

# Übung V31

## IR:

$\sim 3000 \text{ cm}^{-1}$	CH st.	
2400-3300 $\text{cm}^{-1}$	OH (verbrückt) st.	] -COOH
3500 $\text{cm}^{-1}$	OH (frei) st.	
1720 $\text{cm}^{-1}$	C=O st.	

Sperrgebiete  $\text{CHCl}_3$ :

3000-3050  $\text{cm}^{-1}$ , 2300-2400  $\text{cm}^{-1}$ , 1180-1260  $\text{cm}^{-1}$ , 660-820  $\text{cm}^{-1}$

## MS:

$M^+$  **166**

166-121 = 45

121-91 = 30

91, 77, 65, 51, 39 Benzolaromat ( $\text{C}_7\text{H}_7^+$ , ...)

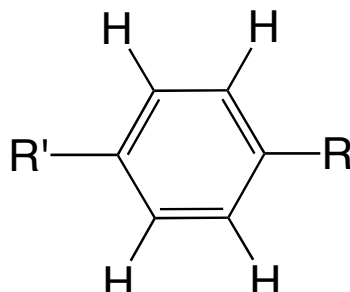
# Übung V31

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

	DEPT	chemische Verschiebung
178.4 ppm	C	C=O    -CO-X (X=OH, O, N, Cl)
158.9 ppm	C	Aromat
130.4 ppm	CH	
125.3 ppm	C	
114.1 ppm	CH	
55.2 ppm	CH <sub>3</sub>	-(O)-CH <sub>3</sub>
40.2 ppm	CH <sub>2</sub>	

$\geq 7 \text{ C} ; \geq 7 \text{ H}$

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

	Int.	Mult.	
11.2 ppm	1	S (br.)	-OH
7.18 ppm, 6.85 ppm	4	AA'BB' oder 2x D(m)	
3.75 ppm	3	S	-CH <sub>3</sub>
3.6 ppm	2	S	-CH <sub>2</sub>

$\geq 10 \text{ H} \rightarrow ^1\text{H} + ^{13}\text{C}$  (Verdoppeln von 2x CH)  $\rightarrow \geq 9 \text{ C} ; \geq 10 \text{ H}$

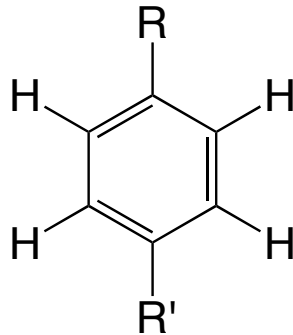
# Übung V31

## Fragmente:

-COOH

-CH<sub>2</sub>-

-CH<sub>3</sub>



## Summenformel:

C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>

150

+ 16



C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>3</sub>

166

aber: M<sup>+</sup> = 166

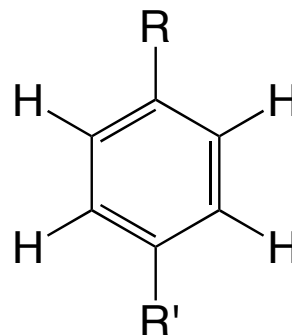
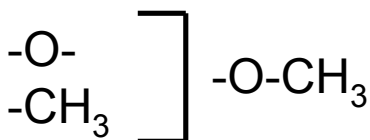
5 DBE

(Benzolring: 4; 1 x C=O)

## Fragmente:

-COOH

-CH<sub>2</sub>-

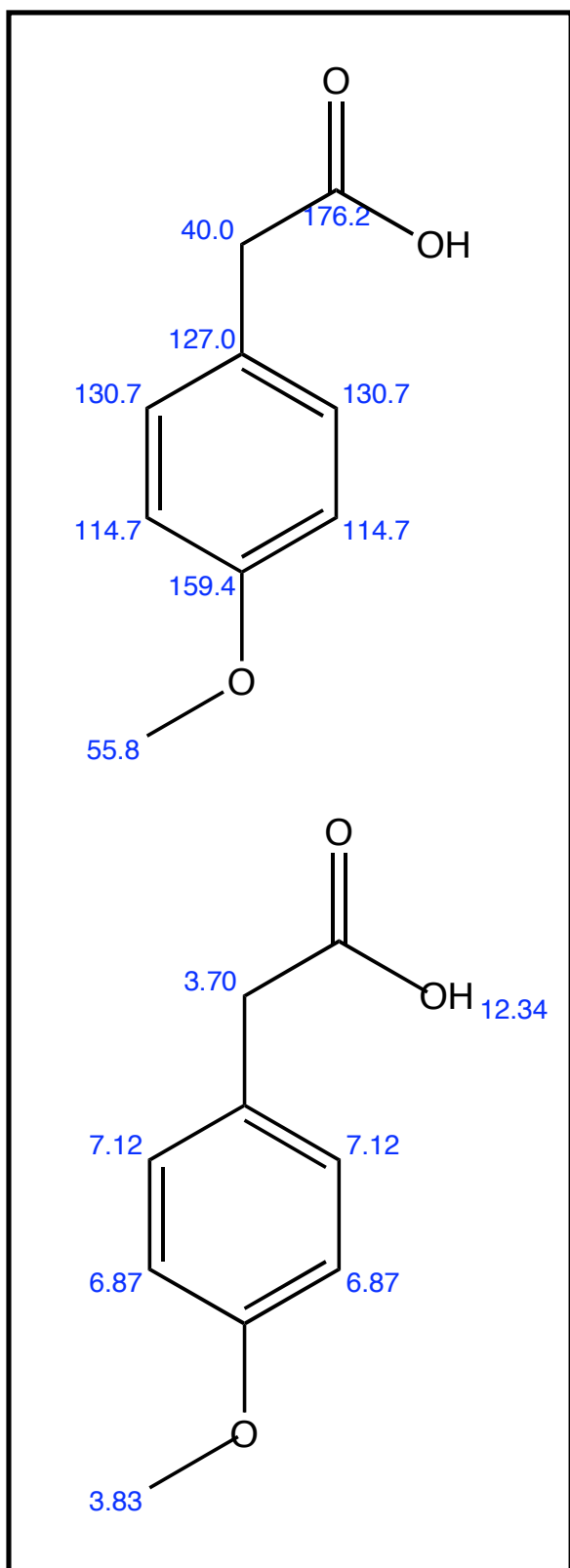


-O-CH<sub>3</sub> aufgrund der chemischen Verschiebung der CH<sub>3</sub>-Gruppe.

-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub> kann wegen der fehlenden Kopplungen im <sup>1</sup>H-NMR ausgeschlossen werden.

# Übung V31

**Struktur:**



**Alternative:**

Kann aufgrund der chem. Verschiebungen ausgeschlossen werden.

