

Wirkstoff: Celecoxib

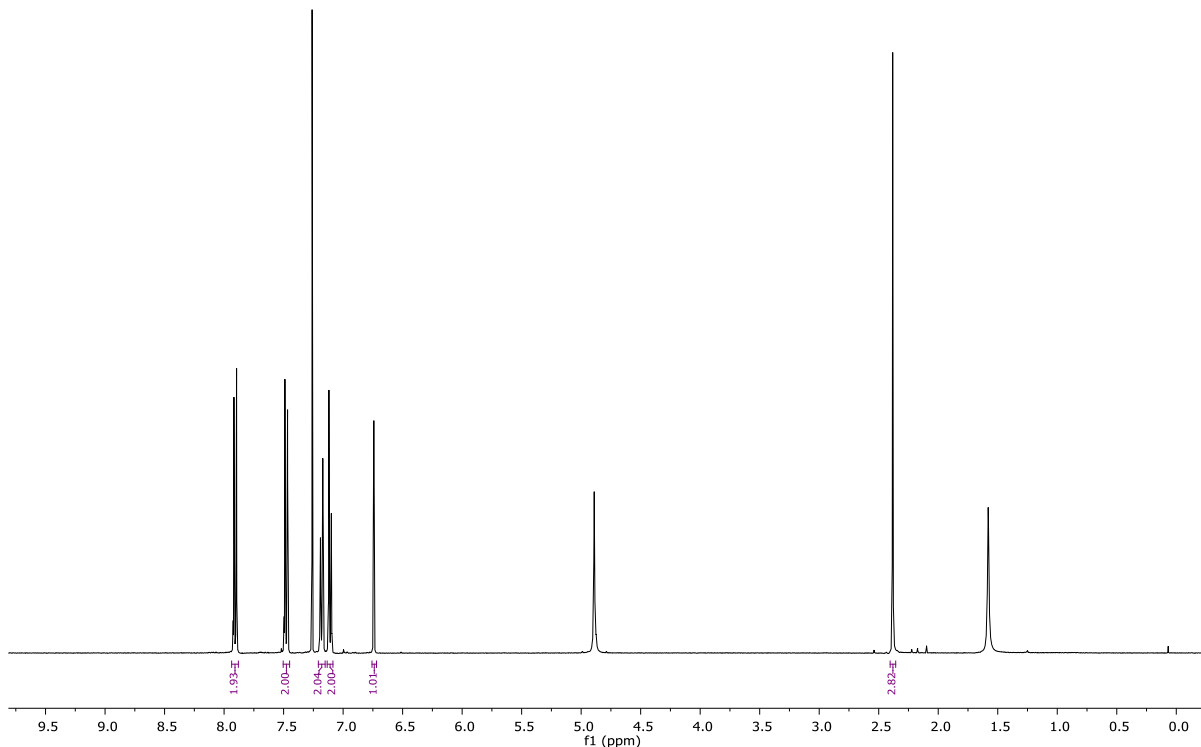
CAS-Nr.: 169590-42-5
Summenformel: $C_{17}H_{14}F_3N_3O_2S$
Molare Masse: 381,4 g/mol
Charge: E96d
Herstellungsdatum: 28.07.2023

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes Pulver	Weißes Pulver
Schmelzpunkt	162-164°C	163,1°C
Masse	MS(ESI): m/z : 382,1 $[M+H]^+$	MS(ESI): m/z : 382,0 $[M+H]^+$

¹H-NMR Spektrum:

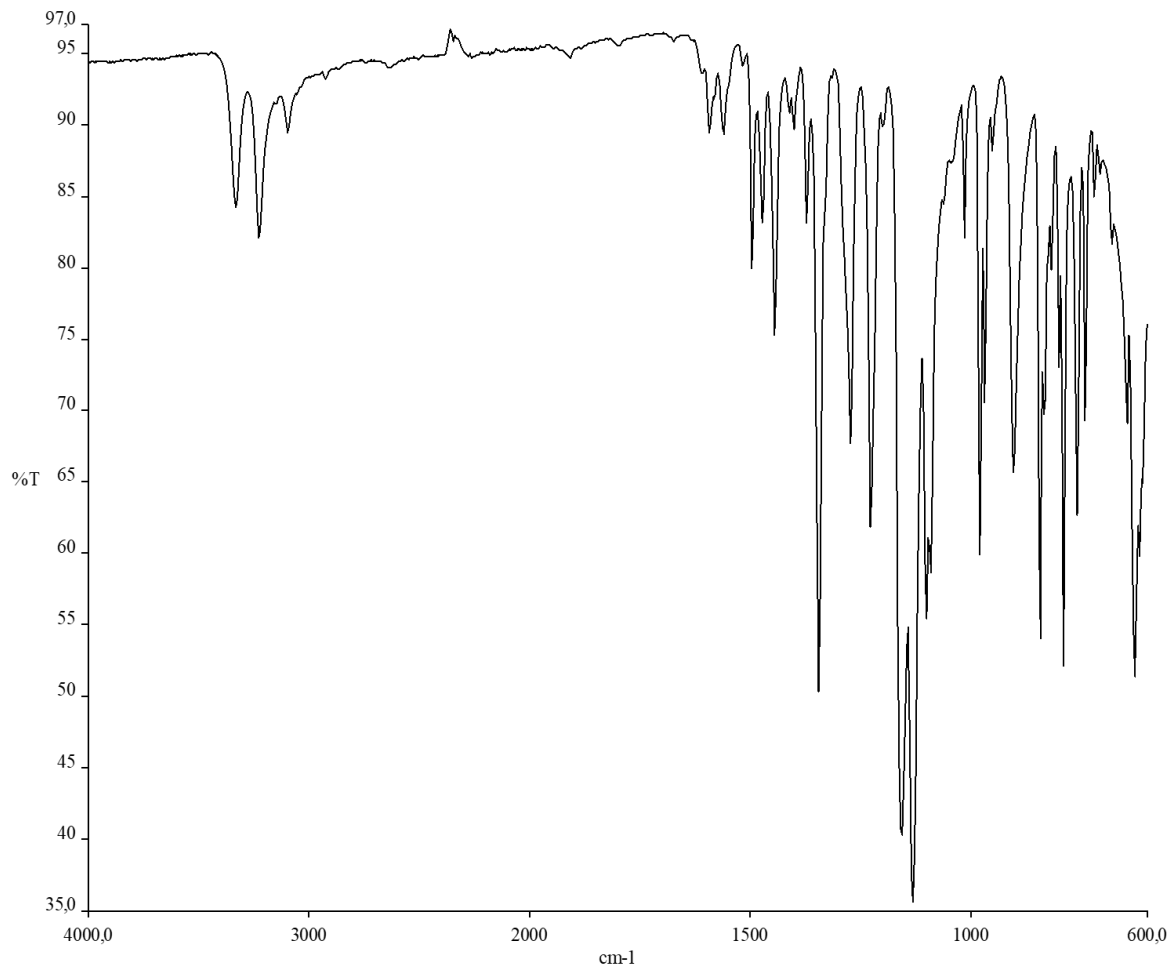
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (¹H: 400 MHz) Spektrometer



¹H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 7.94 – 7.88 (m, 2H), 7.50 – 7.45 (m, 2H), 7.21 – 7.15 (m, 2H), 7.13 – 7.09 (m, 2H), 6.74 (d, J = 0.6 Hz, 1H), 2.38 (s, 3H).

IR Spektrum:

gemessen mit einem FT-IR Spektrometer (Spectrum BX) mit ATR-Technik von $600\text{-}4500\text{cm}^{-1}$



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

