

Analysenergebnisse



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

Wirkstoff: Benzbromaron

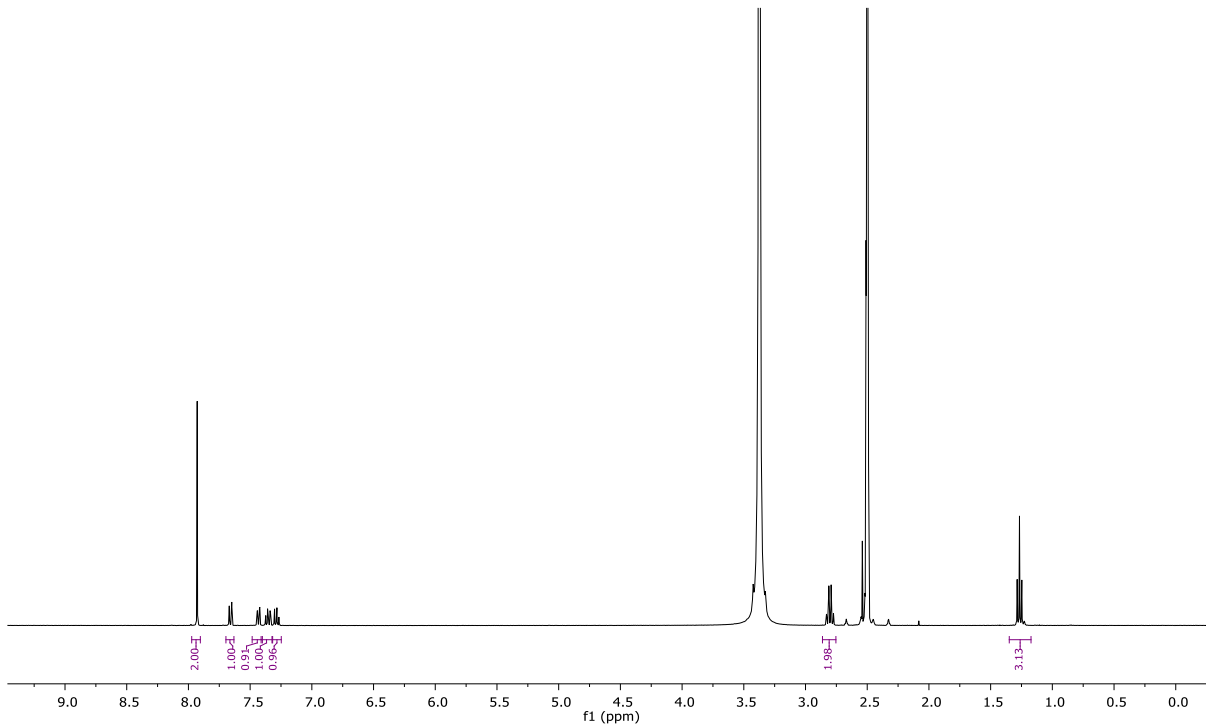
CAS-Nr.: 3562-84-3
Summenformel: C₁₇H₁₂Br₂O₃
Molare Masse: 424,1 g/mol
Charge: E107b
Herstellungsdatum: 16.06.2023

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes bis fast weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): <i>m/z</i> : 424,9 [M+H ⁺]	MS(ESI): <i>m/z</i> : 424,8 [M+H ⁺]
Schmelzpunkt	Ca. 152°C	153°C

¹H-NMR Spektrum:

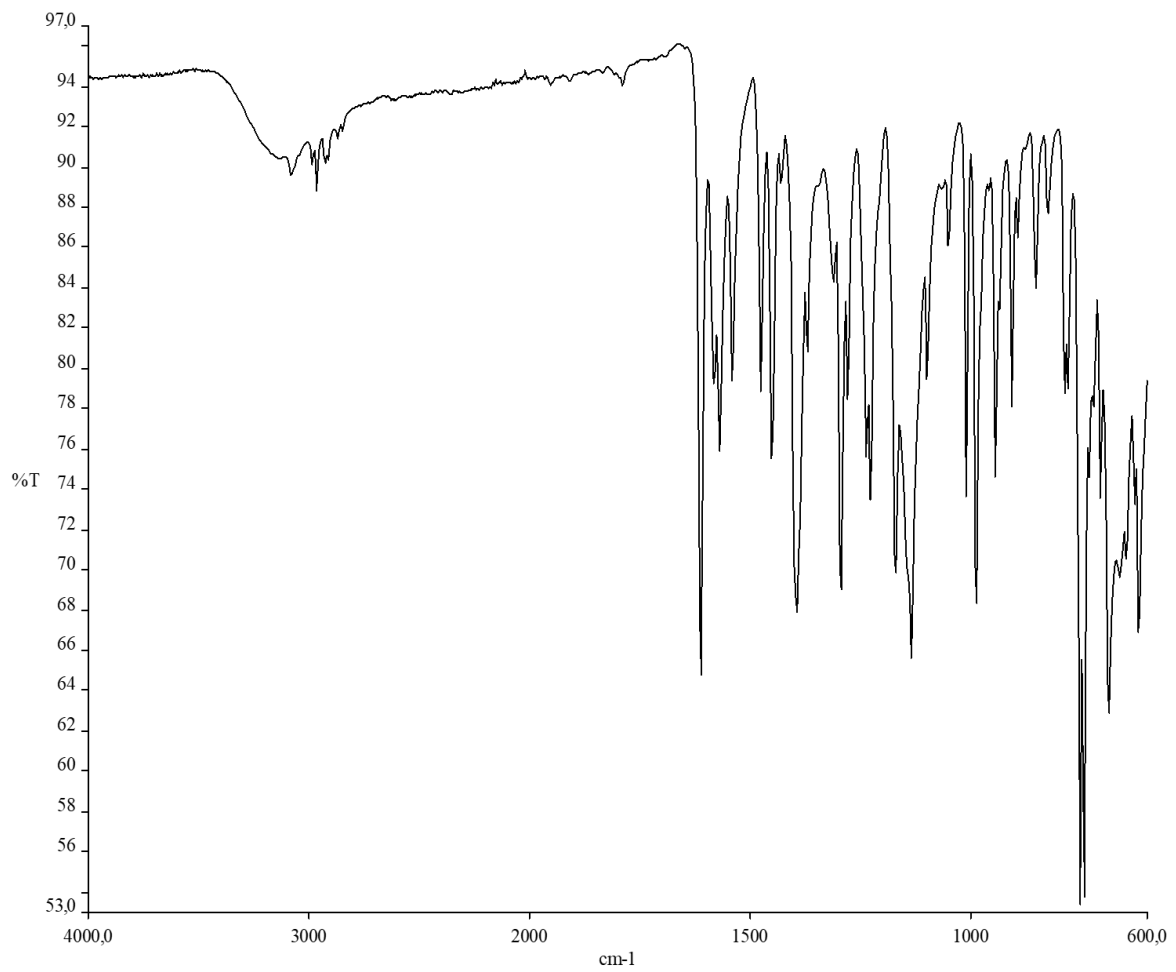
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (¹H: 400 MHz) Spektrometer



¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆) δ 7.93 (s, 2H), 7.66 (dt, J = 8.2, 0.9 Hz, 1H), 7.48 – 7.40 (m, 1H), 7.36 (ddd, J = 8.3, 7.3, 1.5 Hz, 1H), 7.28 (td, J = 7.5, 1.1 Hz, 1H), 2.80 (q, J = 7.5 Hz, 2H), 1.27 (t, J = 7.5 Hz, 3H).

IR Spektrum:

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



Analytische HPLC:

Phenomenex Gemini NX-C18, 250 x 4,6 mm, 5 μm , Fluss Rate: 2 ml/min, Eluent: CH_3CN in H_2O + 0.1% HCO_2H (0-15 min 5%-90%), 254nm

