

Zum Musterprotokoll

Der Aufbau der Protokolle folgt immer den gleichen Regeln und wird später (hoffentlich) auch in sehr ähnlicher Form als Laborjournal geschrieben:

In der **Kopfzeile** Ihren Namen (evtl. mit Platznummer) und das Datum

In der **Überschrift**, das, was Sie gemacht haben.

Falls nach einer Vorschrift oder analog zu einer Vorschrift gearbeitet wird muss auch die ursprüngliche Quelle zitiert werden. Im Praktikum ist das obsolet, hier geben Sie stattdessen die Versuchsnummer in der Überschrift mit an.

Vollständige, stöchiometrische Reaktionsgleichung mit allen Summenformeln und Molmassen. Das ist sozusagen Ihre Arbeitshypothese.

Danach sollten alle für die Reaktion verwendeten Substanzen aufgelistet werden mit Namen (evtl. später mit Reinheitsangaben oder Konzentrationen bei Lösungen), eingesetzter Menge in g bzw. ml, Stoffmenge und, wo nötig, Äquivalenten.

Prinzipiell sollten dort auch Angaben zur Sicherheit mit aufgeführt werden, die haben Sie aber schon in „Versuchsbezogenen Betriebsanweisung“.

Lösungsmittel oder andere Hilfsstoffe für die Aufarbeitung können auch aufgeführt werden, das kann die Planung oder Bereitstellung erleichtern. In der Regel werden Sie aber weggelassen.

Falls Reagenzien vor der Reaktion noch speziell gereinigt wurden muss das ebenfalls angegeben werden.

Apparatur: Standardapparaturen werden meistens nicht explizit angegeben, sondern in der Durchführung mit genannt. Komplexere oder spezielle Apparaturen sollten aber genauer beschrieben werden, hier kann eine Skizze hilfreicher sein als umständliche Beschreibungen.

Bis hierher kann das Protokoll vorbereitet werden, alles ab hier kann erst parallel oder nach dem eigentlichen Experiment geschrieben werden:

Durchführung

Hier sollte die genaue Reaktionsdurchführung beschrieben werden und zwar genau so, wie sie tatsächlich gemacht wurde, einschließlich aller Beobachtungen, eventueller Messwerte (Temperaturen etc.) und Zeitangaben (Kühl- oder Aufheizzeiten, Zutropfzeiten etc.). Auch die Reihenfolge, in der die Reagenzien zugegeben werden kann wichtig sein, muss also aus dem Protokoll hervorgehen.

Falls die Substanzen verwendet werden, die nicht bereits oben mit den Mengen aufgeführt wurden, müssen die fehlenden Angaben ebenfalls mit in die Durchführung.

Aufarbeitung und Reinigung

Auch hier gilt: Alles so beschreiben wie es gemacht wurde, nur so lässt sich der Versuchsablauf nachvollziehen. Lösungsmittel oder anorg. Lösungen mit Mengenangabe und evtl. Konzentrationsangaben, Beobachtungen etc. Hilfreich kann auch sein, einen bestimmten Arbeitsschritt kurz zu erklären bzw. was bezweckt werden soll (Stichwort genügt meistens).

Häufig kommt es bei der Aufarbeitung zu Problemen (es muss etwas mehr Lösungsmittel verwendet werden, bei pH-Wert-Korrekturen reicht die angegebene Menge Säure/Base nicht, schlechte

Phasentrennung usw.). Das alles kann meistens leicht korrigiert werden, muss dann aber auch beschrieben werden.

Beim Trocknen von organischen Lösungen das Trockenmittel mit angeben, beim Abdestillieren von Lösungsmitteln (z.B. Rotationsverdampfer) auch die Bedingungen notieren (auch ob am Ende der Druck weiter erniedrigt wurde und falls ja, wie weit).

In der Regel erhält man nach der Aufarbeitung ein Rohprodukt. Allerspätestens hier muss die Massenbilanz kontrolliert und auch im Protokoll festgehalten werden, zusammen mit physikalischen Daten, z.B. Schmelzpunkt Rohprodukt.

Wird für die weitere Reinigung umkristallisiert, die benötigte Menge an Lösungsmittel und Temperaturen angeben (entweder Rückfluss (= Siedepunkt Lösungsmittel) oder die tatsächliche Heizbadtemperatur, wenn nicht bis zum Siedepunkt erhitzt wurde). Ebenfalls wichtig sind die Kristallisationsbedingungen (auf Raumtemperatur, im Eisbad, über Nacht im Kühlschrank etc.)

Bei Lösungsmittelgemischen: wurde von Anfang an mit einer bestimmten Mischung gearbeitet (Zusammensetzung?) oder wurde zuerst in einem Solvens gelöst und später das „Antisolvens“ dazu gegeben.

Bei Reinigung über Destillation wird das vollständige Destillationsprotokoll angegeben (siehe auch Musterprotokoll).

Am Ende steht das erhaltene Reinprodukt mit Aussehen, erhaltener Masse, Stoffmenge und Ausbeute in % der Theorie sowie seinen gemessenen physikalischen Daten (Schp. bzw. Sdp. Und Brechungsindex). Zum Vergleich werden immer die Literaturdaten mit angegeben.

Größere Abweichungen sollten nicht kommentarlos stehen bleiben, im Prinzip deutet das ja auf nicht reines Produkt hin. Entweder der Reinigungsschritt wird wiederholt und liefert dann hoffentlich eine höhere Reinheit oder die Spektren werden in Hinblick auf Verunreinigungen genauer analysiert und daraus eine alternative Reinigungsprozedur abgeleitet.

Fragen zur Versuchsdurchführung

In manchen Versuchsvorschriften sind auch Fragen zu finden, über die durchaus nachgedacht werden sollte. Die Antworten dazu können gesammelt hier beantwortet werden, manchmal auch bereits bei Durchführung/Isolierung.

Spektren:

Für die Spektren benötigen Sie spezielle Software zur Aufnahme und/oder Prozessierung und Auswertung. Für IR-Spektren ist das die installierte Software am Messgerät, sie können die Spektren als pdf auf einen USB-Stick abspeichern.

Bei NMR-Spektren werden die rohen Messdaten auf einem Server abgelegt und müssen von diesem kopiert und mit einem Auswerteprogramm prozessiert werden. Wir empfehlen dafür SpinWorks, siehe das zugehörige Tutorial.

Die (prozessierten) Spektren können Sie entweder direkt in das Protokoll einbinden oder als Anhang mit abliefern, die Auswertung gehört auf jeden Fall ins Protokoll. Vor allem bei NMR-Spektren sind im Übersichtsspektrum die Aufspaltungen kaum zu erkennen, hier müssen häufig die relevanten Ausschnitte auch vergrößert dargestellt werden.

Und gleich dazu ein Rat für das gesamte „wissenschaftliche Leben“: Alle Messdaten (genauso wie die Aufzeichnungen in ihrem Laborjournal später) sind „heilig“. Sie müssen gut gesichert werden und müssen auch Jahre später noch auffindbar sein. Vor allem für digitale Daten sollte man sich deshalb möglichst früh eine gute Archivierungs- und Backup-Strategie überlegen. Empfehlenswert ist eine Dreifach-Strategie: Die Messdaten werden doppelt gesichert, eine Arbeitskopie, eine Sicherheitskopie (die am besten mit Schreibschutz, das verhindert versehentliche Manipulation). Zusätzlich wird im Laborjournal der vollständige Pfad der originalen Messdaten bzw. die eindeutige Proben-ID am Messgerät notiert, damit hat man im Falle eines Datenverlusts noch Chancen, die ursprünglichen Messdaten im Backup des Messgeräts wieder zu finden.

IR-Spektren messen Sie selbst, d.h. ein „seltsames“ Spektrum könnte auch ein Fehler bei der Messung/Probenpräparation sein. Im Zweifelsfall nochmal messen und/oder Assistenten fragen.

Unser IR-Gerät im Praktikum ist mittlerweile ein modernes FTIR-Gerät mit Diamant-ATR-Messeinheit, die Spektren in den Versuchsvorschriften wurden noch in Transmission gemessen. Bei ATR-Geräten ist zwar die Probenbereitung deutlich einfacher als bei Transmissions-Messungen, vor allem bei Feststoffen. Das Messprinzip bedingt aber, dass IR-Signale bei kleinen Wellenlängen (= hohe Wellenzahl) weniger intensiv erscheinen als in Transmissionsmessungen.

Bei IR-Spektren ist es unsinnig (und meistens auch falsch), wenn Sie jeden Peak interpretieren wollen. Im Fingerprint können Sie alles Mögliche hineininterpretieren, die einzige eindeutige funktionelle Gruppe in diesem Bereich ist die Nitro-Gruppe mit 2 starken Banden um 1550 und 1380 cm^{-1} . Konzentrieren Sie sich besser auf die charakteristischen Banden der funktionellen Gruppen und machen Sie den Gegencheck: Sehe ich alle erwarteten funktionellen Gruppen auch im IR-Spektrum und liegen die im erwarteten Bereich? Ist eine charakteristische Bande im IR, die zugehörige funktionelle Gruppe ist aber nicht in der erwarteten Substanz?

Die Ergebnisse der Interpretation werden dann am einfachsten in eine Tabelle geschrieben, siehe Musterprotokoll.

Für **NMR-Spektren** setzen Sie Ihr NMR-Röhrchen selbst an, bitte achten Sie peinlich auf Sauberkeit: Jede Verunreinigung in Ihrem Röhrchen (z.B. Aceton/Wasser-Reste vom Reinigen) oder im CDCl_3 werden Sie auch in Ihrem Spektrum sehen, nicht selten als intensivsten Peak.

Die Interpretation der NMR-Spektren ist etwas aufwendiger und kann eigentlich nur mit der Auswertesoftware gemacht werden. Dazu finden Sie alles Notwendige im Spinworks-Tutorial.

Am besten machen Sie das auch in tabellarischer Form, d.h. Sie müssen sich jede Signalgruppe genauer anschauen (am besten auch „hineinzoomen“):

- Ist es ein Signal eines Protons (bzw. einer äquivalenten Protonengruppe) oder überlagern sich mehrere Signale?
- Kann es noch nach erster Ordnung interpretiert werden?
 - Falls ja: chemische Verschiebung bestimmen, Multiplizität (s, d, t, q usw. oder Kombination dd..), relatives Integral und Kopplungskonstanten bestimmen.
 - Falls nein: Für die chemische Verschiebung den Bereich (von bis) und das relative Integral bestimmen und als Multiplett kennzeichnen.
- Bei überlagerten Signalen aus Signalen erster Ordnung besteht noch die Chance, die überlagerten Signale „auseinander-dividieren“, falls nicht wie ein Multiplett behandeln.

Im nächsten Schritt werden die gefundenen Signalgruppen den einzelnen Protonengruppen zugeordnet.

Bei einfachen Molekülen können Sie entsprechenden Gruppen über eindeutige Fragmente zuordnen (z.B. O-CH₂-CH₃ bzw. O-CH₂-CH₃ für die Methylen- bzw. Methylgruppe in einem Ethyl-Ester oder Ether). Bei komplexeren nummerieren Sie das Molekül zunächst durch (wenn möglich nach IUPAC). Dabei werden nicht die Protonen nummeriert, sondern die Kohlenstoffe, an denen das Proton sitzt. Bei der Nummerierungs-Variante muss natürlich die Struktur mit der Nummerierung bei der Auswertung mit abgebildet werden.

Für die eigentliche Zuordnung wird zuerst die chemische Verschiebung abgeschätzt: ist die im erwarteten Bereich, danach: passt das Aufspaltungsmuster, wer sind die Kopplungspartner, passen die Kopplungskonstanten zueinander. Abschließend müssen natürlich auch die relativen Integrale zusammenpassen.

Bei jedem Widerspruch sollten Sie überlegen, ob ihre Zuordnung wirklich passt. Manchmal hat man auch nur übersehen, dass eine CH₂-Gruppe nicht magnetisch äquivalent, sondern diastereotop ist und deshalb ein anderes Aufspaltungsmuster zeigt.

Mit der gefundenen Zuordnung vervollständigen Sie die Tabelle. Sie sollte 5 Spalten haben und entweder steigend oder fallend nach der chemischen Verschiebung geordnet sein.

- δ (chemische Verschiebung, auf 2 Dezimalstellen gerundet)
- Multiplizität (s, d, t, q, ..., m)
- Kopplungskonstante(n)
- Integral
- Zuordnung

+ optionale Zusätzliche Spalte: Angabe der Kopplungspartner

Als Überschrift kommt der Typ des Spektrums mit nominaler Messfrequenz und dem verwendeten Lösungsmittel dazu, also z.B. ¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃)

Statt der Tabellenform ist auch eine komprimierte Form (in einer Zeile) möglich, sie wird bei Publikationen bevorzugt.

Nicht unterschlagen sollten Sie nicht unerhebliche Signale, die nicht zu Ihrem Produkt gehören. Sie stammen von Verunreinigungen und sollten soweit irgendwie möglich identifiziert werden, sehr häufig sind es Lösungsmittelreste. Noch besser ist natürlich, die Produkte (und auch die NMR-Röhrchen) vorher gründlich zu trocknen. Eine Ausnahme sind Restsignale vom verwendeten, deuterierten Lösungsmittel (z.B. 7.26 ppm bei CDCl₃). Die sind praktisch unvermeidlich und werden nicht erwähnt.

Damit ist der eigentliche experimentelle Teil fertig, der folgende **Reaktionsmechanismus** ist sozusagen die theoretische „Untermauerung“ des Versuchs.

Der Mechanismus sollte natürlich sauber und übersichtlich gezeichnet werden, vor allem muss er aber zu den Reaktionsbedingungen passen und das erhaltene Produkt erklären. Verwenden Sie Reaktions-, Gleichgewichts- und Mesomeriepfeile korrekt, die „Elektronenschiebepfeile“

verdeutlichen, wie der Name sagt, Umorientierungen von Elektronen(paaren), nie die Bewegung von Atomen oder Atomgruppen.

Häufig haben wir es mit einer Abfolge von Gleichgewichtsreaktionen zu tun, das sollte dann auch als Gleichgewicht ersichtlich sein. Die Gleichgewichte können durch einen (quasi) irreversiblen Reaktionsschritt auf die Produktseite verschoben werden, wenn möglich identifizieren Sie diesen Schritt. Daneben gibt es auch andere „Tricks“, solche Gleichgewichte auf die gewünschte Seite zu verschieben, z.B. durch gezielte Entfernung einer Komponente des Gleichgewichts. Versuchen Sie das zu verstehen (manchmal sind es apparative, manchmal chemische „Tricks“).

Weitere denkbare Reaktionsprodukte

Die „weiteren denkbaren Reaktionsprodukte“ aus der Vorschrift sollten abschließend auch angesprochen werden. Manche davon sind einfach nur Zwischenstufen auf dem Reaktionsweg, manche mehr oder weniger offensichtliche Nebenprodukte und einige nur schwer erklärbar, weil Sie durch die Reaktionsbedingungen eigentlich nicht gebildet werden können.

Sie sollten aber auf jeden Fall überlegen, ob die vorliegenden experimentellen Daten (also in der Regel die Spektren) einen Ausschluss erlauben und wenn möglich (sehr) kurz den möglichen Bildungsweg angeben.

Das ist als Übung für ihre spätere, eigene, wissenschaftliche Arbeit gedacht (Bachelor-, Masterarbeit etc.). Es ist gar nicht so selten, dass Sie später aus einer Reaktion ein (Neben)produkt isolieren, dessen Spektren absolut nicht zur erwarteten Struktur passen. Dann hilft nur Nachdenken und mögliche Alternativen mit Bleistift und Papier zeichnen bis alles zusammenpasst. Zunächst ist man wegen der eigenen Vorstellung etwas „betriebsblind“, im Nachhinein ist dann alles meistens doch plausibel.

Zum Muster-Vortrag:

Allgemeines

Die Folien im Mustervortrag sind zugegeben sehr spartanisch, Sie dürfen ihren Vortrag gerne auch hübscher gestalten. Verwenden Sie aber Präsentationsvorlagen mit wenig grafischen Elementen, die nicht zu viel Platz beanspruchen. Das 4:3-Folienformat sieht zwar auf modernen Wide-Screen-Monitoren etwas seltsam aus, am Beamer wird das Bild aber raumfüllender dargestellt.

Wenn farbige Hintergründe, dann nur in dezenten Farben. Mit kräftigen Farben ist es schwierig, einen ausreichenden Kontrast zwischen Hintergrund und Inhalt zu erreichen, bei schlecht gewählten Farbverläufen wird es auch gerne unleserlich.

Allgemein sind Farben schwierig: Geringe Farbnuancen sind schwierig zu erkennen und etwa 5% aller Menschen hat eine Rot-Grün-Schwäche.

Beschränken Sie sich auf das Wesentliche – Sie haben nur 10 Minuten Zeit. Eine Folie mit Inhaltsangabe oder Gliederung ist für einen 45-Minuten Vortrag durchaus sinnvoll, bei einem 10-Minuten Vortrag aber ziemlich überflüssig.

Die 10 Minuten sind übrigens auch ziemlich genau der Zeitslot, den Sie später in Kurzvorträgen bei wissenschaftlichen Konferenzen haben werden. Der einzige Unterschied ist, dass Ihnen dort das Mikrofon nach 10 Minuten abgedreht wird, im Seminar wird nur der Dozent irgendwann ungeduldig.

Falls Sie glauben, dass ein Punkt deutlich mehr Erklärungen braucht als Sie Zeit haben: Das wird vermutlich auch dem Publikum auffallen und sie können mit Nachfragen rechnen. Das können Sie gerne auf einer Extra-Folie aufbereiten, die Sie dann in der Diskussion „aus dem Hut zaubern“.

Achten Sie auf korrekte Rechtschreibung – das kann schnell peinlich werden. Verwenden Sie die korrekten Fachbegriffe: „Äther“ oder „Äthanol“ sind zwar nach Duden korrekt, in der Chemie heißen sie aber Ether und Ethanol. Und „Vakuumiert“ wird im Supermarkt an der Fleischtheke, im Labor wird evakuiert oder im bzw. unter Vakuum getrocknet. Der dazu verwendete Exsikkator (*engl.*: desiccator) ist auch so ein Wort, das meistens falsch geschrieben wird.

In den Naturwissenschaften ist Englisch die internationale Fachsprache. Deshalb wird für Zahlen auch in deutschen Texten die englische Notation verwendet, also mit Dezimalpunkt, das verhindert Verwechslungen. „Tausender-Trennzeichen“ sind übrigens generell unüblich.

Strukturformeln sollen sauber und übersichtlich gezeichnet werden, dazu gehören auch korrekte Bindungswinkel und vernünftige Proportionen von Elementsymbolen und Bindungsstriche. Für organische Strukturen mit ChemDraw ist das „ACS Stylesheet“ gut geeignet.

Strukturformeln sollten im ganzen Vortrag gleich skaliert werden. Am besten werden Sie im Zeichenprogramm mit demselben Stylesheet gezeichnet und erst in der Zielanwendung (z.B. PowerPoint) skaliert und das mit demselben Skalierungsfaktor. Falls aus Platzgründen auch kleinere Strukturformeln notwendig sind: Beschränken Sie sich auf zwei „Standardgrößen“.

PowerPoint-Animationen sind manchmal ganz hübsch und mitunter praktisch, sie sollten aber sparsam eingesetzt werden. Zum einen muss das Timing stimmen, zum anderen verhaspelt man sich gerne mit der Reihenfolge.

Aufbau der Präsentation

1. Folie – Titelfolie, ist selbsterklärend.

Reaktionsübersicht

Die stöchiometrische Reaktionsgleichung mit Summenformeln, Molmassen. Katalysatoren und Bedingungen werden auf bzw. unter den Reaktionspfeil geschrieben.

Eingesetzte Mengen der Reagenzien: in g oder mL. Bei Reaktanden zusätzlich die Stoffmengen in mol bzw. mmol und die Äquivalente (bezogen auf das Reagenz im Unterschuss). Die übliche Abkürzung für Äquivalente ist übrigens equiv., auf keinen Fall eq., das steht für Gleichung (equation).

Im Beispielvortrag ist Ethanol gleichzeitig Lösungsmittel und Reagenz, deshalb werden in diesem Fall auch die Stoffmenge und Äquivalente aufgeführt.

Durchführung: Kurze Beschreibung der wesentlichen Punkte. Auf Einzelheiten nur dann eingehen, wenn Sie für die Reaktion wichtig sind. Standardapparaturen können Sie als bekannt voraussetzen, nur auf Besonderheiten eingehen. Bilder oder Fotos ihrer Apparatur können Sie natürlich einbauen, die sollten dann aber einen „Mehrwert“ bieten.

Aufarbeitung und Reinigung

Auch hier gilt: Weniger ist mehr, nicht jedes Detail muss ausgewalzt werden. Es sollte aber klarwerden, warum ein bestimmter Schritt notwendig ist.

Die Rohausbeute sollte im Normalfall erwähnt werden (mit Mengenangabe, Stoffmenge und %-Angabe).

Reinigung: Bei Umkristallisation das Lösungsmittel mit Mengenangabe, bei Destillationen mindestens die Druckangabe. Das Destillationsprotokoll muss nicht immer dabei sein, kann aber hilfreich sein, z.B. zur Erklärung von größeren Verlusten.

Im Beispielvortrag könnte man z.B. darauf eingehen, dass neben den beiden Reifractionen auch eine weitere Fraktion mit nur geringen Verunreinigungen erhalten wurde, die aber nicht in Reinausbeute einging.

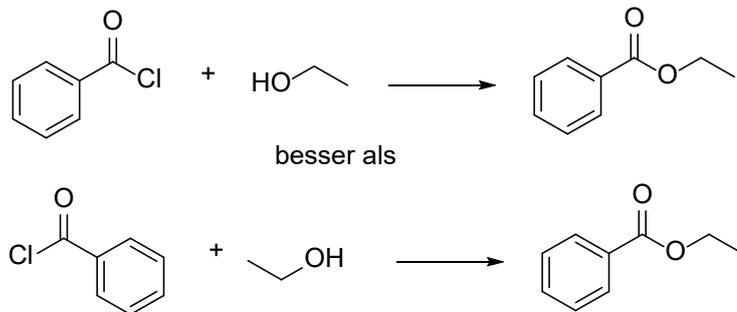
Am Schluss auf jeden Fall das erhaltene Reinprodukt zusammenfassen mit Aussehen, Menge, Stoffmenge, Ausbeute in % der Theorie und physikalischen Daten und die Literaturdaten gegenüberstellen.

Falls Ihr Versuch nicht wirklich geglückt ist und Sie ein schlechtes Ergebnis (niedrige Ausbeute, unreine Substanz) „verkaufen“ müssen: Eine plausible Erklärung, was schiefgelaufen ist, nimmt allzu kritischen Nachfragen den Wind aus dem Segel. Dazu sollten Sie auch nochmal alle Aufzeichnungen durchgehen, so dass Sie wirklich wissen, was Sie damals gemacht haben. „Weiß ich nicht mehr“ ist definitiv die schlechteste Antwort auf Fragen.

Mechanismus

Ein zentraler Punkt in ihrem Vortrag, er sollte möglichst übersichtlich und klar dargestellt werden. Im Prinzip können Sie den Mechanismus aus dem Protokoll übernehmen, er muss aber eventuell etwas überarbeitet werden:

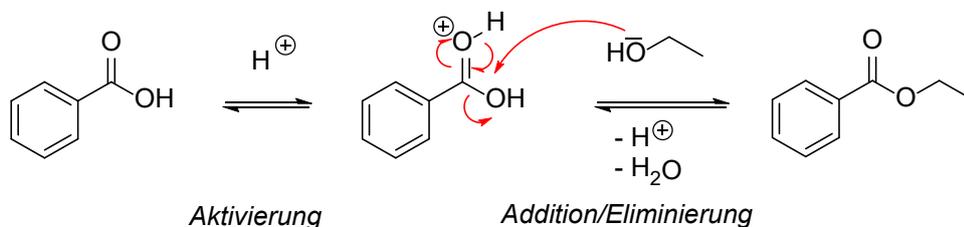
- Nutzen Sie den verfügbaren Platz möglichst gut aus. Eng gedrängte Schemata und gleichzeitig viel leerer Platz sind nicht gut.
- Falls der Mechanismus etwas länglich ist: Besser auf einer zweiten Folie weitermachen als alles zu eng quetschen. Dabei aber den Anschluss nicht verlieren: Die letzte Struktur auf der ersten Seite ist die erste auf der Folgeseite.
- Elektronenschiebepfeile in einer anderen Farbe machen alles etwas übersichtlicher.
- Machen Sie es dem Publikum nicht schwerer als es ist: Vermeiden Sie unnötige Umorientierungen zwischen 2 Schritten



Im Mechanismus kann und sollte auch auf mögliche Nebenreaktionen eingegangen werden, auf die Sie sich dann bei den „weiteren denkbaren Reaktionsprodukten“ beziehen können.

Sprechen Sie sich mit Ihren Vorrednern ab: Falls der Mechanismus prinzipiell bereits in den vorigen Vorträgen ausführlich besprochen wurde können Sie sich deutlich kürzer fassen und dafür mehr auf Besonderheiten eingehen.

Dasselbe gilt auch, wenn Ihre Reaktion aus vielen Reaktionsschritten besteht. Nicht jeden Schritt muss *en detail* besprochen werden, dafür haben Sie nicht genug Zeit, also kürzen. Aus dem ausführlichen Mechanismus im Mustervortrag würde dann:



Diskussion der (eigenen) Spektren

In der Regel sollten die gemessenen Spektren des selbst hergestellten Produkts vorgestellt werden, nur in Ausnahmefällen die Spektren aus der Vorschrift.

Bei den IR-Spektren liegt das Augenmerk – wie auch schon im Protokoll – auf charakteristischen Absorptionen der funktionellen Gruppen, manchmal auch das Verschwinden bzw. das Fehlen einer solchen Bande.

Bei NMR-Spektren wird zunächst immer das „Übersichtsspektrum“ gezeigt, also der gesamte Bereich zwischen -0.5 und etwa 9 ppm, falls Signale darüber hinausgehen, die natürlich auch. Das erlaubt die Beurteilung der Reinheit. Die Skalierung sollte so sein, dass alle Signale auch gut erkennbar sind und natürlich integriert.

Wenn alle Signale im Übersichtsspektrum gut erkennbar sind kann das zur Interpretation direkt verwendet werden (wie auf der ersten NMR-Folie in der Musterpräsentation, die ist aber schon grenzwertig) oder man zeigt es kurz und verwendet dann für die Auswertung gespreizte Ausschnitte auf weiteren Folien oder wie auf der 2. NMR-Folie in der Musterpräsentation mit Hilfe von Animationen.

Auf jeden Fall sollen alle Signalgruppen – wie schon im Protokoll – zugeordnet werden, soweit nach 1. Ordnung möglich auch mit Multiplizitäten und Kopplungskonstanten. Die chemische Verschiebung wird allgemein mit 2 Nachkommastellen angegeben, Kopplungskonstanten mit einer Nachkommastelle. Wenn die Zuordnung nicht ganz offensichtlich ist sollte auch eine kurze Erklärung gegeben werden, wie Sie dazu kommen.

Sie können nicht erwarten, dass ihr Publikum die die Strukturformel noch im Kopf hat, die muss also auf der Folie mit den Spektren auch mit abgebildet werden.

Für die Zuordnung kann wie auf der ersten Beispielfolie über Strukturfragmente erfolgen, solange das eindeutig ist. Bei komplexeren Molekülen wird durchnummeriert wie auf der 2. Beispielfolie. Durchnummeriert wird immer dabei immer die Strukturformel, nicht in der Reihenfolge der Signale (falls sinnvoll, gerne nach IUPAC). Falls Sie auch das ^{13}C -NMR-Spektrum vorstellen wollen werden alle Kohlenstoffe durchnummeriert und dieselbe Nummerierung auch für das Protonenspektrum verwendet, wenn nicht können Sie die quartären Kohlenstoffe bei der Nummerierung überspringen.

Falls Ihr Spektrum nennenswerte Signale von Verunreinigungen zeigt sollten Sie auch darauf kurz eingehen, falls nicht werden sicher Fragen dazu kommen.

Weitere denkbare Reaktionsprodukte

Die „weiteren denkbaren Reaktionsprodukte“ sollten auch im Vortrag kurz angesprochen werden, insbesondere der Ausschluss über die Spektren. Für eine tiefere Diskussion wird die Zeit vermutlich nicht reichen.

Betrachten Sie die Studentenvorträge unter zwei Aspekten: Sie sind eine gute Wiederholung der gängigen Reaktion in der organischen Chemie und sie sind eine Übungswiese zum Vortragen – und Sie werden noch viele Vorträge halten müssen (oder dürfen).

Auch die anschließende Diskussion gehört zu einem Vortrag, sie ist ein Teil der Wissenschaftskultur. Ein Vortrag ohne Fragen bedeutet meist, dass Sie das Publikum nicht mitgenommen haben

Gute Vorträge sind Anregungen für die eigene Präsentation, aus schlechteren kann man zumindest lernen, was man besser vermeiden sollte.

Für alle, die einen frühen Vortragstermin abkommen haben: Vorträge sind Übungssache und das wissen auch die Dozenten. Die ersten Vorträge werden deshalb in der Regel nicht übermäßig „zerpflückt“, es wird eher konstruktive Kritik für die nachfolgenden Vorträge.