

Pentadecen-1 (neu und alt):

Hier handelte es sich um Kohlenwasserstoffe, deren Spektren bereits unter großen Schwierigkeiten erzielt werden und die meistens nicht vollständig sind. Dies gilt auch für die Spektren der beiden hier vorliegenden Proben. Hervorzuheben ist die Tatsache, daß die als "alt" bezeichnete Probe ein schlechteres Spektrum ergibt, als die mit "neu" bezeichnete Probe. Aus diesem Grunde sind die nachfolgenden Schlüsse etwas unsicher.

Der einzige Unterschied, der sich aus den beiden Spektren ableiten läßt, sind die Linien, 1376 bzw. 1369  $\text{cm}^{-1}$ . Während im Spektrum "neu" diese Linie kaum sichtbar ist (Intensität 0?) ist sie im Spektrum "alt" so stark wie die Linie 1410. Wie bereits bei der Besprechung des Spektrums einer früheren Pentadecen-1 Probe betont wurde, sprechen die Linien bei 950, 1330 bzw. 1370  $\text{cm}^{-1}$  für Verzweigung. Diesen Befund haben wir inzwischen durch die Untersuchung zahlreicher verzweigter  $\alpha$ -Olefine noch weiter erhärten können, besonders auch durch die Messung Ihrer Proben. Nun ist die Möglichkeit gegeben, daß diese Verzweigung erst entsteht durch Polymerisation; so wäre auch der frühere Befund zu erklären. Es würde mich interessieren zu hören, wie diese Erklärung von Ihnen beurteilt wird. Vor allem würde ich gerne hören, welche Produkte wahrscheinlich bei dieser Polymerisation entstehen können. Auf Grund der Frequenz der fraglichen Linie bei 1370  $\text{cm}^{-1}$  erscheint der Schluß berechtigt, daß die Verzweigung in unmittelbarer Nähe der Doppelbindung liegt.

3,6-Dimethylhepten-1:

Die Spektren der drei Proben zeigen untereinander große Übereinstimmung in den intensiveren Linien, sodaß daraus der Schluß gezogen werden darf, daß alle drei Proben der Hauptmenge nach aus dem gleichen Kohlenwasserstoff bestehen. Aus den Linien, die sämtlichen Proben gemeinsam sind, ergibt sich mit großer Wahrscheinlichkeit das Spektrum von 3,6-Dimethylhepten-1. Dieses stimmt sehr gut mit den Erwartungen für einen derartigen Kohlenwasserstoff überein. So besitzt es die charakteristischen Linien für eine endständige Doppelbindung mit Verzweigung am C-Atom 3 (672, 915, 985, 1300, 1418, 1642, 2999 und 3082  $\text{cm}^{-1}$ ), weiterhin die charakteristischen Linien für eine Verzweigung am C-Atom 3 (966, 1150, 1378  $\text{cm}^{-1}$ ) und an einem höheren C-Atom (957, 1170, 1335  $\text{cm}^{-1}$ ),

T a b e l l e

Pentadecen-1

"alt"

Smp. 3,05°  
("heu")

	551(0)
	589(0)
	626(0)
	737(0)
	830(1)
895(1)	909(7)
	993(0)
1073(2b)	1064(6)
	1084(8)
1126(1)	1125(4)
	1160(2)
1300(5)	1301(15b)
1369(1)	1376(0)?
1410(1)	1417(4)
	1457(6)
1642(4)	1643(7)
2716(0)	2724(1)
2851(8)	2852(20)
2891(7b)	2893(15)
2928(4)	2930(10)
2961(0)	2955(8)
3001(2)	2998(5)
3030(1)	3078(5)

neben den allgemeinen Linien für Kohlenwasserstoffe (1440, 1460, 2720, 2850, 2900, 2930, 2960). Außerdem sprechen die Linien 750 und 793  $\text{cm}^{-1}$  für Verzweigungen und die Linie 1116  $\text{cm}^{-1}$  für einen Kohlenwasserstoff mit 9 C-Atomen.

Was nun die Reinheit der einzelnen Proben anlangt, so kann mit Sicherheit aus der zusätzlichen Linie 1671  $\text{cm}^{-1}$  in der Probe "techn. II" der Schluß gezogen werden, daß diese Probe noch mit einem Kohlenwasserstoff verunreinigt ist und zwar schätzungsweise mit 20 - 30 %. Diesem gehören u.a. wahrscheinlich die Linien 368(2), 489(2), 658(0), 1017(1) und 1671(4) an. Aus der Lage der Doppelbindungslinie kann der Schluß gezogen werden, daß es sich entweder um ein trans-Olefin oder um ein dreifach, bezw. vierfach substituiertes Methylenderivat handelt. Wahrscheinlich liegt 3,6-Dimethylhepten-2 vor, durch Verlagerung der Doppelbindung entstanden.

Da in der Probe "synth." noch einige Linien mehr wie in "techn. I" enthalten sind, (389(1), 458(2), 650(1), 748(2)), so besteht der Verdacht, daß auch dieser Kohlenwasserstoff noch verunreinigt ist. Dieser Beweis kann jedoch nicht mit Sicherheit erbracht werden. Liegt eine Verunreinigung vor, so kann es sich nur um einen Kohlenwasserstoff handeln mit endständiger Doppelbindung, der sich in der Verzweigungsart vom 3,6-Dimethylhepten-1 unterscheidet, also etwa 4,6-Dimethylhepten-1 zum Beispiel. Eine derartige Verunreinigung kann auch nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden für die Probe "techn. I".

Mit Sicherheit können in beiden Proben Verunreinigungen ausgeschlossen werden mit nicht endständiger Doppelbindung, natürlich innerhalb der Fehlergrenze von schätzungsweise 3-5 %. Mit einem ähnlichen Fehler läßt sich auch die Anwesenheit eines Kohlenwasserstoffes mit endständiger Doppelbindung und Methylgruppe am C-Atom 2 ausschließen.

## T a b e l l e

## 3,6-Dimethylhepten-1

synth.	techn. I	techn. II	Mittel
180(3)	178(3)	173(2)	177(3)
252(3)	251(6)	245(2)	249(4)
289(2)	293(4)	291(2)	291(3)
343(1)	341(4)		342(2)
		368(2)	
389(1)			
427(5)	425(6)	426(3)	426(5)
458(2)			
	480(1)	489(2)	476(1)
542(1)d?	531(1)	523(0)	534(1)
601(1)	598(0)	612(1)	604(1)
650(1)		653(0)	
682(2)	681(2)	689(0)	684(2)
743(2)d?	756(00)	745(1)	750(1)
792(4)	794(4)	792(3)	793(4)
		812(2)	
836(5)	835(3)d	839(5)	837(6)
871(2)	871(1)	877(1)	873(1)
913(5)d?	916(3)d	913(5)	914(6)
953(5)	959(4)	958(4)	958(4)
994(3)	993(4)	994(3)	994(3)
		1017(1)	
1035(2)	1036(4)	1037(3)	1036(3)
1071(2)	1072(2)	1070(2)	1071(2)
1115(3)	1120(6)	1114(4)	1116(4)
1150(2)	1148(4)	1143(3)	1147(3)
1130(2)	1171(3)	1177(3)	1176(4)
1222(2)	1225(3)	1221(3)	1223(3)
1243(1)	1250(2)	1246(0)	1248(1)
1293(8)	1293(20)	1296(8)	1294(12)
1317(3)	1312(4)	1311(1)	1313(3)
1337(4)	1336(4)	1342(5)	1333(4)
1375(2)	1372(2)	1377(3)	1375(2)
1420(4)	1416(5)	1420(4)	1419(4)
1446(8)	1447(12)	1446(7)	1446(9)
1466(8)	1461(20)	1466(8)	1464(12)
1641(9)	1641(15)	1642(7)	1641(10)
		1671(4)	
2714(4)	2720(5)	2714(4)	2716(4)
2759(1)	2762(0)	2762(1)	2761(1)
2849(10)	2851(7)	2850(7)	2850(3)
2889(20)	2871(12)	2873(20)	2873(17)
2906(5)	2910(2)		2903(4)
2926(7)	2932(6)	2925(6)	2929(6)
2960(15)	2961(10)	2963(15)	2961(13)
2995(3)	2996(7)	3000(7)	2997(7)
3032(5)	3032(6)	3031(5)	3032(5)