

**Determination:**

**IR:**

Kein -NH / -OH / -COOH etc.

Keine Dreifachbindungen

3200-2800  $\text{cm}^{-1}$  : C-H Streckschwingungen,  $\text{sp}^2$  und  $\text{sp}^3$

1720  $\text{cm}^{-1}$  : C=O Doppelbindung

**MS:**

Molekülmasse 99-101, da Intensitätsverteilung nicht eindeutig

→ MS erst später betrachten

### **<sup>13</sup>C-NMR:**

166 ppm → Cq, wahrscheinlich Carbonsäurederivat

130 ppm → -CH<sub>2</sub>, sp<sup>2</sup> hybridisiert

128 ppm → -CH, sp<sup>2</sup> hybridisiert

60 ppm → -CH<sub>2</sub>, sp<sup>3</sup> hybridisiert, an Heteroatom (O,N) gebunden

14 ppm → -CH<sub>3</sub>, sp<sup>3</sup> hybridisiert

Fazit: C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O mit m = 84

Δm zu MS-Werten für Molekülion: 15/16/17

→ 100 wahrscheinlich Molekülmasse; mit einem weiteren O kommt man auf: C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>, m = 100

### **MS – Teil 2:**

100 – 85 → Δm = 15 → -CH<sub>3</sub>

100 – 82 → Δm = 18 → H<sub>2</sub>O

100 – 73 → Δm = 27 → -C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>

Fazit: Annahme der Molekülmasse 100 erscheint sinnvoll

Doppelbindungsäquivalente: 2 DBÄ im Molekül

### <sup>1</sup>H-NMR:

6.4 ppm: 1H (J = 2 Hz, 18 Hz), Duplett von Duplett

6.1 ppm: 1H, (J = 11 Hz, 18 Hz), Duplett von Duplett

5.8 ppm: 1H, (J = 2 Hz, 11 Hz), Duplett von Duplett

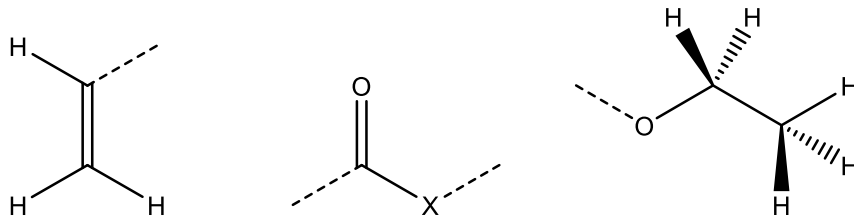
-> wahrscheinlich einfach substituierte Doppelbindung (in Summe drei verschiedene Kopplungskonstanten, die miteinander korrespondieren), Verschiebung bei 6 im allylischen Bereich, Dacheffekt

4.2 ppm: 2H (J = 8 Hz), Quartett

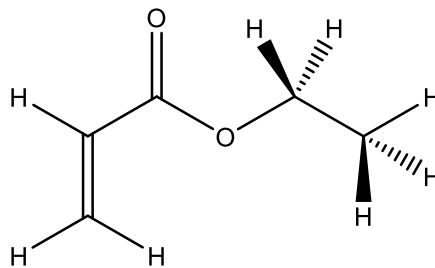
1.3 ppm: 3H (J = 8 Hz), Triplett

-> wahrscheinlich Ethylgruppe, mit -CH<sub>2</sub> an Sauerstoff gebunden

### Drei Fragmente:



Eine Möglichkeit zum Zusammensetzen ergibt:



**Validierung:**

**IR:**

1640  $\text{cm}^{-1}$  und 1620  $\text{cm}^{-1}$  : konjugierter C=C DB-Bereich

1700  $\text{cm}^{-1}$  und 1730  $\text{cm}^{-1}$  : C=O Streckschwingung bei Estern

**MS:**

100 – 55 ->  $\Delta m = 45$  : Ethoxygruppe

100 – 45 ->  $\Delta m = 55$ : Molekül ohne Ethoxygruppe

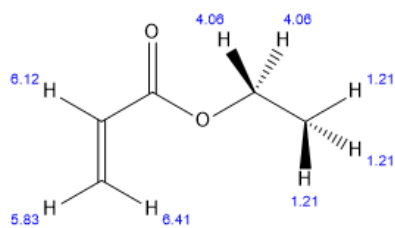
$m = 29$ : Ethylgruppe

$m = 27$ : Doppelbindungsgruppe

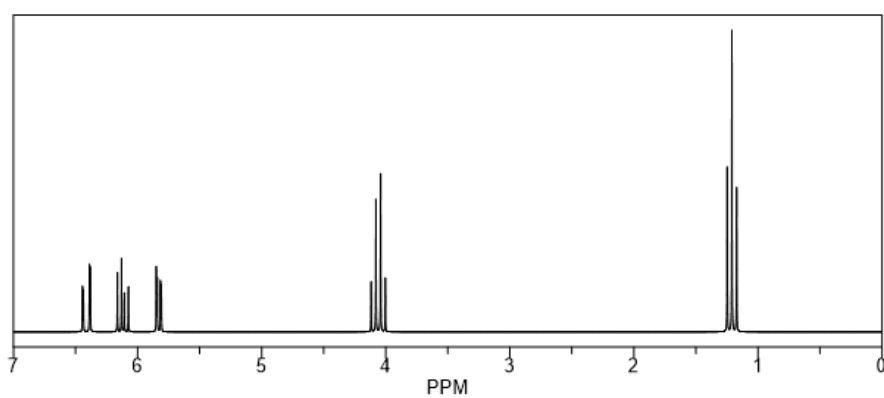
$m = 99$ ? -> Verlust eines Protons an der  $\text{CH}_2$ -Gruppe, wird durch O stabilisiert

## NMR – Simulation:

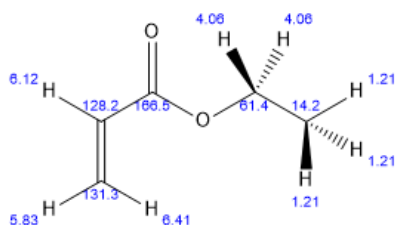
### $^1\text{H-NMR}$ :



Estimation quality is indicated by color: **good**, **medium**, **rough**



### $^{13}\text{C-NMR}$ :



Estimation quality is indicated by color: **good**, **medium**, **rough**

