

Lösung von Beispiel Z 07

1. IR Spektrum:

$\approx 3000 \text{ cm}^{-1}$ C–H str. (stark strukturiert)

1530 cm^{-1} NO₂ str. (asymm)

1350 cm^{-1} NO₂ str. (symm)

Keine deutlichen Hinweise auf andere Funktionalitäten
Kein O–H, N–H, C=O

Sperrgebiete!

2. Massenspektrum:

$m/z = 194 = M^+$ i.O. ($\Rightarrow 2 \text{ N}$, 1 von NO₂ Gruppe)

$195 \approx 14\% \Rightarrow \text{max. } 13 \text{ C}$

$196 \approx 1.5\%$

$\Delta m = 16 \rightarrow 178$ (sehr selten!, z.B. Abspaltung von O aus aromatischen Nitroverbindungen)

$\Delta m = 46 \rightarrow 148$ (Verlust von NO₂)

$\Delta m = 44 \rightarrow 150$ (z.B. Verlust von CO₂, CH₂CH₂O, ...)

$m/z = 73$?

Unterer Massenbereich ?

3. ^{13}C NMR-Spektrum

$\delta(\text{ppm}) =$	148	140	132	129	123	121	102	65
			CH	CH	CH	CH	CH	CH_2
	——Aromat. Bereich——						X	Y

Y = vermutlich O

X = ? (keine Dreifachbindung: s. IR; ev 2x O ?)

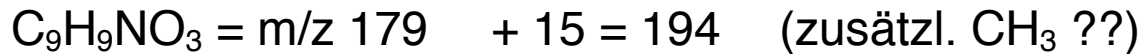
mindestens $\text{C}_8\text{H}_7\text{NO}_2$

4. ^1H NMR-Spektrum

$\delta(\text{ppm}) =$	8.35	8.2	7.8	7.6	5.9	4.1
Multiplizität:	$\approx t$	2x4	2xt	$\approx T$	S	m
Integral	1	1	1	1	1	4
	Aromat. System				CH	$2x\text{CH}_2$
	Kopplungen: <i>m</i> -Substitution					
					X	O

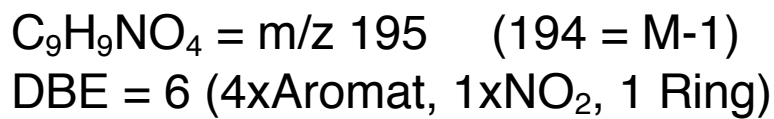
mindestens $\text{C}_9\text{H}_9\text{NO}_3$

5. Summenformel:



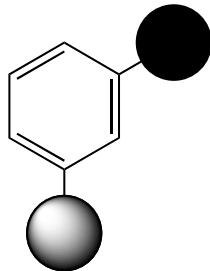
Andere Möglichkeiten / Hinweise:

- 195 "zu stark" im MS
- 194 hätte eine gerade Anzahl N
- NMR-Verschiebungen verlangen nach mehr O



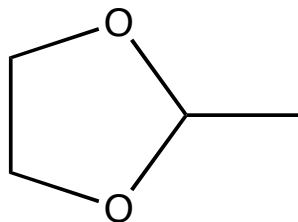
6. Strukturelemente:

Substitutionstyp Aromat



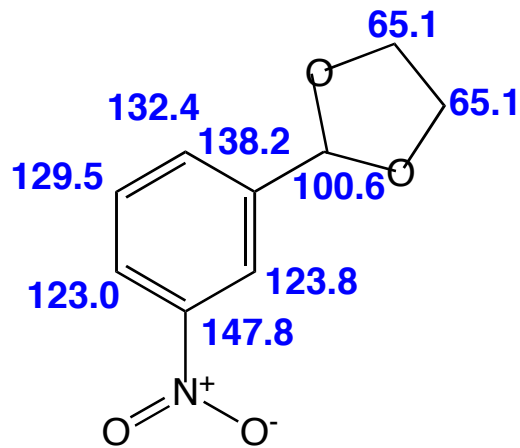
+ NO₂ Gruppe

+ Ring aus –O–CH–O– und 2x CH₂ (stark gekoppelt, beide an einen O gebunden):

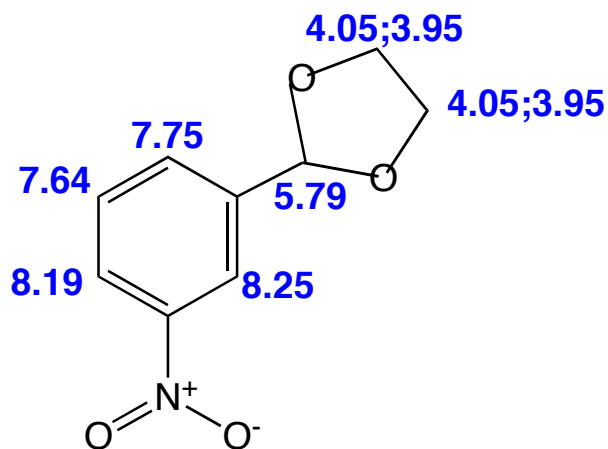


7. Verifizierung:

Simulation der ^{13}C NMR Verschiebungen:



Simulation der ^1H NMR Verschiebungen:



+ Kopplungsmuster. $\text{CH}_2\text{-CH}_2$ ist ein AA' BB' System

MS-Fragmentierungen:

