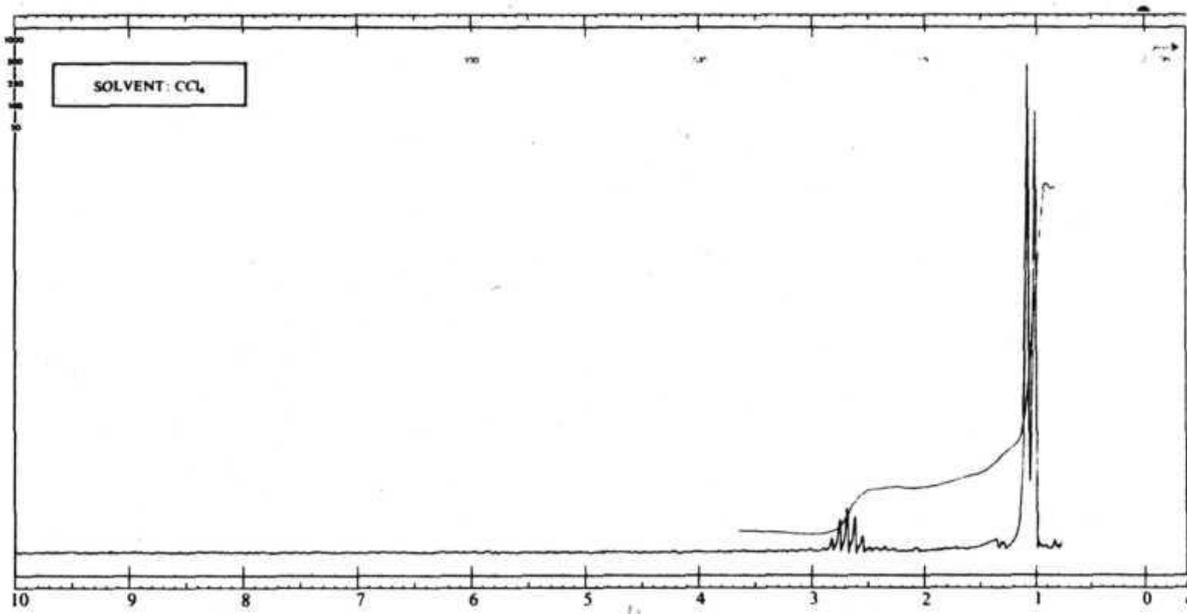
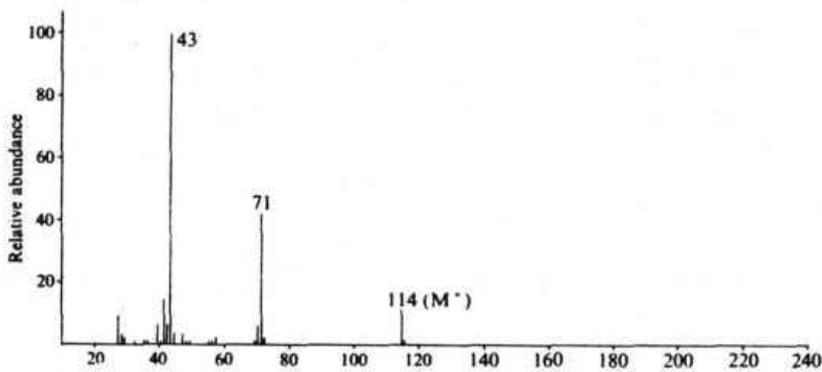


Übung: Kombinierte Spektren



Weitere Messdaten:

NMR: Flächen → 1:6, Dublett bei 1.1 ppm, Septett bei 2.7 ppm

IR: Ausgeprägte Schwingung bei 1700 cm⁻¹

Struktur der Verbindung?

IR: Offenbar C=O Valenzschwingung

Massenspektrum: 43 oft CH₃CH₂CH₂/CH₃CO/CH(CH₃)₂

71 = 114 (Molekülmasse) - 43

28 (Differenz zwischen 71 und 43) → CH₃CH und CO sind 28 (ungeladenes Bruchstück)

NMR: 6 identische Protonen (auch 12 möglich), ein weiteres Proton (auch 2 möglich).

6 identische erreicht man mit 2 CH₃ Gruppen. Das Dublett bei 1.1 ist gemäss Tabelle auf CH₃-Protonen zurückzuführen.

Folge: Mindestens zwei CH₃-Gruppen mit Masse total 30 und eine CO mit 28u, das sind 58u. So wird Molekülmasse nicht erreicht. Das doppelte wäre 116u, also zu viel. Nehmen wir eine CO-Gruppe weg, kommen wir auch 88 u und es fehlen noch 26 u. Es fehlen ja auch noch ein oder zwei H-Atome, die evtl. je an ein weiteres C-gebunden sind. CH wäre 13 u, zweimal das 26 u. Möglich wäre also (CH₃)₂CHCOCH(CH₃)₃