Laborphase II zur Vermeidung von Wartezeiten und die Anpassung des fachlichen Input zur NMR-Spektroskopie an das Vorwissen der Schüler*innen. Davon abgesehen, gab es kaum Schwierigkeiten bei der ersten Durchführung und das Konzept des Workshops kann für eine weitere Umsetzung so weit übernommen werden.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Für die Erstellung von interdisziplinären Materialien zur Umsetzung eines innovativen Lernangebotes für Schüler*innen der Sekundarstufe II zum Thema alkoholische Mixgetränke und NMR-Spektroskopie werden diese Themen didaktisch rekonstruiert und für den Workshop aufgearbeitet. Durch die Umsetzung an der Universität können die Schüler*innen einen direkten Einblick in den universitären Alltag gewinnen und möglicherweise für ein späteres naturwissenschaftliches Studium begeistert werden.

Durch den forschungsmethodischen Zugang des *Design-Based Research Cycle* nach Euler und Sloane (2014) wurden die Materialien mit Hilfe von Literaturvergleichen von inhaltlich angelehnten Projekten erstellt. Das Konzept des Experimentiertages zum Thema *NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment* gliedert sich in mehrere Phasen, wobei die Teilnehmer*innen über eine alltagsnahe Fallgeschichte zum Thema Long Drinks in die Thematik einsteigen. Im Laufe des Experimentiertages müssen die Schüler*innen eine unbekannte Cocktailprobe identifizieren, wofür sie zuerst in einer qualitativen Laborphase selbst ausgewählte Nachweisreaktionen durchführen. Um die Forschungsfrage zu lösen, wird ihnen die Methode der NMR-Spektroskopie vorgestellt, mit Hilfe derer sie ihre Probe zum Schluss eindeutig identifizieren können.

Zur Strukturierung des Workshoptages wurde im Zuge dieser Arbeit ein Laborbuch für die Schüler*innen sowie für die Betreuungspersonen erstellt, welches das Lernprodukt des Experimentiertages darstellt.

Bevor das Konzept an der Universität Wien im Zuge des ELKE^{AUSTRIA} Labors mit Schüler*innen getestet wurde, fand eine erste Evaluation der beiden Laborphasen durch Expert*innen aus dem Fachbereich der NMR statt. Die Ergebnisse aus diesem Testlauf wurden in die Materialien eingearbeitet und anschließend konnte der Workshop mit zwei Schulklassen durchgeführt werden.

Bei dieser praktischen Umsetzung konnte beobachtet werden, dass sowohl das Konzept als auch die Materialien positive Rückmeldungen erzielten. Bis auf kleine Optimierungsmöglichkeiten können die Unterlagen somit für weitere ELKE^{AUSTRIA} Labore verwendet werden.

Da es sich um ein interdisziplinäres Projekt handelt, ist für die zukünftige Weiterführung eine argumentative Diskussionsphase, mit Fokus auf die Ernährungs- und Verbraucher*innenbildung, geplant. Hier sollen die Schüler*innen mit Bezug auf ihre wissenschaftliche Urteilskompetenz auf Themen wie den Konsum von Alkohol und dessen Auswirkungen eingehen. Auch bestehen viele Materialienergänzungsmöglichkeiten durch fächerübergreifende Themen wie der Verdauung von Alkohol im menschlichen Körper oder der Produktion von unterschiedlichen Alkoholsorten in der Industrie.

Interessant wäre eine erneute Durchführung des Experimentiertages mit einer anderen Schulklasse und eine anschließende Auswertung aller Schüler*innenfragebögen. Da der Verlauf des Workshoptages, wie in dieser Arbeit schon erwähnt wurde, sehr vom Vorwissen der Schüler*innen abhängig ist, könnte man somit neue Erkenntnisse zur weiteren Adaption der Materialien gewinnen.

8. Literaturverzeichnis

Ackermann, Dolsophon, K., Monakhova, Y. B., Kuballa, T., Reusch, H., Thongpanchang, T., Bunzel, M., & Lachenmeier, D. W. (2016). Automated Multicomponent Analysis of Soft Drinks Using 1D 1H and 2D 1H-1H J-resolved NMR Spectroscopy. *Food Analytical Methods*, 10(3), 827–836. <https://doi.org/10.1007/s12161-016-0643-y>

Anastasiadi, Zira, A., Magiatis, P., Haroutounian, S. A., Skaltsounis, A. L., & Mikros, E. (2009). 1H NMR-Based Metabonomics for the Classification of Greek Wines According to Variety, Region, and Vintage. Comparison with HPLC Data. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 57(23), 11067–11074. <https://doi.org/10.1021/jf902137e>

aprentas. (2017). *Laborpraxis Band 4: Analytische Methoden* (6. Aufl. 2017.). Springer International Publishing Imprint: Springer.

Bienz, Bigler, L., Fox, T., Meier, H., Hesse, M., & Zeeh, B. (2016). *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie* (9., überarbeitete und erweiterte Auflage.). Georg Thieme Verlag.

Bonjour, Pitzer, J. M., & Frost, J. A. (2015). Introducing High School Students to NMR Spectroscopy through Percent Composition Determination Using Low-Field Spectrometers. *Journal of Chemical Education*, 92(3), 529–533.

Bruice, & Reiser, O. (2011). *Organische Chemie - Studieren kompakt* (5., aktualisierte Aufl.). Pearson Studium.

Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung. (2021). Bundesrecht konsolidiert: Gesamte Rechtsvorschrift für Lehrpläne – allgemeinbildende höhere Schulen, Fassung vom 28.09.2021.
<https://www.ris.bka.gv.at/GeltendeFassung.wxe?Abfrage=Bundesnormen&Gesetzesnummer=10008568&FassungVom=2018-09-01#header> (22.05.2022)

Dähnhardt, D., Sommer, K., & Euler, M. (2007). Lust auf Naturwissenschaft und Technik. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*, 18 (99), 4-10.

Euler, & Sloane, P. F. (2014). *Design-Based Research* (Vol. 27). Steiner.

Groß, Kurzbach, D., & Angele, C. M. (2020). NMR for food profiling – Long Drink, Short Experiment. *Haushalt in Bildung & Forschung*, 9(4), 79–96.
<https://doi.org/10.3224/hibifo.v9i4.06>

Groß, & Schumacher, A. (2018). Konzept und Evaluation des kompetenzorientierten Schülerlabors ELKE zum Thema „Ein Tag mit Chemie – Schülerreporter im Labor“. In C. Maurer (Hrsg.), *Qualitätsvoller Chemie- und Physikunterricht - normative und empirische Dimensionen*. (S.733-736). Regensburg: Universität Regensburg 2018, 922 S. - (Gesellschaft für Didaktik der Chemie und Physik; 38)

Groß, & Schumacher, A. (2020). Chemistry Escape – Finde den Weg. *Chemie in unserer Zeit*, 54(2), 126–130. <https://doi.org/10.1002/ciuz.201900009>

Keeler. (2010). *Understanding NMR spectroscopy* (2. ed.). Wiley.

Konrad. (2020). Lautes Denken. In *Handbuch Qualitative Forschung in der Psychologie* (pp. 373–393). Springer Fachmedien Wiesbaden. https://doi.org/10.1007/978-3-658-26887-9_41

Lamanna. (2013). Proton NMR Profiling of Food Samples. In *Annual Reports on NMR Spectroscopy* (Vol. 80, pp. 239–291). Elsevier Science & Technology.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-408097-3.00004-4>

Linden-Carmichael, & Lau-Barraco, C. (2017). Alcohol Mixed with Energy Drinks: Daily Context of Use. *Alcoholism, Clinical and Experimental Research*, 41(4), 863–869.

Magyar, Liebhart, Jelinek, Faber, Strnad, Liebhart, Wolfgang, Jelinek, Gabriela, Faber, Wolfgang, & Strnad, Andrea. (2020). *ELMO : Elemente & Moleküle* (1. Auflage.). öbv.

Marczinski, & Fillmore, M. T. (2014). Energy drinks mixed with alcohol: what are the risks? *Nutrition Reviews*, 72(1), 98–107. <https://doi.org/10.1111/nure.12127>

Morris. (2019). Varian Associates and the birth of commercial NMR spectroscopy. *Journal of Magnetic Resonance* (1997), 306, 12–16. <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2019.07.039>

Mortimer, & Müller, U. (2020). *Chemie: Das Basiswissen der Chemie* (13., Auflage.). Georg Thieme Verlag. <https://doi.org/10.1055/b-006-163279>

Peifer, P., Schaffer, S., & Sommer, K. (2011). Schülerexperimente im Chemieunterricht. Auswahlkriterien und Beispiele. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*, 22 (126), 2-9.

Reitinger. (2013). *Forschendes Lernen: Theorie, Evaluation und Praxis in naturwissenschaftlichen Lernarrangements*. Prolog-Verl.

Russek, A. (2020). Alkoholfreies Bier – alles nur Marketing? Ein Nachweisverfahren für Ethanol durchführen. *Naturwissenschaften im Chemie Unterricht*, 31(175), 18-21.

Santucci, Tenori, L., & Luchinat, C. (2015). NMR fingerprinting as a tool to evaluate post-harvest time-related changes of peaches, tomatoes and plums. *Food Research International*, 75, 106–114. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2015.05.046>

Skala. (2020). Jugend und Alkohol. *Neuropsychiatrie*, 34(4), 164–170. <https://doi.org/10.1007/s40211-020-00365-7>

Steffensky, M. (2007). Schülerlabore – nur für Schüler? Praxisrelevante Lerngelegenheiten für Studierende und Lehrkräfte. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*, 18 (99), 46-49.

Tossmann, & Weber, N. H. (2008). *Alkoholprävention in Erziehung und Unterricht* (2., völlig neue Auflage.). Centaurus Verlag & Media Imprint: Centaurus Verlag & Media.

Wilson, Myers, C., Crull, G., Curtis, M., & Pasciak Patterson, P. (1999). Analysis of Soft Drinks Using Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: A Mentorship. *Journal of Chemical Education*, 76(10), 1414–1416.

Wollrab. (2009). *Organische Chemie: Eine Einführung für Lehramts- und Nebenfachstudenten*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Zucconi, Volpato, C., Adinolfi, F., Gandini, E., Gentile, E., Loi, A., & Fioriti, L. (2013). Gathering consumption data on specific consumer groups of energy drinks. *EFSA Supporting Publications*, 10(3), n/a–n/a. <https://doi.org/10.2903/sp.efsa.2013.EN-394>

9. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Außerschulischer Lernort ELKE (Groß & Schumacher, 2020).....	4
Abbildung 2: Anregungsarten der elektromagnetischen Spektroskopie (modifiziert nach aprentas, 2017)	8
Abbildung 3: ^1H -Atomkerne als Stabmagneten.....	9
Abbildung 4: Ausrichtung der ^1H -Atomkerne nach dem Anlegen eines äußeren Magnetfeldes	9
Abbildung 5: Wechsel der Energieniveaus	10
Abbildung 6: Aufbau eines Spektrometers (Kurzbach, 2020).....	11
Abbildung 7: Chemische Verschiebung	12
Abbildung 8: Chemische Verschiebung am Beispiel von Ethanol	14
Abbildung 9: Aufspaltung der Signale auf Grund der Spin-Spin-Koppelung (erstellt nach Bienz et al, 2016	14
Abbildung 10: ^1H -NMR-Spektrum eines Trinkalkohols (hier Vodka).....	15
Abbildung 11: Design-Based Research Cycle mit Projektbezug (erstellt nach Euler & Sloane, 2014).....	18
Abbildung 12: ^1H -NMR-Spektrum von Red Bull Energy Drink.....	20
Abbildung 13: ^1H -NMR-Spektrum Zitrat (in Limettensaft).....	21
Abbildung 14: ^1H -NMR-Spektrum Coffein.....	21
Abbildung 15: ^1H -NMR-Spektrum D-Glucose	21
Abbildung 16: ^1H -NMR-Spektrum Saccharose	21
Abbildung 17: ^1H -NMR-Spektrum Taurin	21
Abbildung 18: ^1H -NMR-Spektrum Red Bull Energy Drink	22
Abbildung 19: ^1H -NMR-Spektrum Vodka.....	22
Abbildung 20: ^1H -NMR-Spektrum der unbekannten Probe (Vodka Red Bull, aufbereitet)	22
Abbildung 21: ^1H -NMR-Spektrum Mojito.....	23
Abbildung 22: ^1H -NMR-Spektrum Vodka Mate	23
Abbildung 23: Ablauf des Experimentiertages	27
Abbildung 24: Checkliste der Testpersonen	35
Abbildung 25: Bearbeitetes Spektrum der unbekannten Probe.....	38
Abbildung 26: Materialtisch	40
Abbildung 27: PC-Workstation mit ^1H -NMR-Spektrometer.....	41

10. Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Konsum (mindestens einmal wöchentlich) von alkoholischen Getränken bei Schüler*innen der 9. und 11. Schulstufe (erstellt nach Felder-Puig et al., 2019).....	3
Tabelle 2: Hilfestellung zur Interpretation von ^1H -NMR-Spektren (modifiziert nach aprentas 2017).....	13
Tabelle 3: Ergebnisse der qualitativen Experimente aus Laborphase I.....	24
Tabelle 4: Ursprünglich erstellte Planungstabelle	34

11. Anhang

11.1. Transkript

1 Person 1: Also das erste was ich mache ist einfach mal alle Spektren anzuschauen und
2 dabei jene auszuschließen, die überhaupt nicht übereinstimmen mit dem. Das
3 wäre zum Beispiel der Limettensaft glaube ich. Weil hier haben wir bei 1 ppm,
4 ah Entschuldigung bei 3 ppm, habe wir ein Dublett, also eine Aufspaltung.

5 Person 2: Mhm, ein Quartett?

6 Person 1: Oh ein Quartett Entschuldigung. Und die haben wir halt in dem Testspektrum
7 nicht, das heißt es wäre zum Beispiel kein Limettensaft, höchstwahrscheinlich
8 in der Probe vorhanden, würde ich schätzen.

9 Person 2: Das kann schon drinnen sein, aber es kann sich eventuell mit denen ja auch
10 überlagern. Oder das ist bei drei?

11 Person 1: Das wäre bei drei, aber bei drei haben wir hier nichts. Das heißt wenn wir den
12 Limettensaft eigentlich ausschließen können und Limette eigentlich (...) es gibt
13 kein Spektrum von Limette, oder?

14 Person 2: Doch. Limettensaft!

15 Person 1: Aber es ist einmal Limette und einmal Limettensaft?

16 Testleitung: Es ist der Limettensaft gemeint.

17 Person 1: Ja gut. Dadurch das in zwei von den drei Cocktails eigentlich Limette vorhanden
18 ist und in einem nicht, könnte man eigentlich direkt Rückschlüsse ziehen, dass
19 das andere eigentlich drinnen sein muss. Das heißt, Vodka Red Bull.

20 Person 2: Voll. Aber ich würde bevor wir sagen es ist Vodka Red Bull, würd ich auch davon
21 (...) weil du hast ja in Vodka Red Bull ja ganz bestimmte Dinge die Vodka Red
22 Bull ausmachen...

23 Person 1: Ja Vodka und Red Bull.

24 Person 2: ...und da würde ich die charakteristischen Sachen aber vergleichen.

25 Person 1: Genau, dass wäre das nächste.

26 Person 2: Mhm.

27 Person 1: Das heißt ich würde dann mal Vodka anschauen. Den haben wir da. Und da
28 sehen wir halt dieses ganz spezifische Triplett zwischen 1,5 und 0,5.

29 Person 2: Vom Ethanol, mhm.

30 Person 1: Genau. Das heißt, dass wäre einmal vorhanden in dem Spektrum. Und dann
31 haben wir noch Red Bull.

32 Person 2: Warte. Ok gut. Das sieht sehr ähnlich aus.

33 Person 1: Das sieht auch sehr ähnlich aus. Im Sinne von in Red Bull ist ja auch Taurin
34 vorhanden, das heißt, dass wäre eine Mischung aus Red Bull und dem
35 Taurinspektrum. Dem hier.

36 Person 2: Ja ich glaub das ist die (...) ja voll! Die Überlagerung davon.

37 Person 1: Genau.

38 Person 2: Mhm.

39 Person 1: Das heißt die Kombination von den beiden würde das da ergeben. Und das
40 Vodka Spektrum ist halt auch nochmal eine Überlagerung mit den
41 Taurinspektren und den Red Bull Spektren. Und gleichzeitig halt diesem
42 signifikanten Ethanolpeak eigentlich.

43 Person 2: Ja gut. Alkohol wäre ja so oder so drinnen gewesen.

44 Person 1: Sowieso.

45 Person 2: Wie möchten wir ausschließen, dass das nicht die Club Mate ist? Guck mal die
46 hat ja hier (...) ahm zwischen 4,4 und 3,4 ppm und hier auch 4,5 bis (...) ja so
47 3,2 circa. Ist doch recht ähnlich?

48 Person 1: Das stimmt schon, aber Club Mate ist doch in Vodka Mate drinnen und da wäre
49 auch noch Limettensaft vorhanden. Das heißt wenn wir keinen
50 Limettensaftpeak haben, haben wir halt, glaube ich, kein Vodka Mate.

51 Person 2: Ok.

52 Person 1: Würde ich schätzen. Halt als Ausschlussprinzip einfach mal.

53 Person 2: Voll. Da stimme ich zu. Das wir über die Limette quasi das ausschließen können
54 (...) das das die Mate ist. Wollen wir unser finales äh (...) genau.

55 Person 1: Ja also ich würde sagen es handelt sich bei der unbekannten Probe des
56 Cocktails um Vodka Red Bull.

57 Person 2: Mhm.

58 Person 1: Ich weiß nicht, ob du mir zustimmst?

59 Person 2: Doch. Ich glaube auch. Es ist vor allem die Limette. Die (...) ja (...) die hats für
60 mich auch aufgeklärt.

61 Testleitung: Ok, wenn ihr euch jetzt für Vodka Red Bull entschieden habt und ihr sagt dieses
62 Spektrum würde Vodka Red Bull darstellen, könnt ihr dann mit Hilfe der
63 Vergleichsspektren auch erkennen, was alles in diesem Cocktail enthalten ist?
64 Also welche Zutaten? Weil wir haben zwar hier stehen Red Bull Energy Drink
65 und Vodka, aber was seht ihr hier auf diesem Spektrum? Könnt ihr die einzelnen
66 Peaks verordnen? Vielleicht auch beschriften?

67 Person 2: Voll, dass probieren wir. Das wie gehabt das ist das Ethanol, das Triplett bei ca.
68 1,3 ppm.

69 Person 1: Das wäre (...) ja ich beschrifte einfach. Das ist Ethanol.

70 Person 2: Mhm.

71 Person 1: Das Problem ist an den restlichen Peaks ist halt eine Überlagerung von
72 verschiedenen Sachen. Zum Beispiel in Red Bull ist vorhanden Saccharose,
73 wahrscheinlich, Zucker. Dann haben wir noch Taurin drinnen und Coffein. Das
74 heißt es ist ein Mix aus diesen drei Spektren, die halt, dadurch dass sie sich
75 überlagern, nicht genau gleich aussehen wie auf den Referenzspektren. Das
76 heißt es ist schwer zu sagen, dass ist von jenen und das ist von denen.

77 Person 2: Ich glaube aber quantitative können wir schon (...) guck mal, zum Beispiel links
78 von der Wasserlinie. Also bei ca. 5,5 ppm, würde ich sagen, dass ist ziemlich
79 sicher die Saccharose, dass man die auf jeden Fall da beschriften kann. Warte
80 ich zeichne einmal ein. Genau. Für mich sieht es so aus, als wäre links von der
81 Wasserlinie und rechts von der, die beiden, gehören auf jeden Fall zum
82 Saccharose Signal. Und das ist die Überlagerung glaube ich, von Dingen wie
83 Taurin...

84 Person 1: Coffein!

85 Person 2: ...Coffein ist wahrscheinlich auch drinnen.

86 Person1: Und Saccharose wahrscheinlich.

87 Person 2: Genau. Aber sonst sind die (...) Das frage ich mich, ist der Peak bei 3 (...) haben
88 wir das irgendwas, wo bei 3 (...) Ah das macht wahrscheinlich die Red Bull aus
89 der Peak bei 3 ppm.

90 Person 1: Ja der ist zum Beispiel speziell für Red Bull, der kommt nur bei Red Bull vor.
91 Das ist wahrscheinlich einer der anderen Inhaltsstoffe, die nicht explizit
92 vermessen wurden. Aber die halt dennoch in Red Bull vorhanden sind. Und
93 ansonsten (...) wenn ich kurz gucke. Genau. Haben wir halt bei Coffein, etwa
94 bei 3 und 3,5 ppm ein Dublett, was relativ intensiv ist eigentlich. Und dass man
95 hier auch noch sieht (...) halt (...) oder?

96 Person 2: Hm?

97 Person 1: Sieht man nicht mehr, oder?

98 Person 2: Welches meinst du jetzt? Ja ich glaube das ist überlagert eben mit dem Taurin.
99 Was ich da glaube bei 8 ppm, dass kann man auf jeden Fall dem Coffein
100 zuordnen.

101 Person 1: Mhm. Das ist vermutlich dann irgendein aromatischer Ring von Coffein.

102 Person 2: Mhm, da, die Saccharose ist für mich das. Und der da. Und wahrscheinlich ein
103 Teil, da ist halt viel Überlagerun auch. Also ich glaub die kann man (...) die
104 Überlagerung ist zwischen (...) ich würde sagen alles was man zwischen 4 und
105 3,3 ppm sieht.

106 Testleitung: Ihr könnt ruhig dazuschreiben, was ihr denkt, dass sich hier überlagert.

107 Person 2: Voll.

108 Person 1: Ich schreib jetzt nur die Signale zwischen 4 und 3,3 ppm, eine Überlagerung
109 aus den diversen Inhaltsstoffen von Red Bull, den Signalen von Coffein als auch
110 den Signalen von Saccharose, Taurin und Vodka sind. Halt eine Mischung aus
111 jenen ganzen Signalen, die halt andere Signale wieder ergeben, wenn man ein
112 Gesamtspektrum aufnimmt und dadurch halt einfach die Zuordnung
113 erschweren.

114 Person 2: Ich find es voll gut, dass man in den Reinspektren die Red Bull und die Club
115 Mate so gut auseinanderhalten kann. Ich hätte nicht erwartet, dass die so klar
116 voneinander abzutrennen sind.

117 Testleitung: Wo seht ihr noch Schwierigkeiten bei der Unterscheidung? Oder ist vor allem
118 die Überlappung das Schwierige?

119 Person 1: Bei der Unterscheidung zwischen den einzelnen Spektren?

120 Testleitung: Und bei der Zuordnung.

121 Person 1: Bei der Zuordnung muss man sagen, man muss wissen auf was man schaut.
122 Wenn man jetzt von Anfang an sich nur auf diese Überlagerungen zwischen 4
123 und 3,3 ppm zum Beispiel fokussiert, wird man es schwer haben irgendwas
124 herauszulesen. Weil das einfach nicht viel Ausschluss gibt. Weil das könnte auf
125 Red Bull, auf Club Mate zutreffen, auf Taurin, auf Coffein (...) oder weil die
126 schauen alle recht ähnlich aus in diesen Bereich. Das heißt man müsste mal
127 sich die jeweiligen Einzelspektren anschauen und sich Gedanken darüber
128 machen, was ist so speziell an jenen, was nicht bei den anderen vorkommt. Und
129 anhand diesen Sachen kann man dann leichter die unbekannte Probe
130 analysieren.

131 Person 2: Ich frage mich gerade ob dieser Peak bei 3 ppm bei der unbekannten Probe
132 (...) Meiner Meinung nach wäre es interessant hier hereinzuzoomen und zu
133 gucken ob es ein einzelner Peak ist oder zu schauen ob es von der Struktur
134 dem Limettensaftpeak näher kommt. Und dadurch könnte man dann entweder
135 komplett ausschließen es ist definitiv kein Limettensaft drin, andererseits, und
136 das ist jetzt nur eine Vermutung, weiß ich nicht, ob im Red Bull nicht sowieso
137 Zitrat enthalten ist. Weiß ich nicht, welche Zutaten im Red Bull enthalten sind.
138 Aber es wäre vielleicht gut, wenn man sich den näher anschauen könnte. Weil
139 der halt so extrem nahe an dem dran ist.

140 Testleitung: Wenn ich euch jetzt sage, ihr schaut euch den Peak näher an und seht er sieht
141 gleich aus wie der Limettensaft. Was würde das für euer Ausschlussverfahren
142 heißen? Seit ihr dann immer noch bei Red Bull? Oder verändert das etwas?

143 Person 2: Hmm, ich glaube dann können wir immer noch die Club Mate ausschließen, weil
 144 der Coffein Peak auf der linken Seite fehlt.

145 Person 1: Genau (...) weil der Coffein Peak ist halt (...) ja (...) aber dann ist die Frage, ist
 146 in Club Mate Coffein enthalten oder nicht? Das wäre das andere. Und da geht
 147 das Spektrum nur bis 6 ppm und da müsste man halt weiter nach rechts, also
 148 ins Tieffeld oder?

149 Person 2: Ah also das du die Skala auch (...)

150 Person 1: Auf die 8 ppm erweiterst. Damit du siehst ob da überhaupt noch ein Coffein
 151 Peak kommt oder nicht.

152 Person 2: Stimmt ja.

153 Person 1: Weil so kann ich jetzt nicht sagen ob in Club Mate Coffein enthalten ist oder
 154 nicht. Und das macht das ganze schwerer. Ich würde trotzdem noch bei Vodka
 155 Red Bull bleiben, weil die Signale von Red Bull in meinen Augen ähnlicher zu
 156 dem Signal der unbekannten Probe sind als (...) die von Club Mate.

157 Testperson: An was machst du das fest?

158 Person 1: Ähm unter Umständen das dieser Peak bei 3 ppm und der Folgepeak bei
 159 3,2 ppm ziemlich ähnlich zu den Peaks bei Red Bull sind im Vergleich zu denen
 160 von Club Mate. Und gleichzeitig ist halt auch der Limettenpeak bei (...) was
 161 wollte ich sagen (...) ja also wie gesagt ich würde dennoch zu Vodka Red Bull
 162 tendieren als zu Vodka Mate. Weil einfach die Peaks von Red Bull bei 3 ppm,
 163 dann noch (...) der große, ist das der Wasser Peak?

164 Person 2: Ja genau!

165 Person 1: Bei 4,5 einfach viel ähnlicher zum Red Bull sind als zum Club Mate. Weil ich
 166 schätze mal der Wasseranteil vom Red Bull ist auch geringer? Oder wieso das
 167 Signal jetzt schmaler ist weiß ich nicht genau (...)

168 Person 2: Ich glaube das wurde nur näher ran gezoomt.

169 Person 1: Ja das ist näher ran gezoomt ok.

170 Person 2: Also bei der Club Mate ist näher ran gezoomt daher scheint es da breiter. Also
 171 von der Breite müsste das ziemlich näher sein.

172 Testleitung: Wie habt ihr den Wasserpeak festgemacht?

173 Person 1: Wissen.

174 Person 2: Wissen der NMR, 4,7.

175 Person 1: Ja, also es würde nichts an meiner Entscheidung ändern, es sei denn das der
 176 Club Mate wenn man das Spektrum bis 8 ppm erweitert auch ein Signal
 177 aufweist, welches dem Coffein zuzuordnen wäre. Dann würde ich sagen es
 178 könnte sowohl Vodka Red Bull als auch Vodka Mate sein. Dann eine Zuordnung
 179 zu machen wird halt relativ schwer, weil man sich die ganzen Signale

180 anschauen müsste zwischen 3 und 4 ppm und diese sind halt wirklich schwer
 181 zuzuordnen. Überhaupt wenn mehrere Substanzen zusammenkommen und
 182 sich die Intensitäten dadurch verändern.

183 Testleitung: Und wie habt ihr den Mojito ausgeschlossen?

184 Person 1: Den Mojito haben wir ausgeschlossen?

185 Person 2: Stimmt.

186 Person 1: Stimmt. Ich glaube, dass war einfach nur darüber, dass halt der Mojito (...)

187 Person 2: Aber wir haben auch ein Vergleich Spektrum (...) ah da ist ja eines für Rum!

188 Person 1: Das haben wir nicht gesehen. Aber ist ja wurscht. Aber das können wir auch
 189 ganz einfach machen (...) weil Vodka und Rum schauen gleich aus, Daumen
 190 mal Pi, weil beides Alkohol ist. Dadurch das die beiden gleich ausschauen
 191 müsste man nicht mal Vodka und Rum betrachten, sondern die restlichen
 192 Inhaltsstoffe. Das wäre bei dem einen Red Bull, bei dem anderen Zucker,
 193 Limette und Minze. Und hier haben wir wie gesagt keinen Coffein Peak. Also
 194 bei der Probe haben wir einen Coffein Peak und hier sehen wir bei Rum keinen
 195 Coffein Peak, bei Sacharose haben wir auch keine Coffein Peak, wird halt nicht
 196 vorkommen, weil Zucker hat kein Coffein. Limettensaft hat auch kein Coffein.
 197 Also eigentlich könnte man alles ausschließen. Also alle Inhaltsstoffe
 198 ausschließen und anhand des Probenspektrums könnte man schon sagen,
 199 dass wir vermutlich kein Mojito sein, weil wir haben hier keinen Coffein Peak.
 200 Ich bezieh mich sehr auf den Coffein Peak muss ich sagen (...)

201 Person 2: Ja. Ich hab auch eine Frage. Hat Club Mate kein Coffein drin?

202 Person 1: Das weiß ich nicht.

Person 1 nimmt Handy zur Hand und googelt.

203 Person 2: Bekommen die Schüler eine Inhaltsstoffliste von diesen Getränken?

204 Testleitung: Sie haben die Getränke als Materialien dort stehen. Sprich sie könnten
 205 hingehen und schauen was steht hinten oben.

206 Person 2: Ok. Sehr gut.

207 Person 1: Ja also Club Mate hat Coffein.

208 Person 2: Ok. Vielleicht aber in so einem geringe Anteil, dass es in dem Spektrum nicht
 209 aufscheinen.

210 Person 1: Naja 20mg.

211 Person 2: Pro?

212 Person 1: 100ml. Red Bull hat 32, dass ist nicht so viel mehr. Ja also es wäre
 213 empfehlenswert auf diesen Peak bei 3 ppm rein zuzoomen und zu schauen ob
 214 es ein Singulett oder ein Dublett ist. Weil da gibt schon wichtige Aufschlüsse.
 215 Und gleichzeitig bei Club Mate das Spektrum zu erweitern bis auf 9 ppm damit
 216 man sieht ist da ein Coffein Peak enthalten oder nicht

217 Testleitung: Seht ihr sonst noch wo Schwierigkeiten?

218 Person 2: Ich wundere mich ehrlich gesagt, und auch nur weil ich nicht genau weiß was
 219 das ist... diese drei Peaks, dieses Triplett zwischen 0 und -0,5 ppm. Weißt du
 220 was das (...) oh stimmt, das gehört zum Alkohol. Ok dann passt es. Sonst
 221 eigentlich nicht.

222 Person 1: Schwierig ist halt, du musst den Schülern beibringen, dass sie (...) halt so
 223 erklären, dass sie wissen auf was sie dabei schauen müssen. Weil als Person,
 224 die noch nie was damit zu tun hatte, sieht man sich das an und es sagt einem
 225 nicht viel. Zumindest ist es mir so gegangen als ich das erste Mal ein Spektrum
 226 in der Hand hatte.

227 Person 2: Mhm. Ich würde mich fast sogar aus dem Fenster lehnen und sagen 3,5 können
 228 wir sogar unterscheiden, dass da das Taurin in der Überlagerung quasi, also
 229 wenn ich mich jetzt festlegen müsste, würde ich sagen 3,5 ppm würde ich
 230 zuordnen Taurin, links davon 4 ppm diese zwei schärferen Peaks sollte das
 231 Coffein auch sein und sonst wie gehabt sollte die Saccharose auch da drinnen
 232 sein. Also wenn es jetzt darum geht, dass man das wirklich festnageln möchte,
 233 dass man sagt die Peak gehören zu der Komponente.

234 Testleitung: Habt ihr noch Tipps, die ihr speziell geben würdet zum Interpretieren? Also
 235 wenn ihr so im Kopf zwei bis drei Tipps formulieren würdet, wie würden die
 236 aussehen?

237 Person 1: Beginnt mit den Einzelspektren. Sucht die speziellen Signale raus, die nur in
 238 jeden einzelnen Spektrum vorkommt, weil in jeden Spektrum gibt es einfach ein
 239 Signal, welches was halt spezifisch ist. Wo du dir denkst das kommt nicht in den
 240 anderen vor.

241 Person 2: Mhm.

242 Person 1: Und dann vergleicht jene Signale einfach nur mit der unbekannten Probe. Und
 243 wenn ihr bei etwas nicht sicher seid, macht es über das Ausschlussprinzip,
 244 indem ihr euch einfach anschaut, was die jeweiligen Inhaltsstoffe in den
 245 unterschiedlichen Cocktails sind. Würdest du mir zustimmen?

246 Person 2: Ja. Ja ich würde dir zustimmen.

247 Testleitung: Wie würdest es du formulieren?

248 Person 2: Genauso. Ich glaube es ist am einfachsten. Wie das ist so wie ein Wald an
 249 Peaks. Und da ist es schon einfacher, wenn man sich die Komponenten
 250 anschaut und dann guck was passt denn übereinander (...) oder wie Person 1
 251 es gemacht hat, mit dem Ausschlussprinzip, was habe ich denn sicher nicht
 252 drinnen. Und so. Und dann erst später dann die charakteristischen Peaks
 253 raussucht. Voll. Ich glaube das macht am meisten Sinn.

- 254 Testleitung: Möchtet ihr noch etwas ergänzen?
- 255 Person 2: Nein.
- 256 Person 1: Ich glaube nicht.

11.2. Vortragsfolien Input NMR-Spektroskopie



NMR for Food Profiling

Fachlicher Input

universität wien

ELKE AUSTRIA

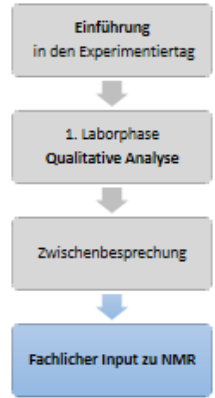
1



Status Quo

- ✓ Eingrenzung der Cocktailauswahl in 1. Laborphase:
 - Farbausschluss
 - Qualitative Analyse einzelner Inhaltsstoffe
- ✓ Auswahl wurde auf 2-3 Cocktails eingeschränkt
 - Diese Cocktails können mit qualitativen Methoden nicht ausreichend unterschieden werden

→ Neue Analysemethode wird benötigt!



```
graph TD; A[Einführung in den Experimentiertag] --> B[1. Laborphase Qualitative Analyse]; B --> C[Zwischenbesprechung]; C --> D[Fachlicher Input zu NMR];
```

2



Analyse von elektromagnetischer Strahlung

universität wien

ELKE AUSTRIA

3

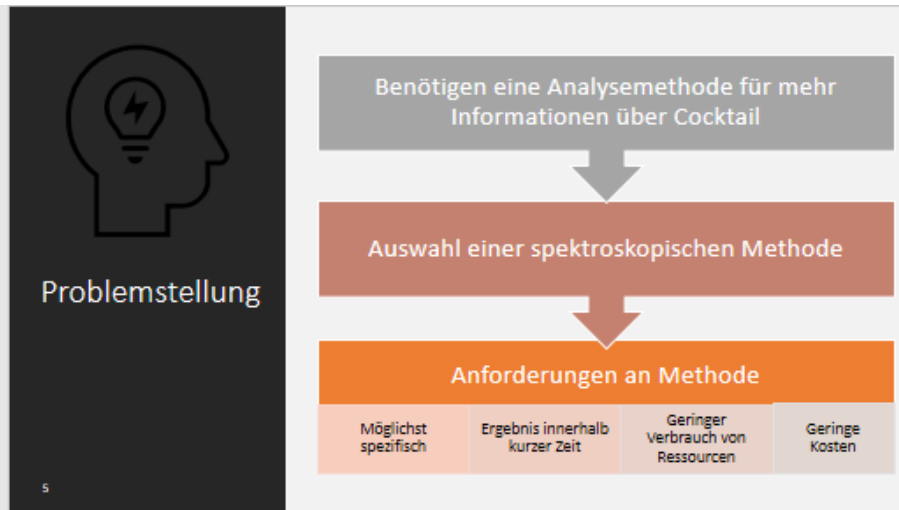


Basiswissen

- ✓ Es existieren unterschiedliche elektromagnetische Strahlungen (*Infrarot, UV-Strahlung, Röntgenstrahlung etc.*)
- ✓ Moleküle emittieren bzw. absorbieren elektromagnetische Strahlung
- ✓ Absorption bzw. Emission ist physikalisch messbar und spezifisch für eine Verbindung

→ Ermöglicht Informationsgewinn über eine Verbindung
(Zusammensetzung, Struktur, etc.) 🍷

4



5

Unterschiedliche spektroskopische Methoden

Elektromagnetisches Spektrum	Wellenlänge	Art der Anregung	Name der spektroskopischen Methode
Radiowellen	100-1m	Änderung des Kernspins	NMR-Spektroskopie
Infrarotstrahlung	1mm-780nm	Änderung des Schwingungszustandes	IR-Spektroskopie
Sichtbares Licht, UV-Strahlung	780nm-10nm	Änderung des Zustandes der äußeren Elektronen	UV/VIS-Spektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie
Röntgenstrahlung	10nm-100pm	Änderung des Zustandes der Rumpfelektronen	Röntgenspektroskopie (XRS)

6



Warum NMR-Spektroskopie?

- Bestimmung von unbekannten Molekülen
- Strukturaufklärung in kürzester Zeit
- Viele Informationen durch eine einzelne Methode
- Medizin: dreidimensionale Aufnahmen des Körpers (MRI)

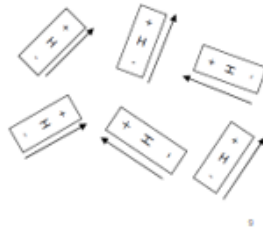
7

Messprinzip der NMR-Spektroskopie

8

Vorstellung „Atomkerne als Stabmagneten“

- Atomkerne bestehen aus Protonen und Neutronen.
- Atomkerne besitzen einen Drehimpuls (Kernspin) und drehen sich um die eigene Achse.
- Durch die elektrische Ladung wird bei (manchen) Atomkernen ein Magnetfeld erzeugt.
- Ausrichtung des Magnetfeldes ist beliebig.



9

Welche Atomkerne sind magnetisch aktiv?

Atomkern	NMR aktiv	Natürliche Häufigkeit in %
^1H	ja	99,985
^2H (Deuterium)	ja	0,015
^3H (Tritium)	ja	0
^{12}C	nein	98,89
^{13}C	ja	1,11
^{16}O	nein	99,759
^{31}P	ja	100

Nicht aktive Kerne haben eine gerade Massenzahl und gerader Ordnungszahl!

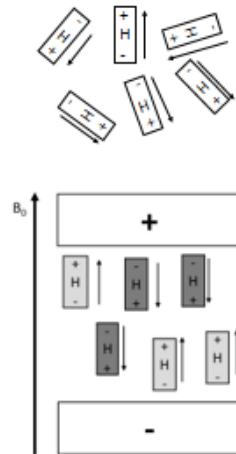
Quelle: <https://docplayer.org/18845399-Grundlagen-der-nmr-spektroskopie.html> (02.11.21)

10

10

Atomkern im Magnetfeld

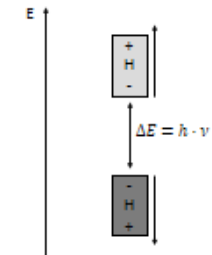
- Vorstellung der Atomkerne als Stabmagneten – Ausrichtung ist beliebig
 - Anlegung eines äußeren Magnetfeldes
- Kerne orientieren sich **mit** oder **gegen** das Magnetfeld B_0



11

Atomkerne im Magnetfeld

- Unterschiedliche Orientierungen haben unterschiedliche Energieniveaus
- Orientierungswechsel erfordert Energie

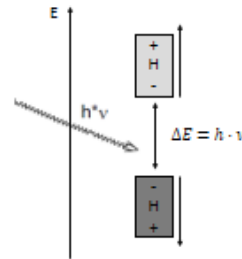


12

12

Absorption in der NMR

- Energieunterschied ΔE kann durch Zugabe von elektromagnetischer Strahlung überwunden werden
- Eingestrahlte Energie muss genau die Resonanz des Atomkernes treffen



13

13

Exkurs Resonanz

- Erzwungene Schwingung eines Körpers
- Ist die Frequenz des Erregers gleich der Eigenfrequenz des schwingenden Körpers, spricht man von Resonanz
- Im Resonanzfall ist die Amplitude des schwingenden Körpers maximal
- Beispiel:
 - Stimmgabel

14

14

Resonanzkatastrophe – Tacoma Bridge (USA)



15

15

Resonanzbedingung für NMR

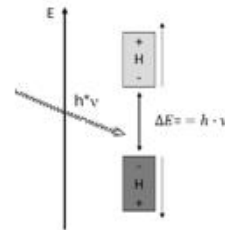
- Für den Übergang auf ein höheres Energieniveau muss $\Delta E = h \cdot \nu$ überwunden werden
- Kommt es zu einer Resonanz (= Spin-Umkehrung), wird Energie absorbiert
- Absorption kann gemessen werden
- Nach der Anregung fallen die Kerne in ihren energieärmeren Zustand zurück und geben dabei Wärme ab

16

16

Nuklear Magnetic Resonance Spectroscopy

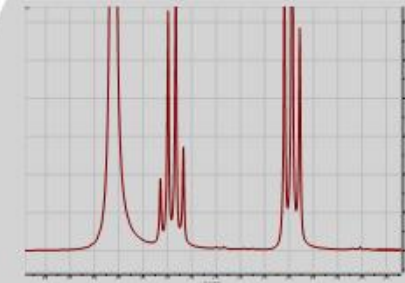
- Atomkern (Nuklear) bzw. das Molekül wird in ein Magnetfeld gebracht
- Energie wird zugeführt (elektromagnetische Wellen im Bereich der *Radiofrequenz*), sodass die Resonanz des Atomkerns angeregt wird.
- Absorbierte Energie wird gemessen und verstärkt
- Signal wird durch Computer ausgewertete, mathematisch umgewandelt
- Ein NMR-Spektrum wird erzeugt



17



Beispiel für ein NMR-Spektrum



18

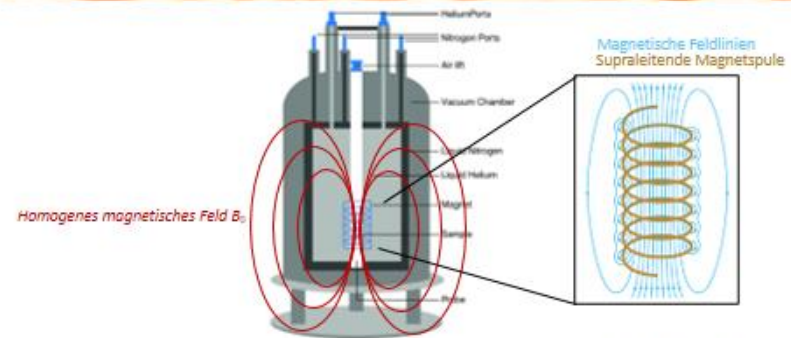
Spektrometer

AV NEO 500



19

Aufbau eines Spektrometers



Quelle: Kurzbach (2020) 30

20



Interpretation von ^1H -NMR-Spektren

21



Basiswissen

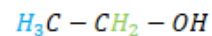
- ✓ NMR-Spektrum setzt sich aus den Signalen der jeweiligen Atome zusammen
- ✓ ^1H -Spektrum zeigt nur die Wasserstoff-Atome an
- ✓ Peaks haben eine gewisse Lage (auf x-Achse), bestimmte Linienbreite/-höhe und können gekoppelt vorliegen.

22

22

Analyse eines Spektrums

Ethanol



- Drei unterschiedliche Umgebungen für Wasserstoff (1,2,3) → drei Signale
- Wo liegt welches Signal im Spektrum?

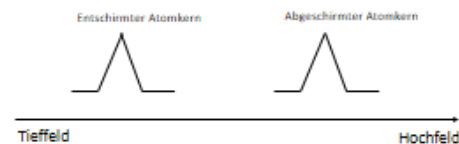
23

23

Chemische Verschiebung

- Die chemische Umgebung der ^1H -Atomkerne beeinflusst die Lage der gemessenen Signale
- Die Elektronendichte der benachbarten Kerne beeinflusst das Magnetfeld des Spektrometers
- Verschiebung der Peaks nach rechts oder links

Hohe Elektronendichte → Abschirmung → Verschiebung nach rechts
Niedrige Elektronendichte → Entschirmung → Verschiebung nach links



24

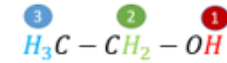
24

Beschriftung der x-Achse

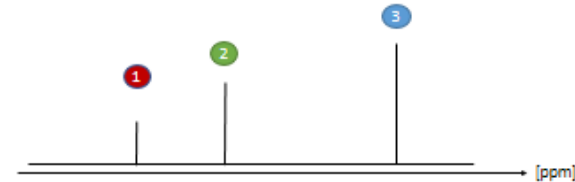
- Jedes Signal zu einer bestimmten Resonanz
- Vereinfachung:
 - Tetramethylsilan TMS als Standard
 - Signal wird mit 0,00 definiert
 - Signale der gemessenen Proben werden als Abweichung vom Standard angegeben
 - Angabe in ppm (parts per million)
 - 1ppm → Resonanzfrequenz ist ein Millionstel größer als TMS

27

Intensität

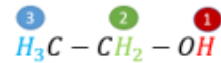


- Höhe der Signale ist unterschiedlich
- Bei Ethanol gibt es 3 Arten von unterschiedlich gebundenen Wasserstoffatomen
- Bei (3) sind drei H-Atome an einen Kohlenstoff gebunden, bei (2) zwei H-Atome und bei (1) nur ein H-Atom
- Im ^1H -Spektrum ist daher der Peak von (3) am höchsten

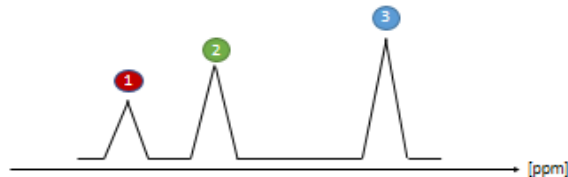


28

Intensität

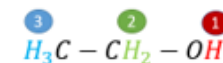


- Exakte, scharfe Signale sind nicht messbar → man erhält einen glockenförmigen Peak
- Anzahl der beteiligten Atome kann durch die Fläche unter dem Signal berechnet werden



29

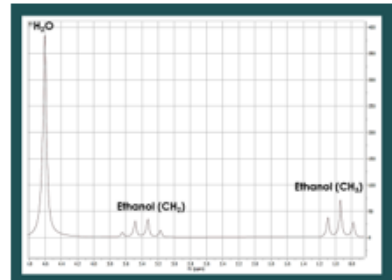
Spin-Spin-Kopplung



- Atomkerne der H-Atome beeinflussen sich gegenseitig
- Jeder Kern erzeugt selbst ein kleines Magnetfeld → Resonanz des benachbarten Kerns wird beeinflusst → Aufspaltung des Signales

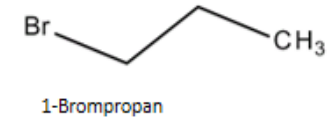
Anzahl der Nachbarn	Pascal'sches Dreieck	Aufspaltung
0	1	Singulett - 1 Signal
1	1 1	Duplett - 2 Signale
2	1 2 1	Triplet - 3 Signale
3	1 3 3 1	Quartett - 4 Signale
4	1 4 6 4 1	Quintett - 5 Signale
5	1 5 10 10 5 1	Sextett - 6 Signale

30

$$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$$


- 31

Übungsbeispiele

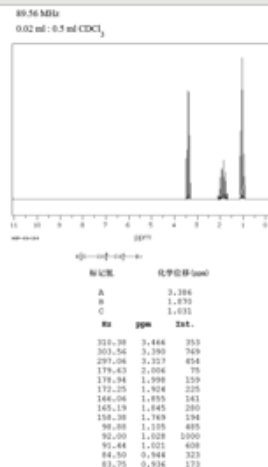


Probiert nun selbst das ^1H -NMR Spektrum von **1-Brompropan** vorherzusagen!

32

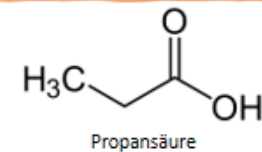
Lösung

Propan
 $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{Br}$

Quelle: https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_100-94-5_1HNMR.htm 33

Übungsbeispiele



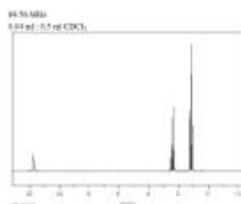
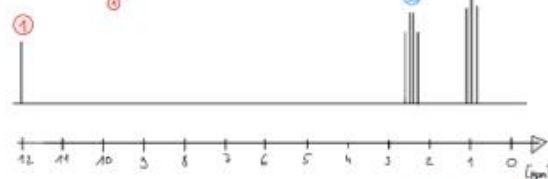
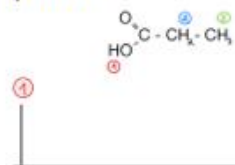
Probiert nun selbst das ^1H -NMR Spektrum von Propansäure vorherzusagen!

34

34

Lösung

Propansäure



Atom	ppm	Int.
1	165.72	1.00
2	35.00	1.00
3	18.15	1.00

Quelle: https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_79-09-4_1H13C15NMR.htm

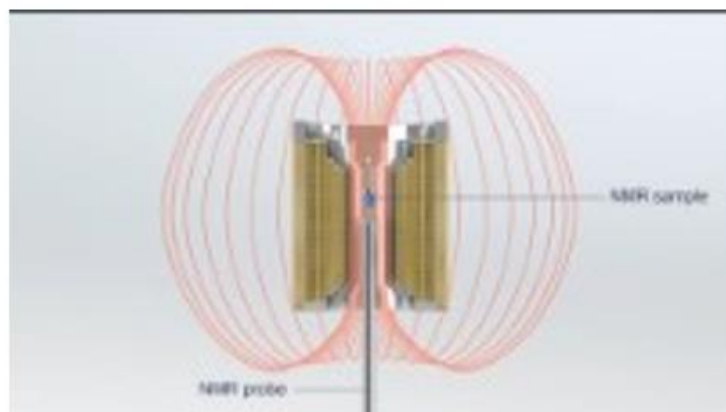
35

Zusammenfassung

universität
wien

AUSTRIA
ELKE

36



37

37

Literatur

Bruice, P. Y., & Reiser, O. (2011). Organische Chemie - Studieren kompakt (5., aktualisierte Aufl.). Pearson Studium.
Lehmann, Thomas (2016). 1H-NMR-Spektroskopie. Skript zur organischen Grundausbildung im Rahmen des Bachelorstudiengangs Chemie an der Freien Universität Berlin.
https://www.bcp.fu-berlin.de/chemie/chemie/studium/ocpraktikum/_Unterlagen_Spektroskopie/nmr.pdf (20.12.21)

Abbildungen:

Grundlagen der NMR (NMR aktive Kerne sowie Stabmagneten): https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/pharmaz_und_med_chemie/studieren/semester/8semester/nmrtischvorlage.pdf (02.11.21)

Aufbau Spektrometer: Kurzbach, Dennis (2020). Paramagnetism in Spectroscopy: NMR, Hyperpolarization and EPR. [Vorlesungsunterlagen]

¹H NMR 1-Bromopropan: https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_106-94-5_1H13C15NMR.htm (26.12.21)

¹H-NMR Propansäure: https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_79-09-4_1H13C15NMR.htm (26.12.21)

38

38

11.3. Beobachtungsbogen Betreuer*innen

 universität wien Schülerlabor ELKE^{AUSTRIA} „NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment“ Fragebogen an die teilnehmenden Schülerinnen und Schüler	 universität wien Schülerlabor ELKE^{AUSTRIA} „NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment“ Fragebogen an die teilnehmenden Schülerinnen und Schüler
Teilnehmende Beobachtung Liebe*r Betreuer*in! Du hast heute den Experimentiertag „NMR for Food Profiling – Long Drink, Short Experiment“ (Abkürzung: „NMR“) betreut. Im Folgenden würden wir gerne erfahren, wie dir der Labortag gefallen hat, was dir aufgefallen ist und was verändert werden sollte. Das Antwortformat ist offen, die Überschriften sollen dir aber beim Ausfüllen des Fragebogens helfen. Organisatorischer Ablauf Notizen (Was lief gut? Wo gab es Probleme? ...) 1. Laborphase: 2. Laborphase:	Besonderheiten bei der Durchführung der Experimente Besonderheiten bei der Bearbeitung des Arbeitsmaterials Sonstiges Danke für deine Hilfe! Deine Antworten helfen uns, den Labortag weiterzuentwickeln und motivierend zu gestalten.

11.4. Cocktailkarte



11.5. Laborbuch

Im Anschluss folgt das Laborbuch in der Betreuer*innenversion.

LABORBUCH – Betreuer*innen

**NMR FOR FOOD PROFILING –
LONG DRINK, SHORT EXPERIMENT**

Universität Wien
ELKE AUSTRIA



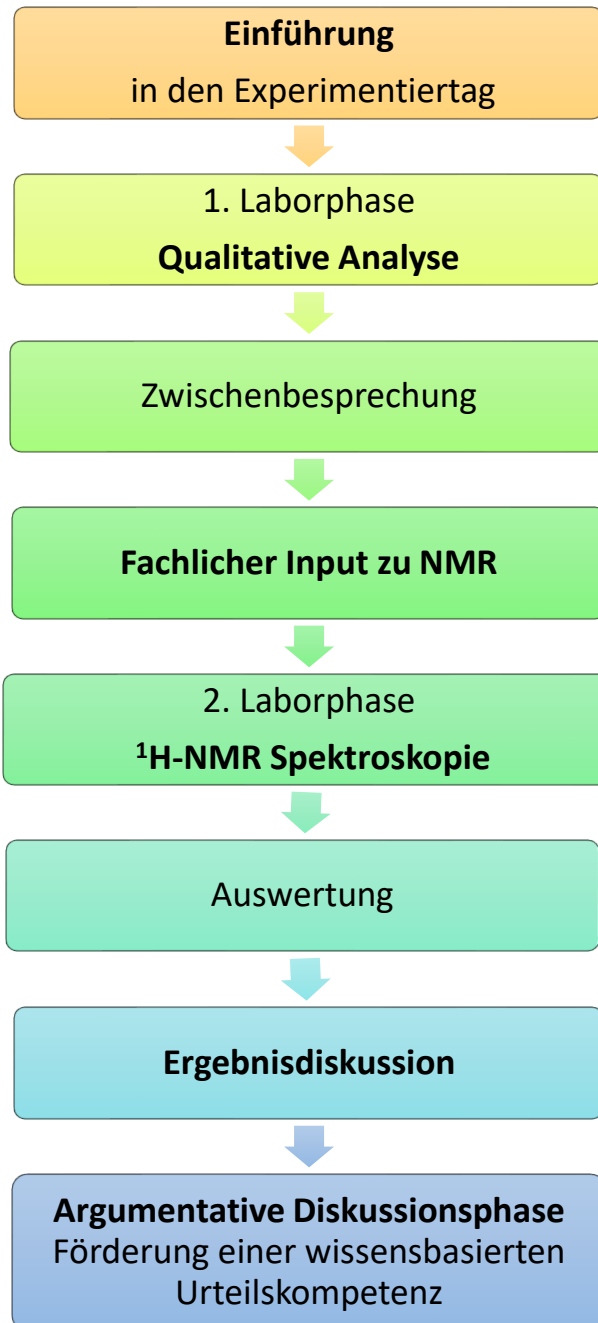


Inhalt

Überblick Tagesablauf.....	2
Fallgeschichte.....	3
Cocktailbuch des Gastgebers	4
Sicherheitshinweise für alle Laborphasen.....	5
Laborphase I – Qualitative Analyse	5
Flussdiagramm	7
Checkliste für Laborphase	9
Zusätzliche Notizen für Zwischenbesprechung	10
Fehling Nachweis für Einfachzucker	11
pH-Wert Bestimmung.....	12
Ethanol Nachweis mit Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung	13
Stärke Nachweis mit Iod-Kaliumiodid	14
Ethanol Nachweis mittels Brennbarkeit.....	15
Denaturierung von Proteinen.....	16
Zwischenbesprechung.....	17
Fachlicher Input – NMR Spektroskopie	18
Laborphase II – ^1H -NMR Spektroskopie.....	25
Probenvorbereitung NMR Spektroskopie.....	26
^1H -NMR Spektren	27
Ergebnisdiskussion	30
Literaturverzeichnis	31



Überblick Tagesablauf





Fallgeschichte

Du bist als Chemiestudent*in auf einer Student*innenparty eingeladen. Das Highlight der Party ist ein hausgemachter Cocktail des Gastgebers. Auf die Frage, welche Zutaten für den geheimnisvollen Long Drink verwendet worden sind, erhält niemand eine Antwort. Auch bist du dir nicht sicher, ob der Cocktail überhaupt Alkohol enthält, da der süße Geschmack im Vordergrund steht. Der Gastgeber sagt nur: „Der Inhalt ist geheim! Ich kann euch versprechen, dass ihr damit einen phänomenalen Abend haben werdet!“

Diese Aussage sollte sich bestätigen. Da du als angehende*r Chemiker*in jedoch unbedingt wissen willst, wie dieser geheimnisvolle Long Drink zubereitet wird, nimmst du eine kleine Probe mit. Als du dich gerade von allen verabschiedet hast und auf dem Weg nach draußen bist, kommt dir ein Gedanke. Schnell verschwindest du in die Küche und wirfst einen Blick auf die Kochbücher im Regal. Da! Voll gespannter Erwartung nimmst du eine Mappe mit dem Titel „Mein Cocktailbuch“ in die Hand. Schnell knipst du Fotos vom Inhaltsverzeichnis und stellst die Mappe zurück ins Regal.

Dein Sherlock-Holmes Instinkt ist erwacht und mit einem breiten Grinsen im Gesicht verlässt du die Party. Im Gedanken bist du schon beim nächsten Tag im Labor...



Cocktailbuch des Gastgebers



Cocktailkarte

- **Mojito** (Rum, Soda, Zucker, Limette, Minzesirup)
- **Whiskey Sour** (Whiskey, Zitronensaft, Zuckersirup, Eiweiß)
- **Red Bull zuckerfrei** (Red Bull Energy Drink zuckerfrei)
- **Vodka Wellness** (Vodka, Limettensaft, Soda)
- **Cuba Libre** (Rum, Cola, Limettensaft)
- **Piña Colada** (Rum, Kokosmilch, Ananassaft, Sahne)
- **Swimming Pool** (Vodka, Blue Curacao, Ananassaft, Sahne, Kokosmilch)
- **Vodka Mate** (Vodka, Club Mate, Limettensaft)
- **Vodka Red Bull** (Vodka, Red Bull Energy Drink)
- **Bloody Mary** (Vodka, Tomatensaft, Zitronensaft, Tabasco)
- **Ginger Ale Mix** (Ginger Ale, Limettensaft)



Sicherheitshinweise für alle Laborphasen



- Schutzbrille tragen!



- Haare zusammenbinden!



- Im Labor nicht Essen oder Trinken!



- Zuerst lesen, dann experimentieren!



- Plätze nach den Versuchen aufräumen! Hinweise zur Entsorgung beachten!

Laborphase I – Qualitative Analyse

In dieser Laborphase sollt ihr mit Hilfe von qualitativen Nachweisreaktionen einige Inhaltsstoffe der unbekannten Cocktail-Probe bestimmen. Durch das Cocktailbuch erhaltet ihr einen Überblick über die Zusammensetzung der einzelnen Getränke. Welche Nachweisreaktionen ihr durchführt, könnt ihr selbst entscheiden. Manche Cocktails lassen sich eventuell auch auf eine andere Art ausschließen. Am Ende dieser Laborphase solltet ihr in der Lage sein, einige Cocktails auszuschließen.

**Lernziel:**

Du kannst mit Hilfe von chemischen Nachweisreaktionen bestimmte Cocktails auf Grund ihrer Inhaltsstoffe ausschließen und dies wissenschaftlich begründen.



Arbeitsaufträge Laborphase I

- Vergleiche die unbekannte Cocktail-Probe mit den Rezepten (S.4) und stelle eine Hypothese auf, um welche(n) Cocktail(s) es sich handeln könnte.
- Sieh dir die „Liste der Nachweisreaktionen“ (S.6 unten) an.
- Plane passende Nachweisreaktionen mit Hilfe dieser Liste, um deine Hypothese zu belegen. Bei der Strukturierung hilft dir das Flussdiagramm auf S.7.
- Führe die Nachweisexperimente durch und notiere deine Beobachtung in der Checkliste auf S.9.
- Markiere in der Checkliste, welche Cocktails du ausschließen kannst.
- Bereite dich für eine Diskussion der Zwischenergebnisse vor.



Hypothese

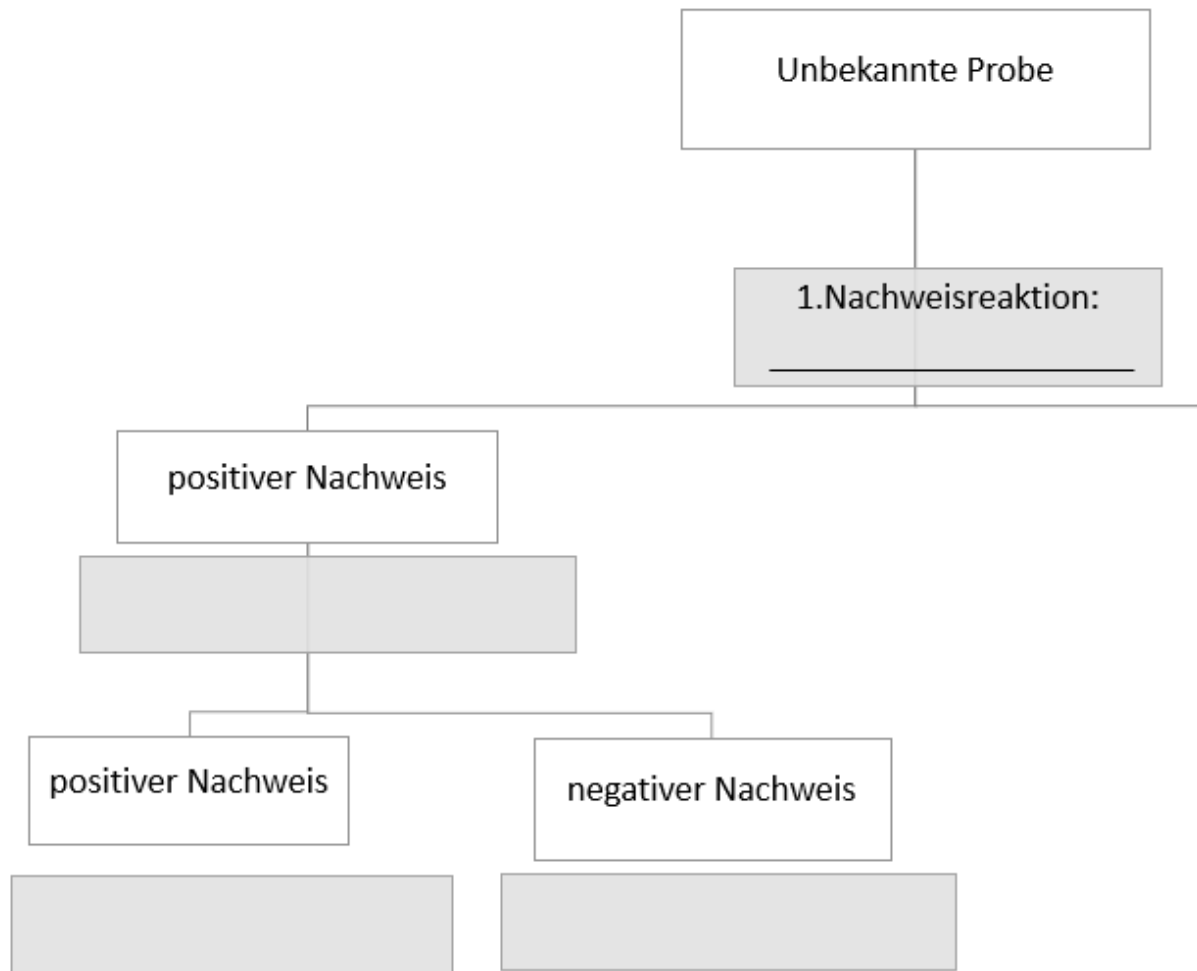


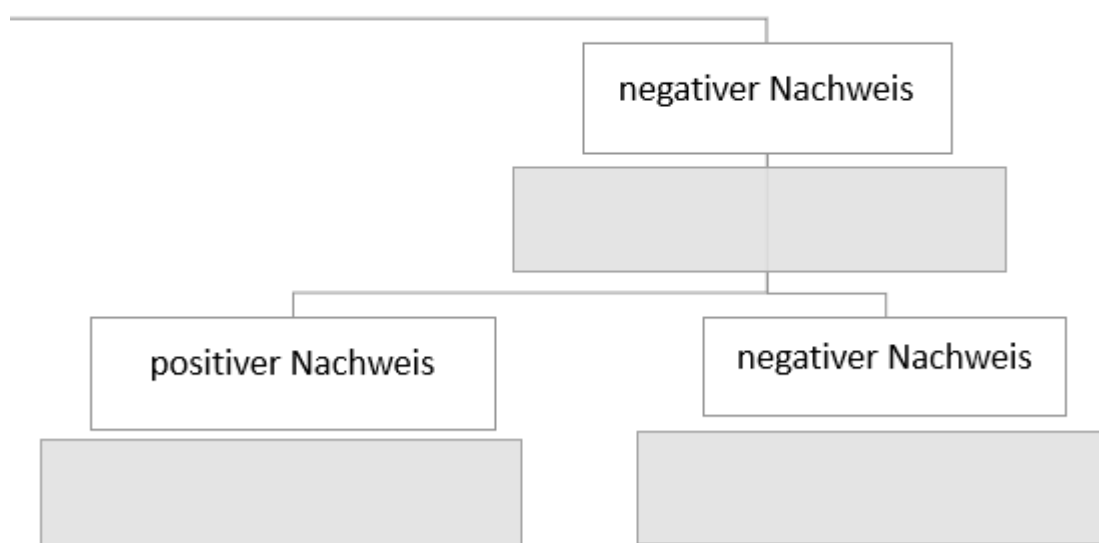
Liste der möglichen Nachweisreaktionen

Nachweisreaktion mit	Verwendung
Fehling Nachweis	Nachweis für Aldehyde (Einfachzucker)
Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung	Nachweis für Alkohole
Brennprobe	Nachweis für Alkohole
Denaturierung	Nachweis für Proteine
pH- Papier	Bestimmung des pH-Wertes
Iod-Kaliumiodid	Nachweis für Stärke



Flussdiagramm für die Planung von Laborphase I







Checkliste für Laborphase I

Name des Cocktails	✗ (falls ausgeschlossen)	Folgende Beobachtungen führen zum Ausschluss dieses Cocktails
Mojito		
Whiskey Sour	✗	Ausschluss mittels Eiweiß-Nachweis
Red Bull zuckerfrei	✗	Ausschluss durch Fehling Probe oder Ethanol Nachweis
Vodka Wellness	✗	Ausschluss durch Fehling Probe
Cuba Libre	✗	Farbausschluss
Pina Colada	✗	Ausschluss durch Farbe ODER Eiweiß Nachweis
Swimming Pool	✗	Farbausschluss
Vodka Mate		
Vodka Red Bull		
Bloody Mary	✗	Farbausschluss
Ginger Ale Mix	✗	Ausschluss durch Ethanol Nachweis



Zusätzliche Notizen für Zwischenbesprechung

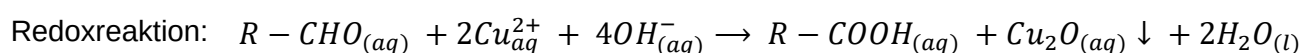
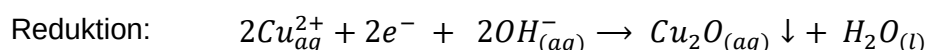
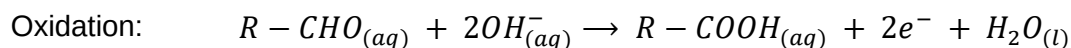
Diese Seite soll für zusätzliche Beobachtungen oder aufgetretene Probleme während der qualitativen Laborphase genutzt werden. Bei der anschließenden Zwischenbesprechung sollst du mit Hilfe der Checklist sowie deinen Notizen dein Ausschlussverfahren wissenschaftlich begründen können.

[illegible]



Fehling Nachweis für Einfachzucker

Hintergrundwissen: Beim Fehling Reagenz handelt es sich um eine 1:1 Mischung aus Fehling I (Kupfersulfatlösung) und Fehling II (Natronlauge mit Kalium-Natrium-Tartat-Lösung). Dieses Reagenz reagiert mit einer Aldehyde-Gruppe und verfärbt sich von dunkelblau zu orange-rot.



Materialien: Reagenzgläser, Stopfen, Reagenzglasständer, Spatel, Becherglas

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Fehling I (Kupfersulfatlösung)	 Gefahr	H: 318, 410 P: 273, 280, 305+351+338, 310, 391
Fehling II (NaOH mit K-N-Tartat-Lösung)	 Gefahr	H: 290, 314, 318 P: 280, 303+361+353, 305+351+338, 310
Glucose	-	-
Unbekannte Probe	-	-

Durchführung:

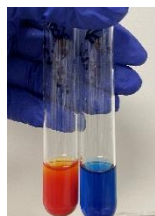
1. Berechne in 2 Reagenzgläser jeweils eine 1:1 Mischung (je 1mL) aus Fehling I und Fehling II zu. Vermische die Inhalte durch Schütteln des Reagenzglases.
2. Gib ca. 1mL Wasser in ein weiteres Reagenzglas. Füge nun so viel Glucose hinzu, bis sich diese nicht mehr im Wasser löst (gesättigte Lösung).
3. Berechne ein Becherglas mit heißem Leitungswasser vor.
4. Gib 1mL der gesättigten Glucose-Lösung als Blindprobe zu dem vorbereiteten Fehling-Reagenz. Wiederhole diesen Vorgang mit dem zweiten Reagenz und deiner unbekannten Probe. (Beschriftung nicht vergessen!)
5. Gibt beide Reagenzgläser in das heiße Wasserbad und notiere deine Beobachtungen.

Entsorgung: Die Lösungen werden im Behälter für Schwermetalle entsorgt.

Beobachtung:

Nachweis positiv (rote Verfärbung).

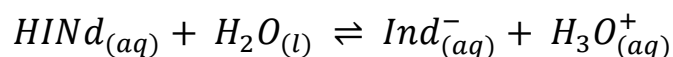
Der Longdrink enthält einen Einfachzucker.





pH-Wert Bestimmung

Hintergrundwissen: Das pH-Papier ist mit einem Universalindikator versehen und zeigt an, ob eine Lösung sauer, basisch oder neutral ist.



Materialien: Pipette, weißes Papier

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
pH-Papier, pH-Teststreifen	-	-
Unbekannte Probe	-	-
Blindprobe (Materialtisch)	-	-

Durchführung:

1. Gib einige Tropfen deiner Probe auf den pH-Teststreifen auf dem weißen Papier.
2. Vergleiche die Farbe mit der pH-Skala der Teststreifen.
3. Verfahre analog mit deinen Blindproben bzw. Vergleichssubstanzen.

Entsorgung: Die pH-Teststreifen werden im Chemikalienmüll entsorgt.

Beobachtung:

*Schüler*innen sollen feststellen, dass das pH-Wert Papier für einen sicheren Ausschluss zu ungenau ist und sie mit diesem den Cocktail nicht mit Sicherheit bestimmen können.*



pH (unbekannte Probe)=4, pH(Cola)=3, pH(Red Bull)=4, pH(Limetten- und Zitronensaft)=3, pH(Club Mate)= 3-4



Ethanol Nachweis mit Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung

Hintergrundwissen: Bei dieser Nachweisreaktion reagiert das Ammoniumcer(IV)nitrat mit Ethanol zu einem orange-roten Farbkomplex. Dieser Nachweis ist nicht spezifisch für Ethanol, da er auch mit anderen Alkoholen positiv verläuft.

Materialien: Pipette, Reagenzgläser, Handschuhe

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Ammoniumcer(IV)nitrat in 10-15%iger HNO_3	 Gefahr	H: 272, 290, 302, 314, 317, 410 P: 210, 260, 273, 280, 303+361+353, 305+351+338
Unbekannte Probe	-	-
Trinkalkohol (Vodka, Rum)	-	-

Durchführung:

1. Gib 1mL der unbekannten Probe in ein Reagenzglas.
2. Berechne 1mL der Blindproben (H_2O sowie ein Trinkalkohol) in zwei weitere Reagenzgläser vor.
3. Gib nun einige Tropfen der Ammoniumcer(IV)nitrat-Lösung hinzu. Handschuhe verwenden!
4. Beobachte, ob du einen Farbumschlag feststellen kannst.

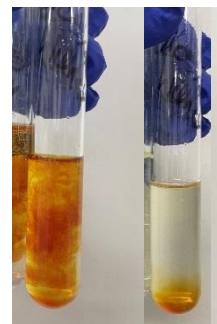
Entsorgung: Die mit Ammoniumcer(IV)nitrat versetzte Lösung wird im Behälter für Schwermetalle entsorgt.

Beobachtung:

Nachweis positiv, oranger Niederschlag (1-Bild)

beim Hinzutropfen der Cerammoniumlösung.

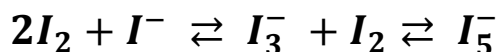
Niederschlag löst sich rasch auf (siehe 2. Bild)





Stärke Nachweis mit Iod-Kaliumiodid

Hintergrundwissen: In der Iod-Kaliumiodid-Lösung lösen sich das elementare Iod durch die Anwesenheit des Kaliumiodid. Bei der Reaktion mit Stärke lagern sich die entstandenen Iodid-Ionen in der Amylosehelix der Stärke ein. Dies erkennt man durch eine blau bis schwarze Verfärbung.



Materialien: Pipette, Reagenzglas, Urglas, Messer

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Iod-Kaliumiodid-Lösung	 Achtung	H: 373 P: 260, 314
Unbekannte Probe	-	-
Kartoffel	-	-

Durchführung:

1. Gib 1mL der unbekannten Probe in ein Reagenzglas.
2. Schneide ein kleines Stück der Kartoffel ab und lege es auf das Urglas.
3. Gib einige Tropfen der Iod-Kaliumiodid-Lösung zu deiner unbekannten Probe und auf die Kartoffelscheibe.
4. Notiere deine Beobachtungen.

Entsorgung: Die unbekannte Probe mit der Iod-Kaliumiodid-Lösung wird stark verdünnt bei laufendem Wasser im Abfluss entsorgt.

Beobachtung:

Keiner der Cocktails enthält Stärke, der Nachweis bringt keine neuen Erkenntnisse.



Ethanol Nachweis mittels Brennbarkeit

Hintergrundwissen: Ethanol ist ein einwertiger Alkohol und liegt bei Raumtemperatur als eine farblose, entflammbare Flüssigkeit vor. Beim Trinkalkohol handelt es sich um ein Ethanol-Wasser-Gemisch, welches auf Grund der niedrigen Konzentration oft nicht entflammbar ist. Eine Ausnahme stellen hoch konzentrierte Trinkalkohole wie Schnäpse dar. Verdampft man niedrig konzentrierte Alkohole, ist die Ethanol-Konzentration im Dampfgemisch größer, da der Siedepunkt von Ethanol bei ca. 78°C liegt. Ist Ethanol in der unbekannten Cocktailprobe enthalten, ist der Dampf entflammbar.

Materialien: Erlenmeyerkolben, Siedesteine, Heizplatte, Glasrohr mit Stopfen, Pipette, Feuerzeug, Holzspieß, Becherglas mit Wasser, Papier, Pinzette

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Unbekannte Probe	-	-

Durchführung:

1. Gib 20mL deiner Probe gemeinsam mit den Siedesteinen in den Erlenmeyerkolben.
2. Stellt den Erlenmeyerkolben auf die Heizplatte.
3. Stecke den Stopfen mit dem Glasrohr auf den Erlenmeyerkolben.
4. Schalte die Heizplatte auf den Maximalwert. Sobald die Probe zu kochen beginnt, kannst du sie auf 100°C zurückdrehen.
5. Versuche nun den aufsteigenden Dampf am Ende des Glasrohres mit Hilfe des angezündeten Holzspießes zu entflammen.
6. Mit Hilfe der Pinzette kannst du ein kleines Stück Papier in die Flamme halten, um diese so besser zu erkennen. Wirf das entflammte Papier zum Löschen in das Becherglas mit Wasser.
7. Schalte die Heizplatte aus und notiere deine Beobachtungen.

Entsorgung: Die Siedesteine werden gewaschen und zurückgelegt. Die restliche Probenflüssigkeit kann im Abfluss entsorgt werden.

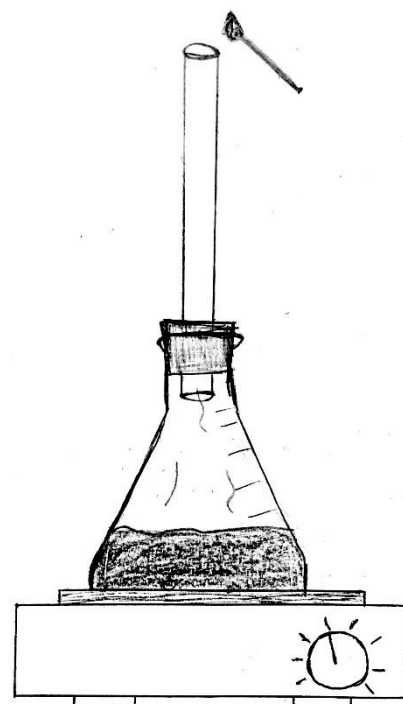


Abbildung 1 Schema des Versuchsaufbaues

Beobachtung:

Nachweis positiv: Unbekannter Long Drink enthält Ethanol und Dampf lässt sich entzünden.



Denaturierung von Proteinen

Hintergrundwissen: Proteine (Eiweiße) bestehen aus einer Peptidverknüpfung von unterschiedlichen Aminosäuren. Ihre Funktionsweise wird maßgeblich von ihrer räumlichen Struktur beeinflusst. Denaturiert ein Protein, spricht man von einem Aufbrechen der Struktur. Optisch kann man dies oft durch ein Ausflocken oder Aufstocken des Proteins feststellen.

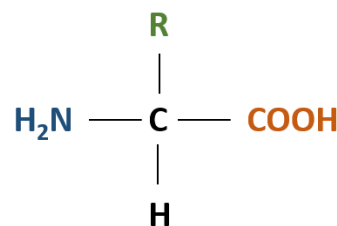


Abbildung 2 Grundstruktur einer Aminosäure

Materialien: Pipette, Reagenzgläser

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Salzsäure 2M	Achtung	H: 290 P: 234, 390
Unbekannte Probe	-	-
Eiweiß (aus Hühnerei) oder Sahne als Blindprobe	-	-

Durchführung:

1. Gib je 1mL der unbekannten Probe in ein Reagenzglas.
2. Gib nun einige Tropfen der 2M Salzsäurelösung hinzu.
3. Wiederhole den Vorgang mit der Blindprobe.
4. Notiere deine Beobachtungen

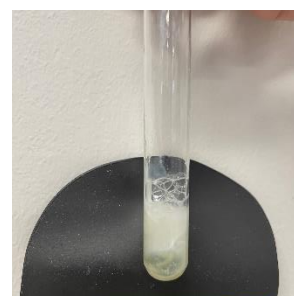
Entsorgung: Im Abfluss entsorgen und mit viel Wasser nachspülen.

Beobachtung:

Nachweis negative: Long Drink enthält kein Eiweiß.

Blindprobe mit Hühnerei zeigt einen flockenartigen

Niederschlag (siehe Bild rechts).





Zwischenbesprechung

Welche Long Drinks konnten mit Hilfe der qualitativen Nachweisreaktionen *nicht* ausgeschlossen werden? Stelle diese sowie ihre Inhaltsstoffe in den unten abgebildeten Kästchen dar. Nennen hier auch die Hauptbestandteile der Inhaltsstoffe, z.B.: Vodka (Ethanol, Wasser).

Name des Long Drinks: *Vodka Red Bull*



Inhaltsstoffe: *Red Bull (Zucker, Taurin, Koffein, Citrat), Vodka (Ethanol, Wasser)*

Name des Long Drinks: *Vodka Mate*



Inhaltsstoffe: *Mate (Zucker), Zitronensaft (Citrat, Wasser), Vodka (Wasser, Ethanol)*

Name des Long Drinks: *Mojito*



Inhaltsstoffe: *Zucker, Vodka (Ethanol, Wasser), Soda (Wasser), Limettensaft (Wasser, Citrat)*

Name des Long Drinks:



Inhaltsstoffe:



Fachlicher Input – NMR Spektroskopie



Aufgabenstellung: Ergänze die Textlücken mit Hilfe des Vortrages.

Unterschiedliche Spektroskopie Methoden

Elektromagnetisches Spektrum	Wellenlänge	Art der Anregung	Name der spektroskopischen Methode
Radiowellen	100 - 1m	<i>Änderung des Kernspins</i>	NMR-Spektroskopie
Infrarotstrahlung	1mm - 780nm	Änderung des Schwingungszustandes	IR-Spektroskopie
Sichtbares Licht, UV-Strahlung	780nm - 10nm	Änderung des Zustandes der äußeren Elektronen	UV/VIS-Spektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie
Röntgenstrahlung	10nm - 100pm	Änderung des Zustandes der Rumpfelektronen	Röntgenspektroskopie (XRS)

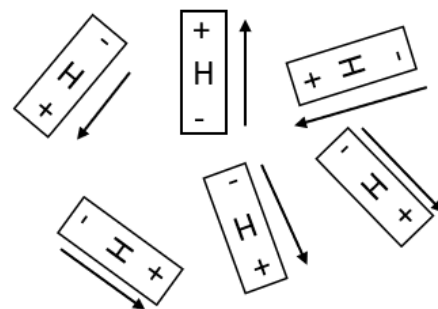
Warum NMR-Spektroskopie?

- Bestimmung von unbekannten Molekülen
- Strukturaufklärung in kürzester Zeit
- Viele Informationen durch eine einzelne Methode
- Medizin: dreidimensionale Aufnahmen des Körpers (MRI)

Messprinzip der NMR-Spektroskopie

Vorstellung „Atomkerne als Stabmagneten“

- Atomkerne bestehen aus *Protonen und Neutronen*.
- Atomkerne besitzen einen *Drehimpuls* (Kernspin) und drehen sich um die eigene Achse.
- Durch die elektrische Ladung wird bei (manchen) Atomkernen ein Magnetfeld erzeugt.
- Ausrichtung des Magnetfeldes ist *beliebig*.





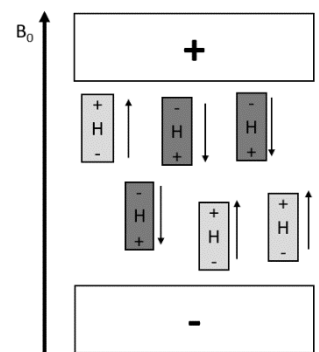
Welche Atomkerne sind magnetisch aktiv?

Atomkern	NMR aktiv	Natürliche Häufigkeit in %
^1H	ja	99,985
^2H (Deuterium)	ja	0,015
^3H (Tritium)	ja	0
^{12}C	nein	98,89
^{13}C	ja	1,11
^{16}O	nein	99,759
^{31}P	ja	100

Nicht aktive Kerne haben eine gerade Massenzahl haben eine gerade Massenzahl und geraden Ordnungszahl.

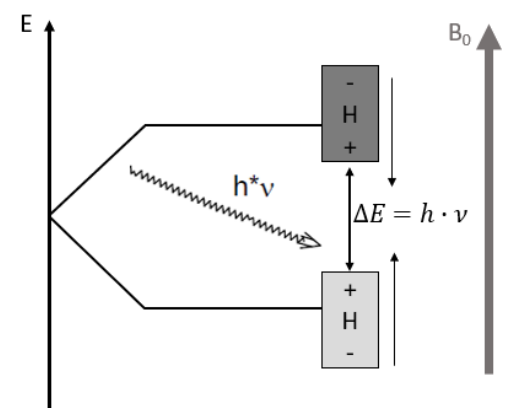
Atomkerne im Magnetfeld

- Vorstellung der Atomkerne als Stabmagneten – Ausrichtung ist beliebig
 - Anlegung eines äußeren Magnetfeldes
- Kerne orientieren sich mit oder gegen das Magnetfeld B_0
- Unterschiedliche Orientierungen haben unterschiedliche Energieniveaus
- Orientierungswechsel erfordert Energie



Resonanzbedingung für NMR

- Für den Übergang auf ein höheres Energieniveau muss $\Delta E = h \cdot \nu$ überwunden werden
- Kommt es zu einer Resonanz (= Spin-Umkehrung), wird Energie absorbiert
- Absorption kann gemessen werden
- Nach der Anregung fallen die Kerne in ihren energieärmeren Zustand zurück und geben dabei Wärme ab





Nuklear Magnetic Resonance Spectroscopy

- Atomkern (Nuklear) bzw. das Molekül wird in ein Magnetfeld gebracht
- Energie wird zugeführt (elektromagnetische Wellen im Bereich der *Radiofrequenz*), sodass die Resonanz des Atomkerns angeregt wird
- Absorbierte Energie wird gemessen und verstärkt
- Signal wird durch Computer ausgewertet, mathematisch umgewandelt
- Ein NMR-Spektrum wird erzeugt

Aufbau Spektrometer

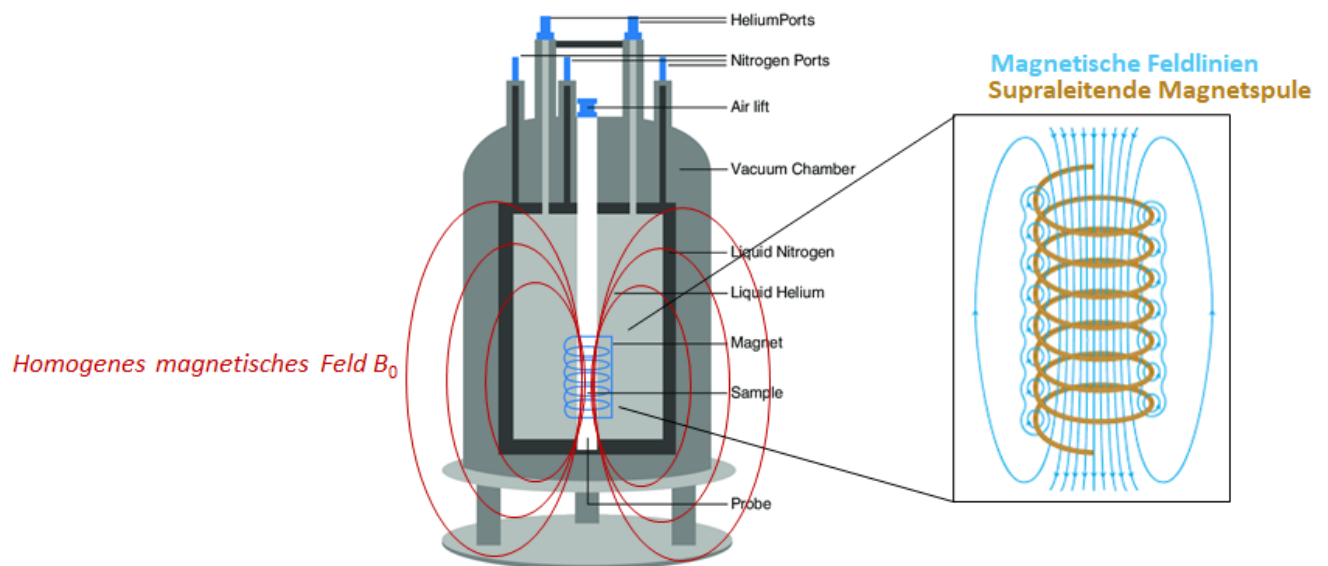


Abbildung 3 Aufbau Spektrometer (Kurzbach, 2020)

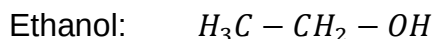
Interpretation von ^1H -NMR-Spektren

Basiswissen

- ✓ Ein NMR-Spektrum setzt sich aus den Signalen der jeweiligen Atome zusammen
- ✓ Ein ^1H -Spektrum zeigt nur die Wasserstoff-Atome an
- ✓ Peaks haben eine gewisse Lage (auf x-Achse), bestimmte Linienbreite/-höhe und können gekoppelt vorliegen



Analyse eines Spektrums



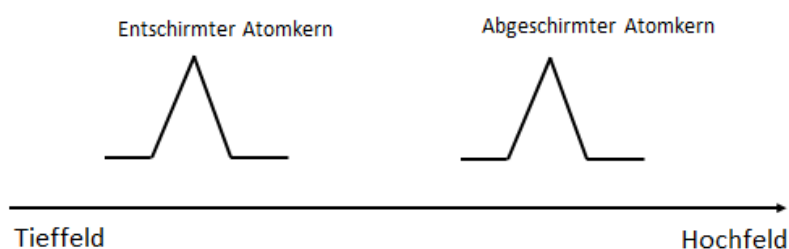
- Drei unterschiedliche Umgebungen für Wasserstoff (1,2,3) → drei Signale
- Wo liegt welches Signal im Spektrum?

Chemische Verschiebung

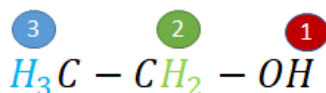
- Die chemische Umgebung der 1H -Atomkerne beeinflusst die Lage der gemessenen Signale
- Die Elektronendichte der benachbarten Kerne beeinflusst das Magnetfeld des Spektrometers
- Verschiebung der Peaks nach rechts oder links

Hohe Elektronendichte → Abschirmung → Verschiebung nach rechts

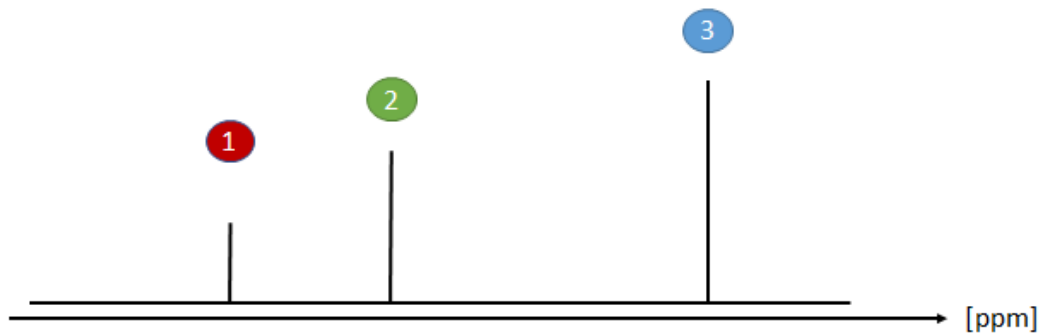
Niedrige Elektronendichte → Entschirmung → Verschiebung nach links



Ethanol:



- Elektronegativstes Atom ist hier Sauerstoff → zieht Elektronen zu sich → entschirmt Elektronen → Verschiebung nach links
- Effekt am stärksten für direkt an Sauerstoff gebundenen Wasserstoff (1), je weiter weg, desto schwächer.

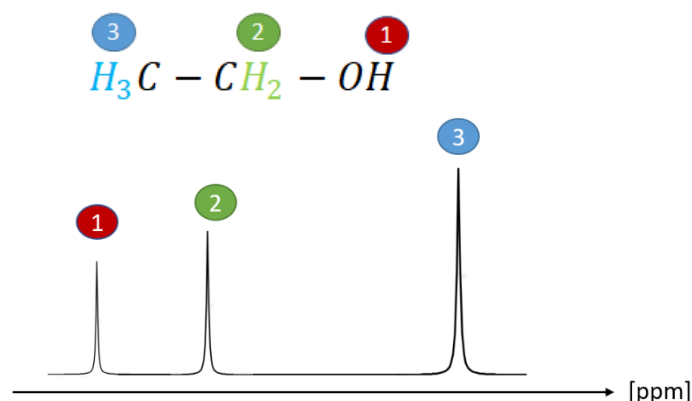


Beschriftung der x-Achse

- Jedes Signal zu einer bestimmten Resonanz
- Vereinfachung:
 - Tetramethylsilan TMS als Standard
 - Signal wird mit 0,00 definiert
 - Signale der gemessenen Proben werden als Abweichung vom Standard angegeben
 - Angabe in ppm (parts per million)
 - 1ppm → Resonanzfrequenz ist ein Millionstel größer als TMS

Intensität

- Höhe der Signale ist unterschiedlich
- Bei Ethanol gibt es 3 Arten von unterschiedlich gebundenen Wasserstoffatomen
- Bei (3) sind drei H-Atome an einen Kohlenstoff gebunden, bei (2) zwei H-Atome und bei (1) nur ein H-Atom
- Im ^1H -Spektrum ist daher der Peak von (3) am höchsten
- Exakte, scharfe Signale sind nicht messbar → man erhält einen glockenförmigen Peak
- Anzahl der beteiligten Atome kann durch die Fläche unter dem Signal berechnet werden





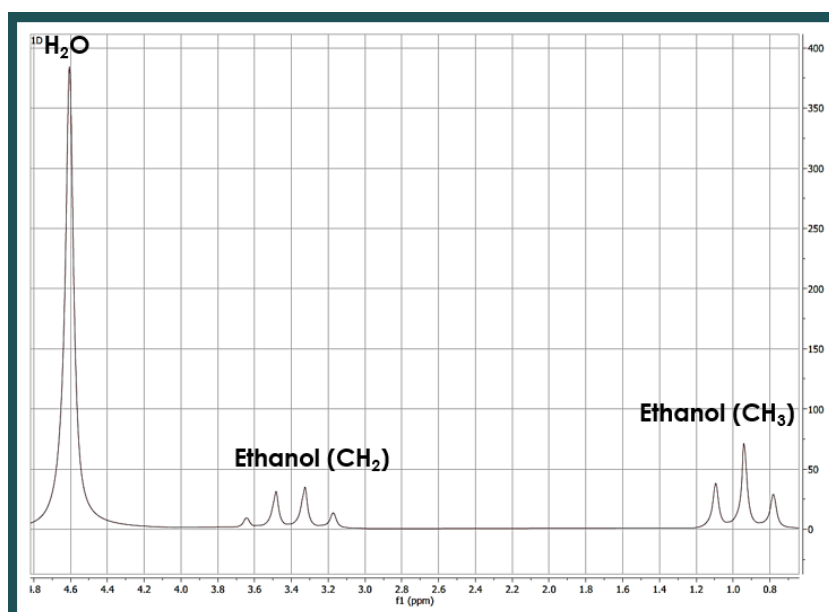
Spin-Spin-Kopplung

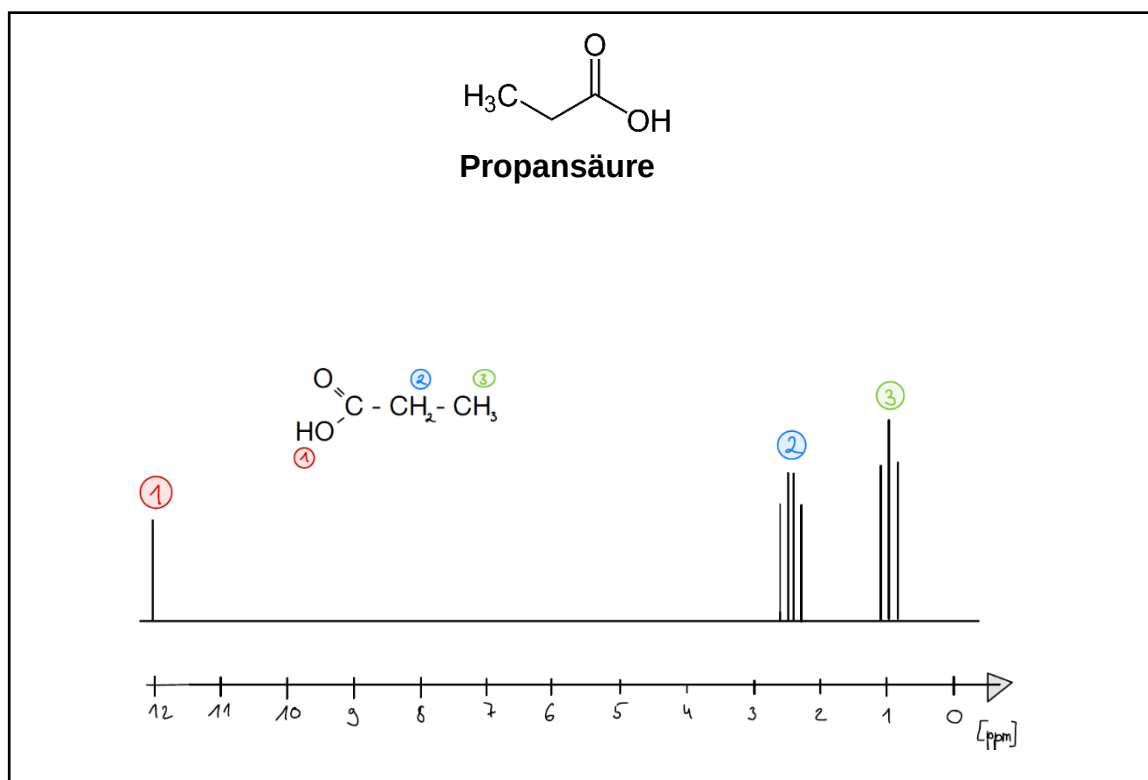
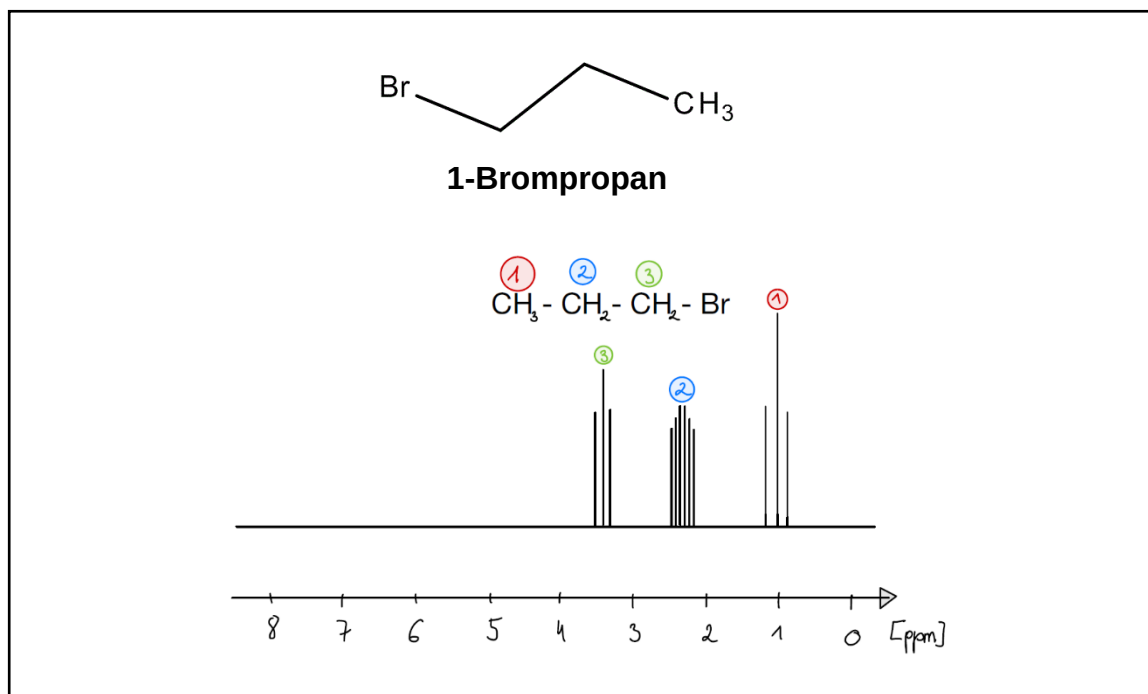
- Atomkerne der H-Atome beeinflussen sich gegenseitig
- Jeder Kern erzeugt selbst ein kleines Magnetfeld → Resonanz des benachbarten Kerns wird beeinflusst → Aufspaltung des Signales

Anzahl der Nachbarn	Pascal'sches Dreieck	Aufspaltung
0	1	Singulett - 1 Signal
1	1 1	Dublett – 2 Signale
2	1 2 1	Triplet – 3 Signale
3	1 3 3 1	Quartett – 4 Signale
4	1 4 6 4 1	Quintett – 5 Signale
5	1 5 10 10 5 1	Sextett – 6 Signale

Ethanol in wässriger Lösung

- CH_3 erfährt eine Spin-Spin-Kopplung mit den 2 H-Atomen aus CH_2 → Triplet
- CH_2 koppelt mit 3 H-Atomen aus CH_3 → Quartett
- OH würde normalerweise mit CH_2 koppeln, allerdings liegt Ethanol meist als wässrige Lösung vor → nur Singulett



Übungsbeispiele:



Laborphase II – ^1H -NMR Spektroskopie

In dieser Laborphase soll die unbekannte Long Drink Probe für die ^1H -NMR Spektroskopie vorbereitet werden. Damit man das Spektrum interpretieren kann, benötigt man zum Vergleich Spektren der möglichen Inhaltsstoffe.



Lernziel: Du kannst das ^1H -NMR Spektrum eines Long Drinks interpretieren und die Inhaltsstoffe den einzelnen Peaks zuordnen.



Arbeitsaufträge Laborphase II

- Wähle geeignete Inhaltsstoffe aus, welche in deiner unbekannten Probe vorhanden sein könnten
- Lies dir die Anleitung „Probenvorbereitung für NMR Spektroskopie“ durch und bereit deine NMR-Tubes vor
- Gemeinsam mit einem*r Betreuer*in kannst du nun die Spektroskopie durchführen
- Interpretiere die erhaltenen Spektren mit Hilfe des erlernten Wissens aus dem fachlichen Vortrag zur NMR-Spektroskopie
- Identifiziere die unbekannte Probe! Beschrifte dazu die einzelnen Peaks und ordne sie den Inhaltsstoffen zu. *Um welchen Long Drink handelt es sich?*
- Bereite dich für eine Diskussion der Ergebnisse vor.



Probenvorbereitung NMR Spektroskopie

Materialien: NMR Tubes, Mikropipetten, Saugball, Reagenzgläser, Glasschreiber

Chemikalien	Piktogramme	H- und P-Sätze
Inhaltsstoffe der Long Drinks	-	-
Unbekannte Probe	-	-
Destilliertes Wasser	-	-

Durchführung:

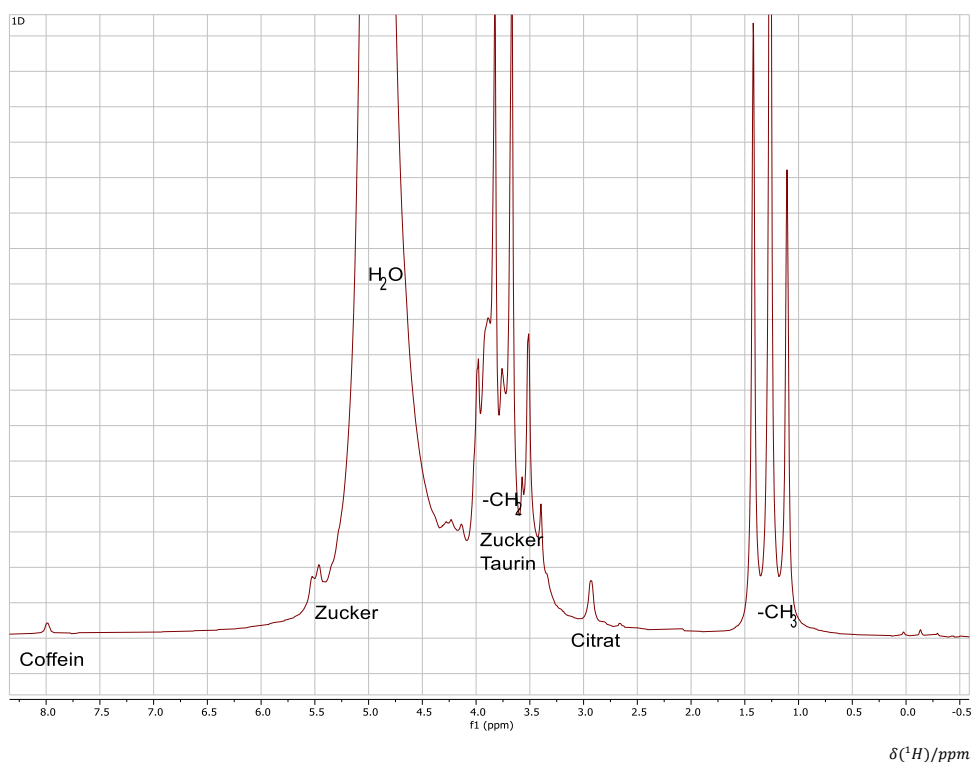
1. Löse feste Inhaltsstoffe (Sacharose etc.) zuerst mit destillierten Wasser in einem Reagenzglas.
2. Gib mit Hilfe der Mikropipette $550\mu\text{L}$ der Lösung in eine zuvor beschriftete NMR Tube
3. Bereite alle Proben vor und sammle die beschrifteten NMR Tubes im Reagenzglasständer
4. Gib einem*er Betreuer*in Bescheid, dass du bereit für die Spektroskopie bist



^1H -NMR Spektren

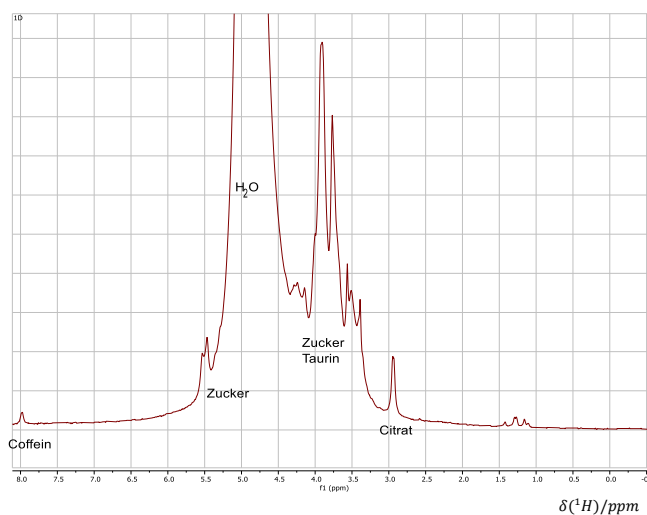
Klebe hier deine gemessenen NMR-Spektren ein, beschrifte sie und interpretiere die unbekannte Cocktailprobe. Ordne die einzelnen Inhaltsstoffe der Probe den gemessenen Peaks zu. In der anschließenden Ergebnisdiskussion soll es dir möglich sein, dein Ergebnis den anderen zu präsentieren.

Unbekannte Probe

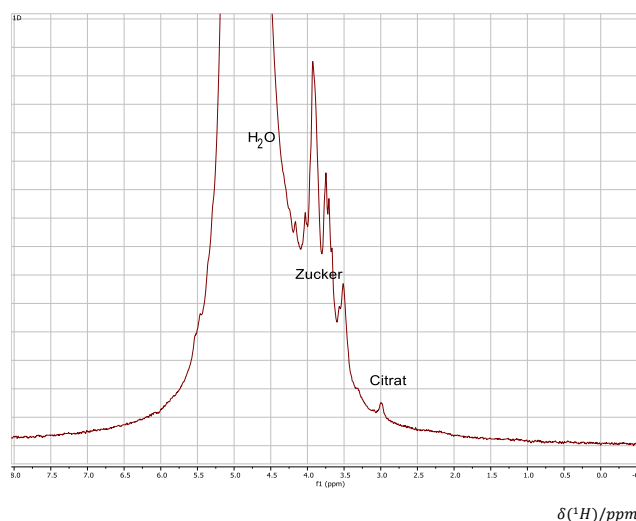


Weiters folgt eine Auswahl möglicher Vergleichsspektren:

Red Bull

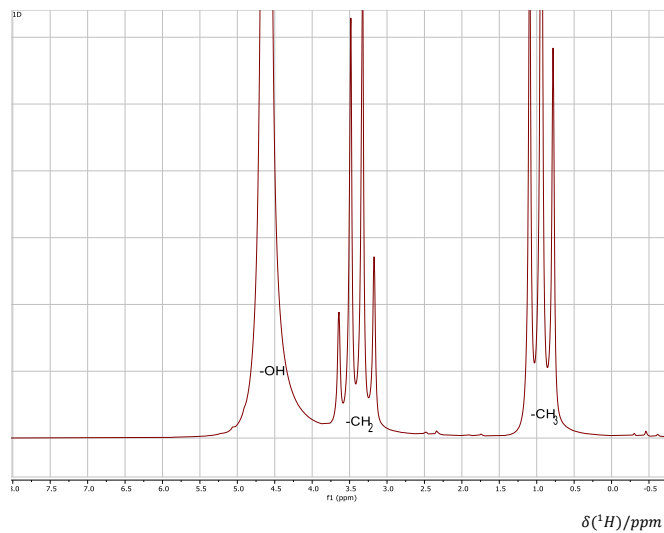


Club Mate

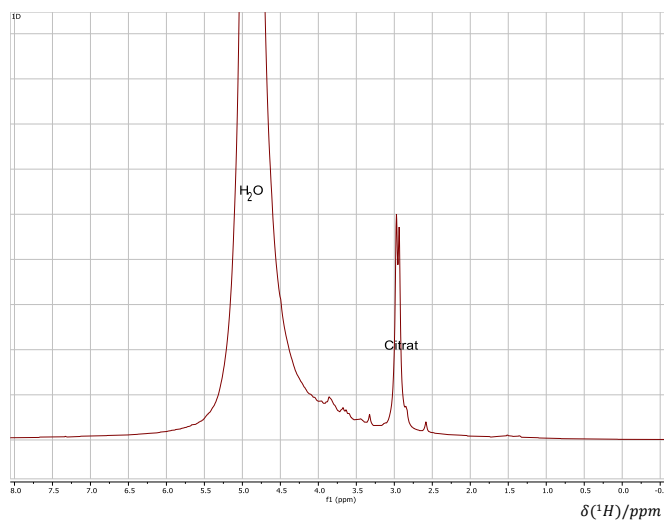




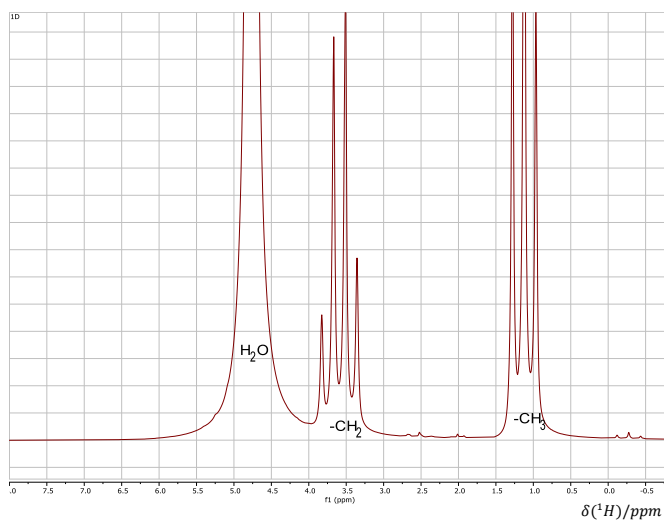
Vodka



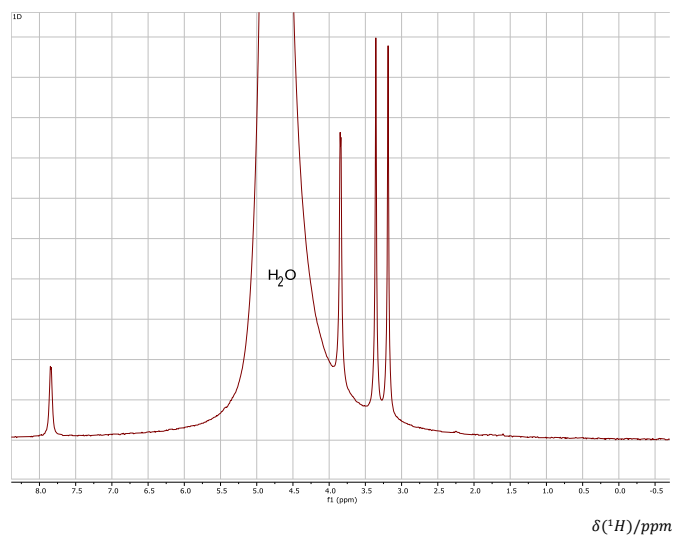
Limettensaft



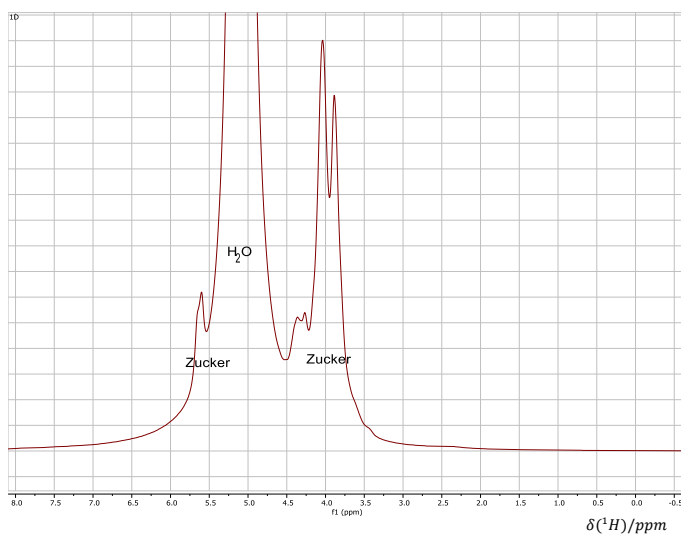
Rum



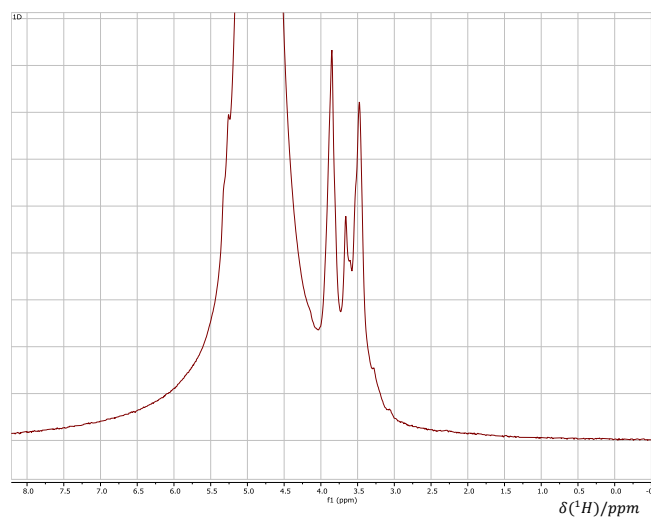
Coffein



Saccharose

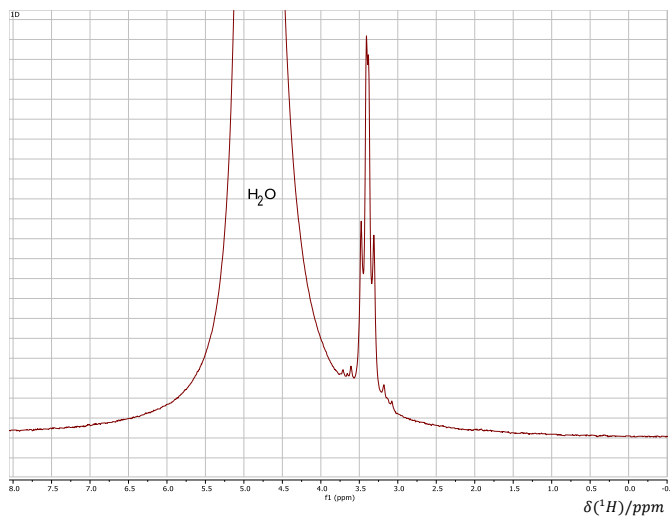


D-Glucose

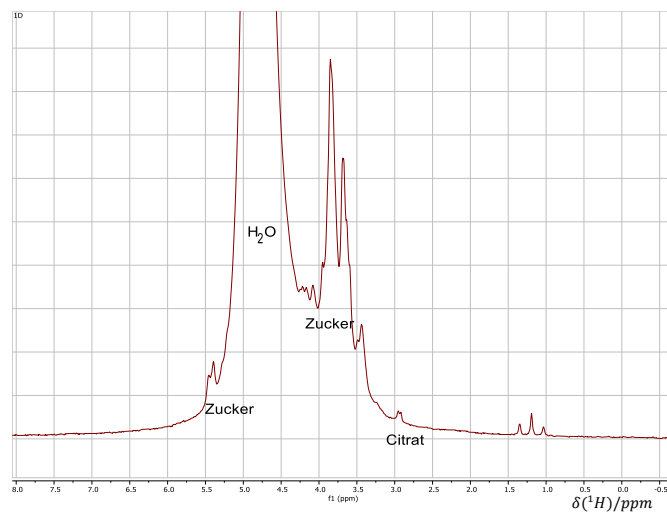




Taurin



Ginger Ale





Ergebnisdiskussion

Bei dem unbekannten Long Drink handelt es sich um



Vodka Red Bull



Hier hast du Platz für Notizen zur Diskussion der Ergebnisse.

[illegible]



Literaturverzeichnis

In der nachstehenden Liste findest du Literaturhinweise zu den einzelnen Quellen dieses Laborbuches.

Bruice, P. Y., & Reiser, O. (2011). Organische Chemie - Studieren kompakt (5., aktualisierte Aufl.). Pearson Studium.

Kurzbach, Dennis (2020). Paramagnetism in Spectroscopy: NMR, Hyperpolarization and EPR. [Vorlesungsunterlagen]

Lehmann, Thomas (2016). ¹H-NMR-Spektroskopie. Skript zur organischen Grundausbildung im Rahmen des Bachelorstudiengangs Chemie an der Freien Universität Berlin. [Vorlesungsunterlagen]
https://www.bcp.fu-berlin.de/chemie/chemie/studium/ocpraktikum/_Unterlagen_Spektroskopie/nmr.pdf
(20.12.21)

Russek, Adrian (2020). Alkoholfreies Bier – alles nur Marketing? Ein Nachweisverfahren für Ethanol durchführen. Naturwissenschaften im Chemie Unterricht, 31(175).

Schläger, Torsten. Grundlagen der NMR Spektroskopie. [Vorlesungsunterlagen] Universität Münster.
https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/pharmaz_und_med_chemie/studieren/semester/8semester/nmrtischvorlage.pdf (02.11.21)