

Y 27

MS: $M^{+\cdot} = 117$ oder 118 möglich

39 51/53 63/65 75 91 Benzolaromat ?

MS vorerst wenig ergiebig

IR:	3500 cm^{-1}	N—H_{st} von NH₂
	3400	
	3300	C—H_{st} von Acetylen
	3220	?
	~ 3000	C—H_{st}
	2100	C≡C_{st}
	1880	Benzolfinger ?
	1660	Benzolfinger ?
	1610	NH_{def} von NH₂
	1620	Gerüstschwingungen Arylring ?
	1600	
	1510	

^{13}C -NMR:


147.0	133.5	114.6	111.4	84.4	74.9	ppm	
C	CH	CH	C	C	CH		$\geq 6 \text{ C}$
				$-\text{C}\equiv\text{CH}$			$\geq 3 \text{ H}$
							$\geq 1 \text{ N}$

Vorsicht bei Acetylenen:

$${}^2J_{\text{C-H}} \sim 50 \text{ Hz (statt } \sim 5 \text{ Hz)} \quad {}^1J_{\text{C-H}} \sim 250 \text{ Hz (statt } \sim 150 \text{ Hz)}$$

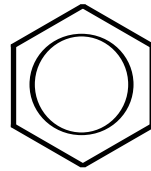
DEPT- und HSQC-Spektren sind mit Vorsicht zu geniessen.

^1H -NMR:

	7.3	6.5	3.8	3.0	ppm
\int	2	: 2	: 2	: 1	7 H
					

Bilanz:	8 C	96	
	7 H	7	
	1 N	14	
	<hr/>		
	total	117	$\hat{=} \text{M}^{+\cdot}$

Summenformel: $C_8H_7N \Rightarrow 6 \text{ DBÄ}$

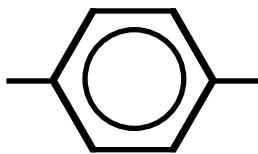


$C \equiv C$

4

2

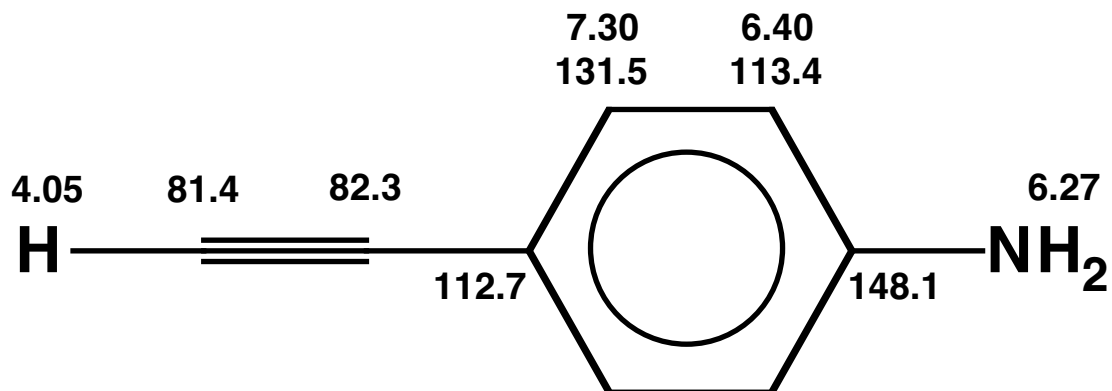
Fragmente:



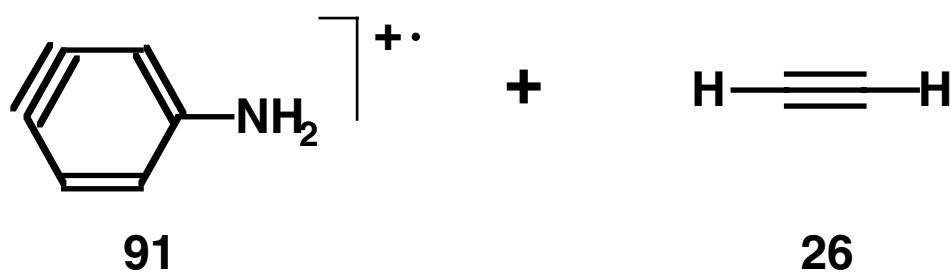
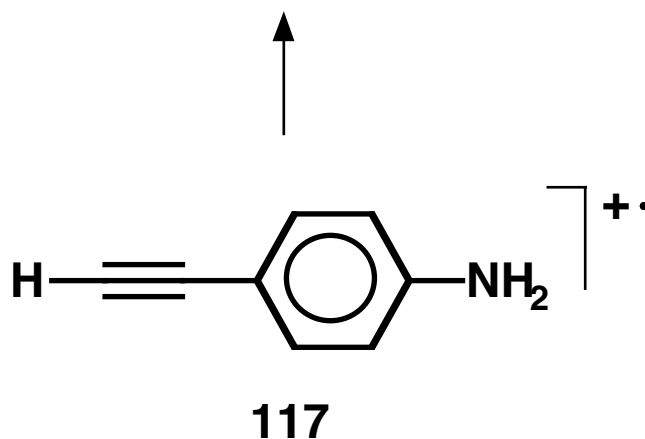
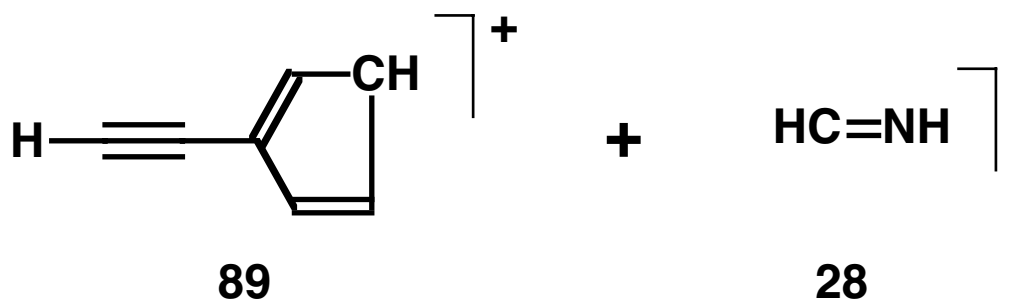
$-C \equiv CH$

$-NH_2$

Konstitution:



MS:



IR: 3220 Kombinationsschwingung
typisch für Aniline

1880 Benzolfinger
1660