

Analysenergebnisse



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

Wirkstoff: Diltiazem-HCl

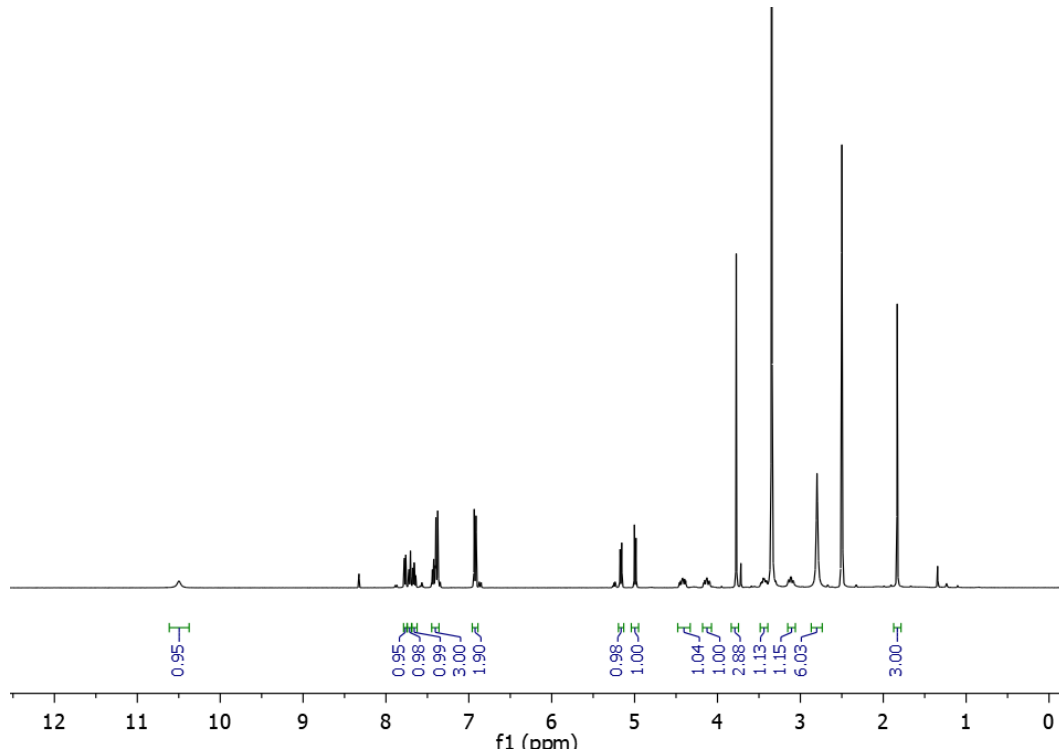
CAS-Nr.: 33286-22-5
Summenformel: $C_{22}H_{27}N_2O_4S$
Molare Masse: $450,98 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$
Charge: E126b
Herstellungsdatum: 12.02.2024

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): m/z : 450,98 $[M+H]^+$	MS(ESI): m/z : 415,10 $[M+H]^+$
Schmelzpunkt	207–212 °C	209,8 °C

^1H -NMR Spektrum:

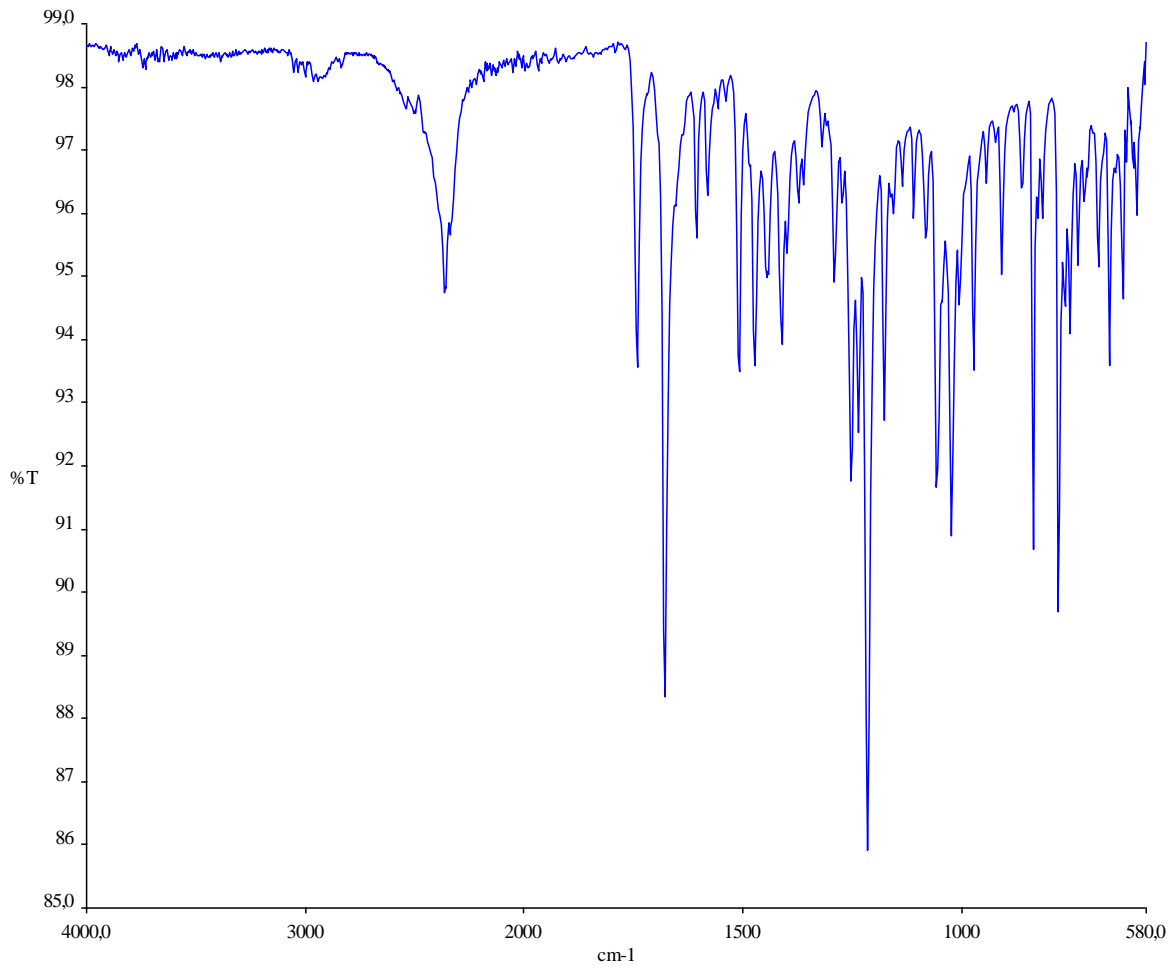
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (^1H : 400 MHz) Spektrometer



^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO-}d_6$) δ 10.50 (s, 1H), 7.77 (dd, $J = 7.7, 1.5 \text{ Hz}$, 1H), 7.70 (d, $J = 1.5 \text{ Hz}$, 1H), 7.66 (d, $J = 1.4 \text{ Hz}$, 1H), 7.46 – 7.30 (m, 3H), 7.00 – 6.89 (m, 2H), 5.17 (d, $J = 7.7 \text{ Hz}$, 1H), 4.99 (d, $J = 7.7 \text{ Hz}$, 1H), 4.42 (ddd, $J = 13.5, 10.8, 5.4 \text{ Hz}$, 1H), 4.13 (ddd, $J = 13.5, 10.7, 4.7 \text{ Hz}$, 1H), 3.77 (s, 3H), 3.43 (dt, $J = 11.5, 6.0 \text{ Hz}$, 1H), 3.17 – 3.08 (m, 1H), 2.80 (s, 6H), 1.83 (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

