

**Wirkstoff:** Agomelatin

**CAS-Nr.:** 138112-76-2

**Summenformel:** C<sub>15</sub>H<sub>17</sub>NO<sub>2</sub>

**Molare Masse:** 243,3 g/mol

**Charge:** E155a

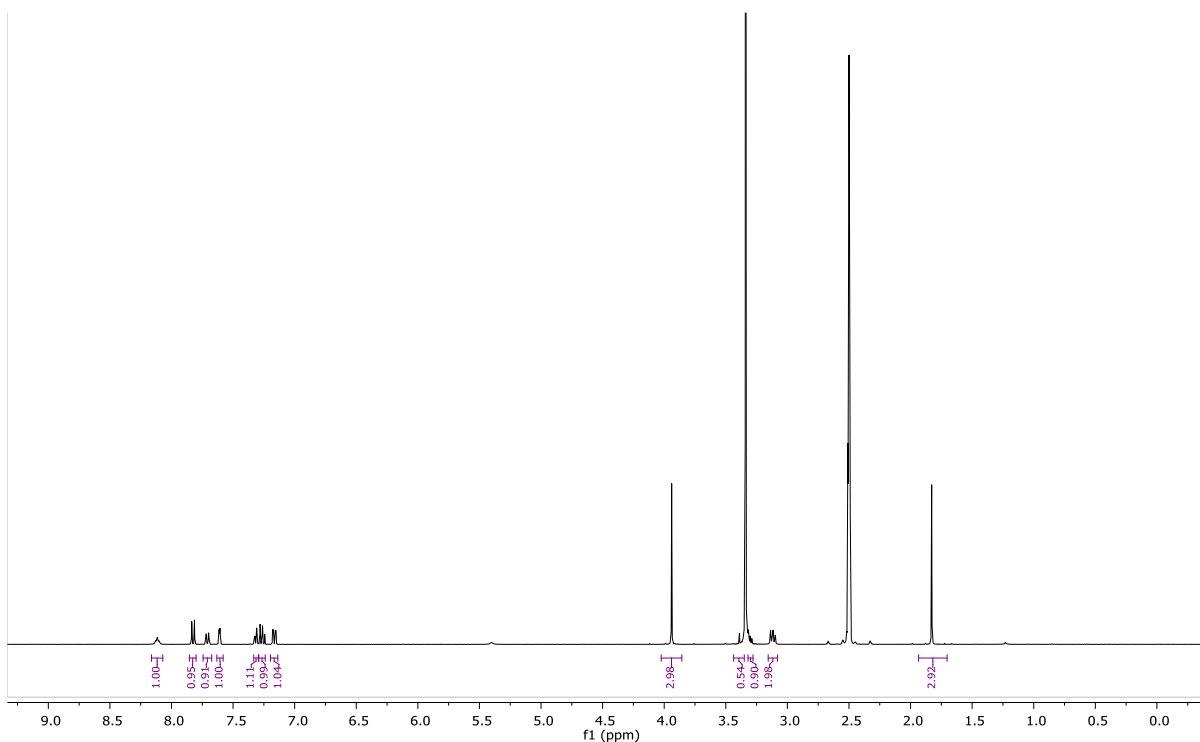
**Herstellungsdatum:** 12.12.2022

## Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes bis fast weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): <i>m/z</i> : 244,1 [M+H <sup>+</sup> ]	MS(ESI): <i>m/z</i> : 244,0 [M+H <sup>+</sup> ]

## <sup>1</sup>H-NMR Spektrum:

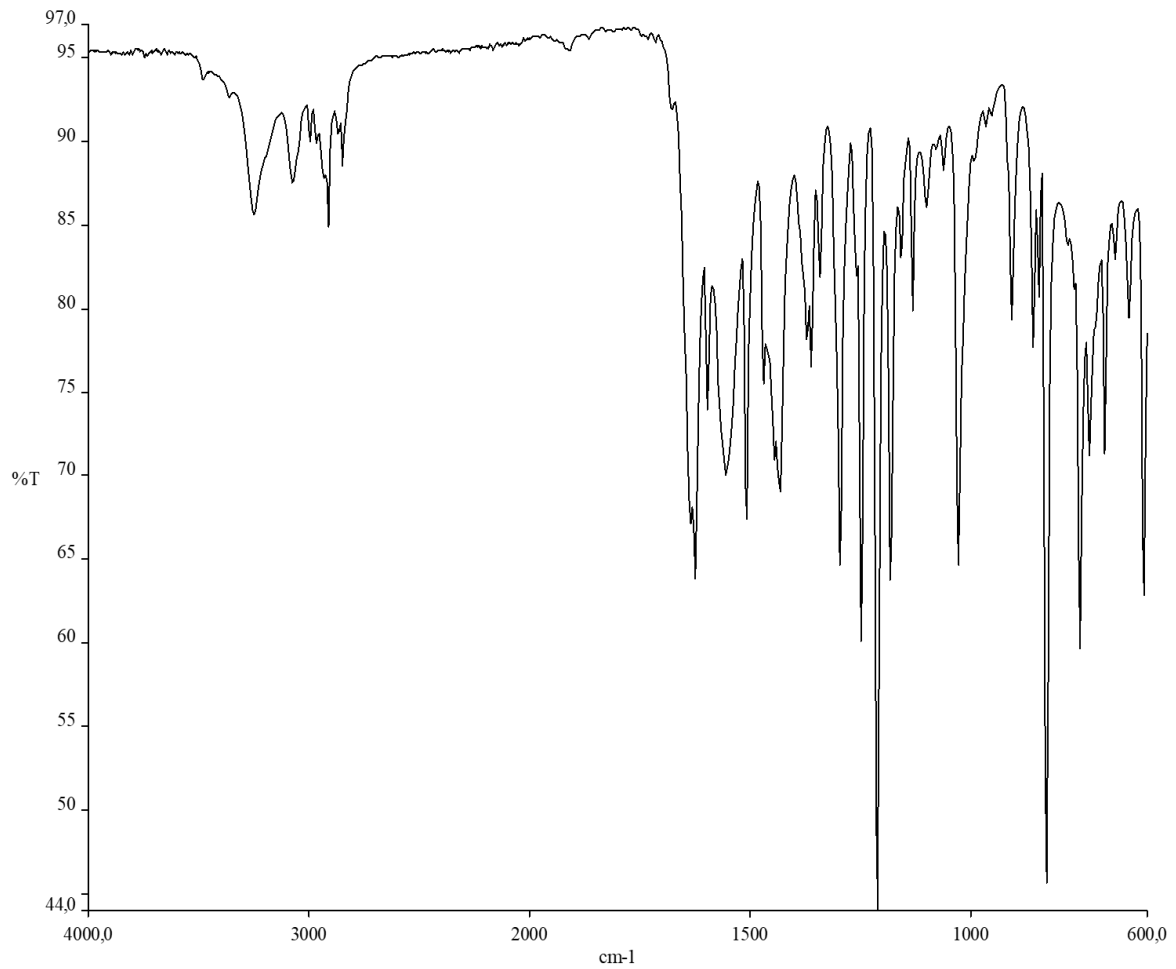
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (<sup>1</sup>H: 400 MHz) Spektrometer



<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>) δ 8.12 (t, J = 5.7 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 8.9 Hz, 1H), 7.71 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.61 (d, J = 2.5 Hz, 1H), 7.32 (dd, J = 7.0, 1.5 Hz, 1H), 7.26 (dd, J = 7.9, 7.0 Hz, 1H), 7.17 (dd, J = 8.9, 2.5 Hz, 1H), 3.94 (s, 3H), 3.41 – 3.35 (m, 1H), 3.32 – 3.28 (m, 1H), 3.12 (dd, J = 9.3, 6.2 Hz, 2H), 1.83 (s, 3H).

## IR Spektrum:

gemessen mit einem FT-IR Spektrometer (Spectrum BX) mit ATR-Technik von  $600\text{-}4000\text{cm}^{-1}$



## Analytische HPLC:

Phenomenex Gemini NX-C18, 250 x 4,6 mm, 5  $\mu\text{m}$ , Fluss Rate: 2 ml/min, Eluent:  $\text{CH}_3\text{CN}$  in  $\text{H}_2\text{O}$  + 0.1%  $\text{HCO}_2\text{H}$  (0-15 min 5%-90%), 254nm

