

Analysenergebnisse



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

Wirkstoff: Theophyllin

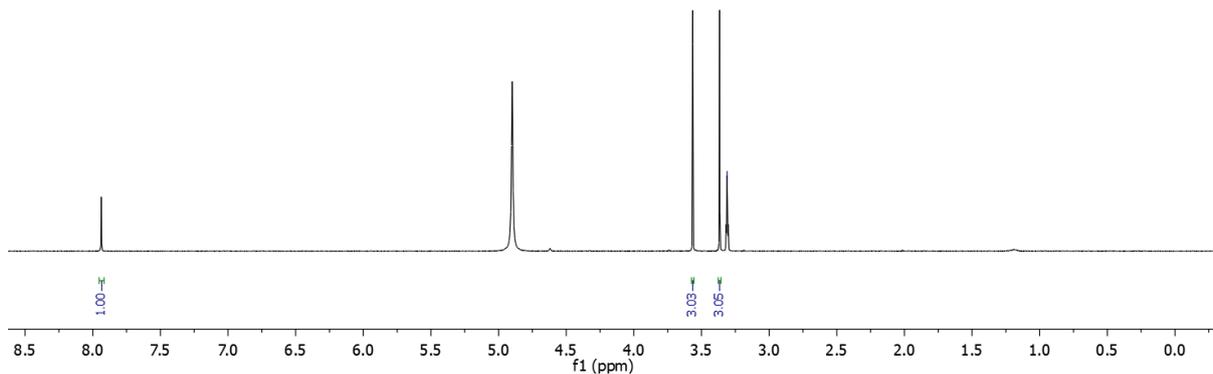
CAS-Nr.: 58-55-9
Summenformel: C₇H₈N₄O₂
Molare Masse: 180,16 g·mol⁻¹
Charge: E219b
Herstellungsdatum: 25.10.2024

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): m/z : 181,2 [M+H ⁺]	MS(ESI): m/z : 181,0 [M+H ⁺]
Schmelzpunkt	271°C	271,3°C

¹H-NMR Spektrum:

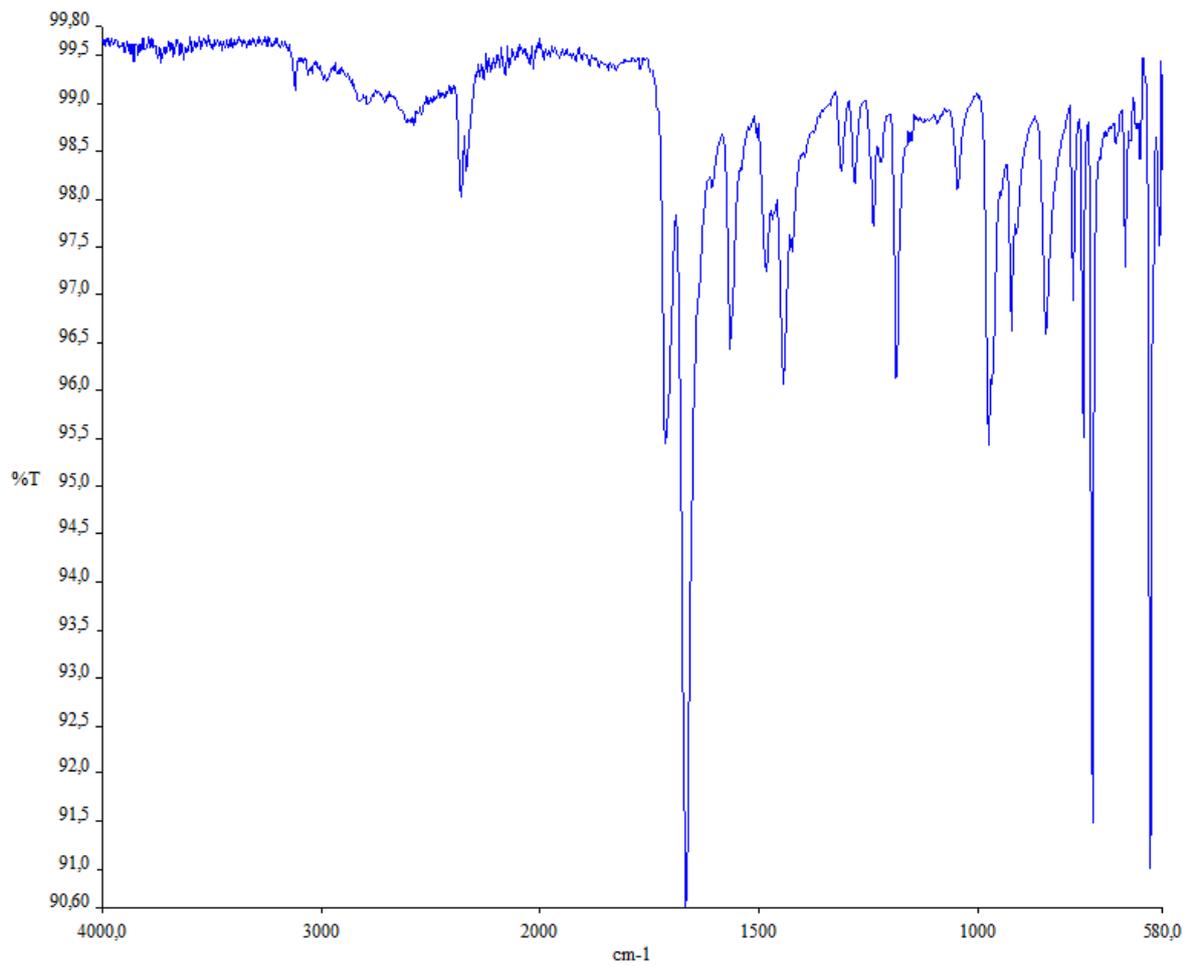
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (¹H: 400 MHz) Spektrometer



¹H NMR (400 MHz, Methanol-*d*₄) δ 7.94 (s, 1H), 3.56 (s, 3H), 3.37 (s, 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

