

# Y37

a)

Zuordnung der wichtigsten Banden im IR-Spektrum:

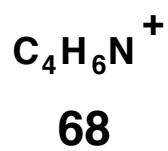
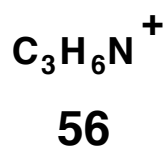
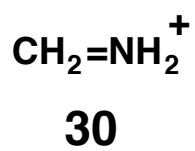
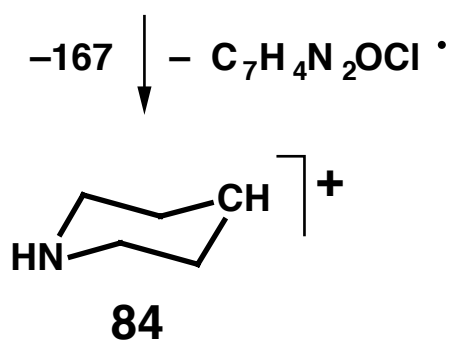
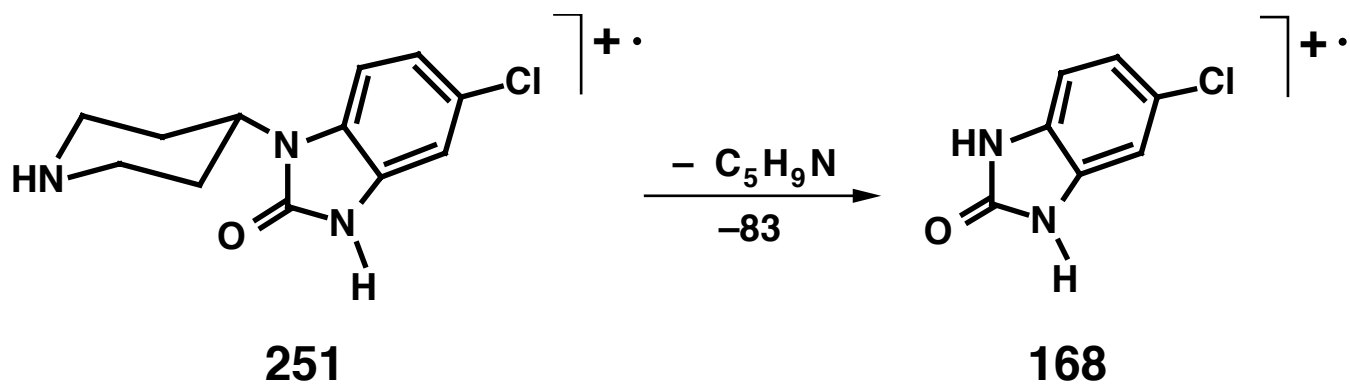
>3600	Spur Wasser
3360	N–H st frei
3300-2400	N–H st assoziiert
3030	Sperrgebiet
2950	C–H st
1700	C=O st
1620	
1600	Gerüstschwingungen Aromat
1480	

zu Y37b:

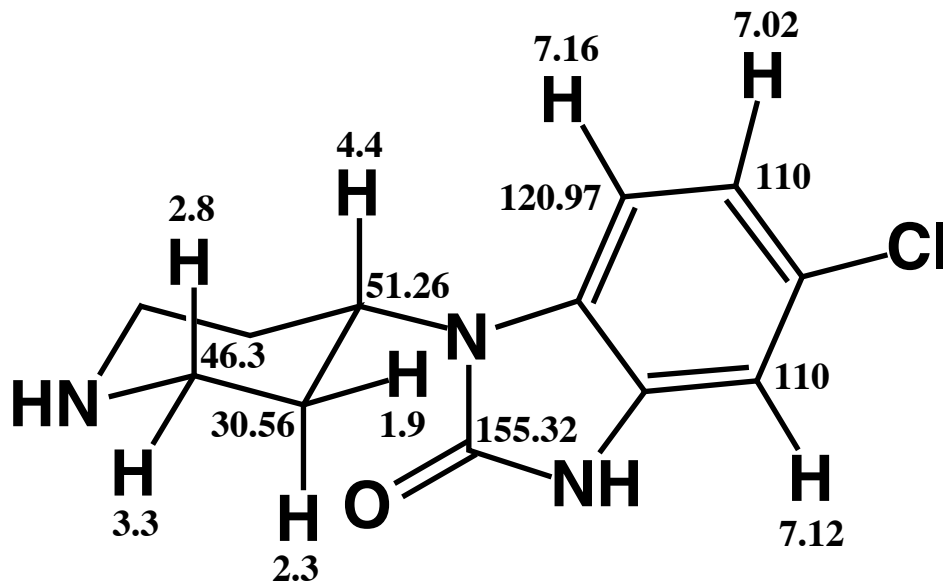
Allenfalls zusätzliche Bande bei 3600 durch O–H st frei.

Statt starke Bande bei 1700 neu bei 1600 durch C=N st.

b)

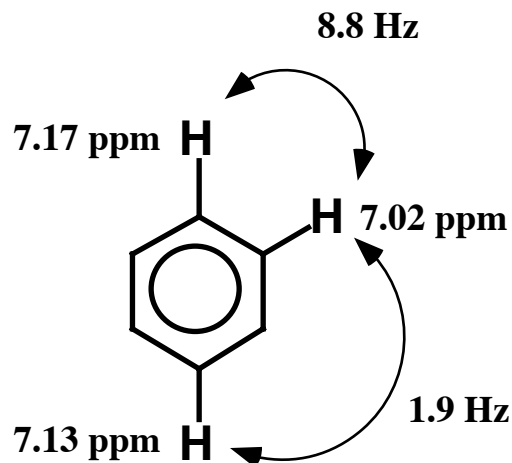


c)



Die beiden austauschbaren Protonen erscheinen nicht im Spektrum. Dies ist sehr ungewöhnlich. Offenbar sind die Signale so breit, dass sie bei der Bearbeitung des Spektrums wegkorrigiert wurden.

Die aromatischen Protonen zeigen das typische Aufspaltungsmuster eines 1-,2-,4-substituierten Benzols.



Die beiden para-ständigen Protonen spalten jeweils in ein Dublett mit deutlich unterschiedlichen Kopplungskonstanten auf. Das Signal des verbleibenden Protons zeigt beide Kopplungen und erscheint als Dublett von Dublett.

**d)**

Siehe Figur unter c).

**Bemerkung zum HSQC:** beim Signal mit der höchsten chemischen Verschiebung auf der Protonen-Achse handelt es sich um das undeuterte Chloroform.

**e)**

**IR:** Breite Bande von 3500 bis 2000 durch die N–H st.

**MS:** Im wesentlichen keine Änderung. Man sieht eine Überlagerung der freien Base mit der freien Säure. Allenfalls erscheinen zusätzlich die Signale bei  $m/z$  36 und 38 im Verhältnis 3:1 durch HCl.

**H-NMR:** Ein zusätzliches austauschbares Proton sollte erscheinen (zusätzlich zu den beiden wegkorrigierten). Geringfügige Vergrößerungen der chemischen Verschiebungen im Bereich der aliphatischen Protonen.

**C-NMR:** Geringfügige Vergrößerungen der chemischen Verschiebungen im aliphatischen Bereich.