

# Lösung von Beispiel Z 08

## 1. IR Spektrum:

3400 cm <sup>-1</sup>	N–H str. (frei)
3200 cm <sup>-1</sup>	N–H (verbrückt, breite Bande)
≈ 3000 cm <sup>-1</sup>	C–H str. (stark strukturiert)

1790 cm <sup>-1</sup>	ev. C=C?	} Amid I / II ?
1730 cm <sup>-1</sup>	C=O str.	
+ Schulter bei 1710 cm <sup>-1</sup>		

Keine weiteren Hinweise auf andere Funktionalitäten  
Kein O–H, Aromat, Dreifachbindungen

Sperrgebiete!

## 2. Massenspektrum:

$$\begin{aligned} m/z = 151 = M^+ \quad \text{OK} & \Rightarrow 1 \text{ N} \\ 152 \approx 9.7\% & \Rightarrow 8 - 9 \text{ C} \end{aligned}$$

$$\Delta m = 28 \rightarrow 123 \quad (\text{CO}, \text{C}_2\text{H}_4, \dots)$$

$$\Delta m = 71 \rightarrow 80$$

$$\Delta m = 72 \rightarrow 79$$

$$m/z = 79 \text{ (Basispeak)}, 80 ?$$

Unterer Massenbereich ?

### 3. $^{13}\text{C}$ NMR-Spektrum

$\delta$ (ppm) =	180	127	40	23
	C=O	HC=C?	CH   X	CH <sub>2</sub>

C=O Gruppe: kein Keton (Ester, Amid, ...)

X = C=O oder N?

mindestens  $\text{C}_4\text{H}_4\text{NO}$

### 4. $^1\text{H}$ NMR-Spektrum

$\delta$ (ppm) =	8.7	5.9	3.1	2.6
	2.2			
Integral	1	2	2	2
Multiplizität:	breit N-H	$\approx$ T	Dxm	Dxm
			Dxm	Dxm

mindestens  $\text{C}_7\text{H}_9\text{NO}$

### 5. H-H COSY



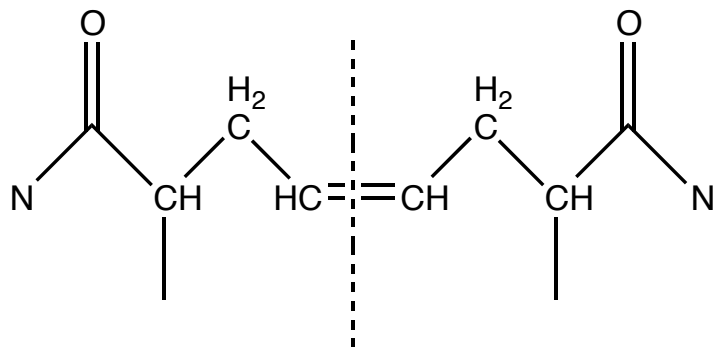
### 6. Summenformel:

$\text{C}_7\text{H}_9\text{NO} = m/z$  123 + 28 = 151 (+  $\text{N}_2$ , CO)

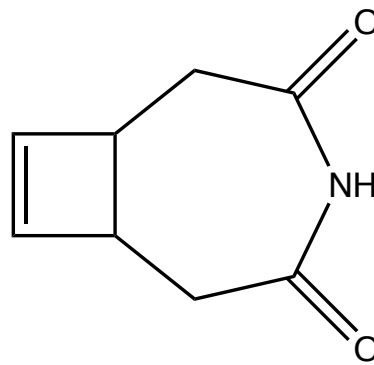
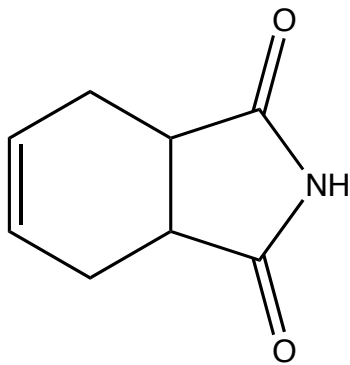
$\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$  (DBE = 5,  $2 \times \text{C}=\text{O}$ ,  $1 \times \text{C}=\text{C}$ , 2 Ringe)

$C_7H_9N_3O$  (DBE = 5, 1x $C=O$ , 1x $C=C$ , 3 Ringe)

### 7. Strukturelemente:

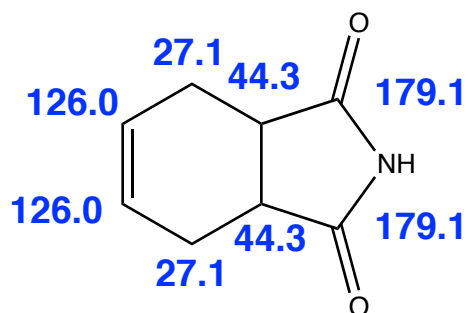


.... 2 Ringe

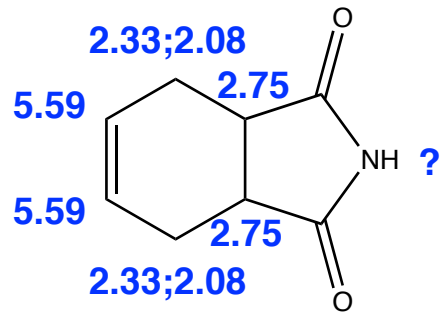


### 8. Verifizierung:

Simulation der  $^{13}C$  NMR Verschiebungen:



Simulation der  $^1\text{H}$  NMR Verschiebungen:



MS-Fragmentierungen:

