

Analysenergebnisse



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

Wirkstoff: Coffein

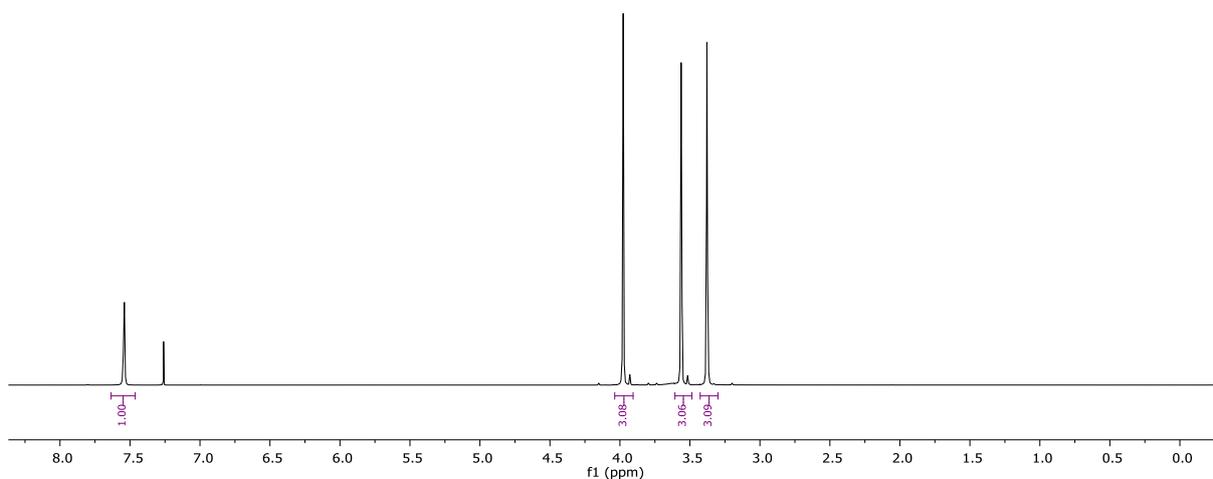
CAS-Nr.: 58-08-2
Summenformel: $C_8H_{10}N_4O_2$
Molare Masse: 194,2 g/mol
Charge: L198a
Herstellungsdatum: 27.10.2023

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes bis fast weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): m/z : 195,1 $[M+H^+]$	MS(ESI): m/z : 195,0 $[M+H^+]$
Schmelzpunkt	234-239°C	238,1°C

1H -NMR Spektrum:

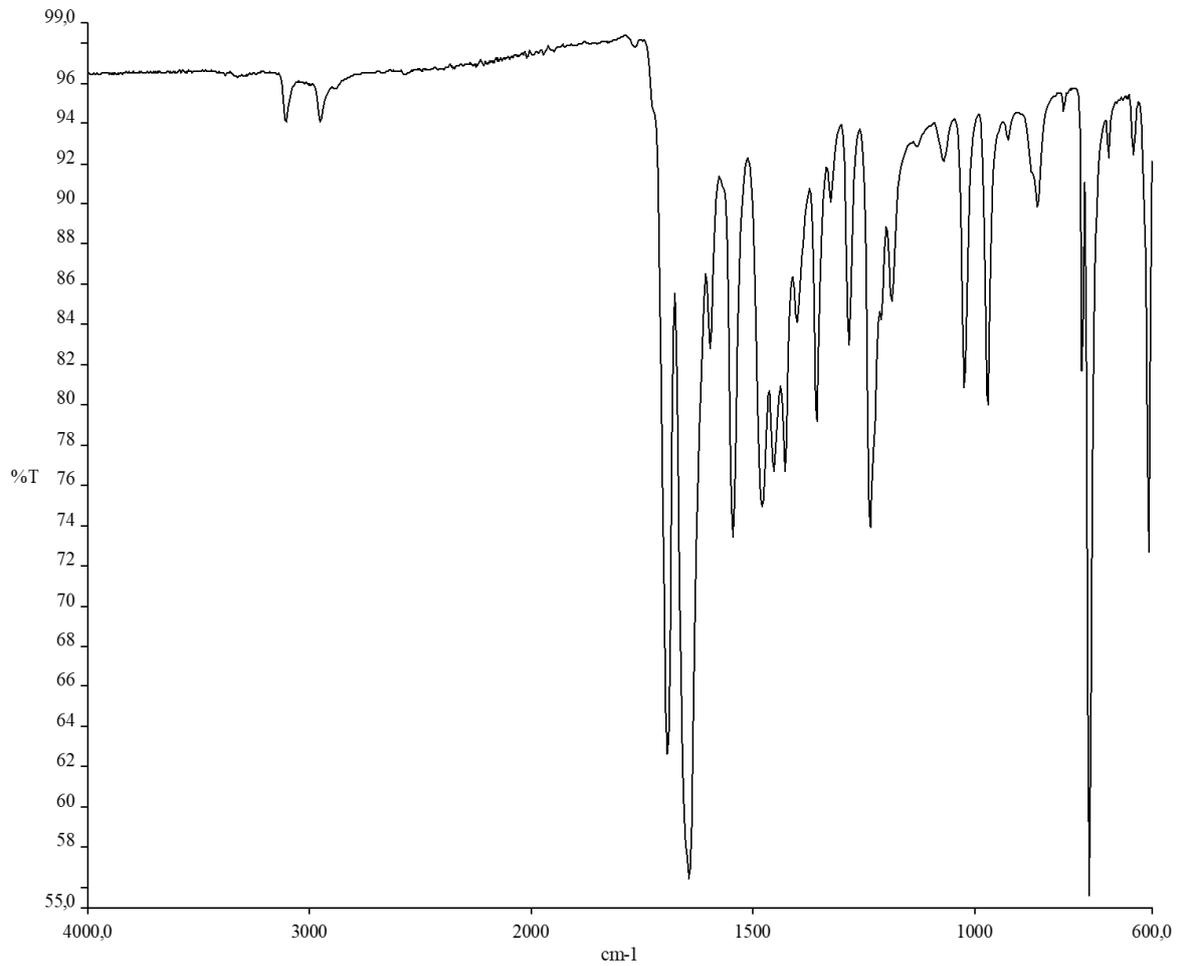
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (1H : 400 MHz) Spektrometer



1H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 7.54 (s, 1H), 4.04 – 3.91 (m, 3H), 3.61 – 3.49 (m, 3H), 3.43 – 3.30 (m, 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 0%-90%), 254nm

