

Analysenergebnisse



Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg

Wirkstoff: Etoricoxib

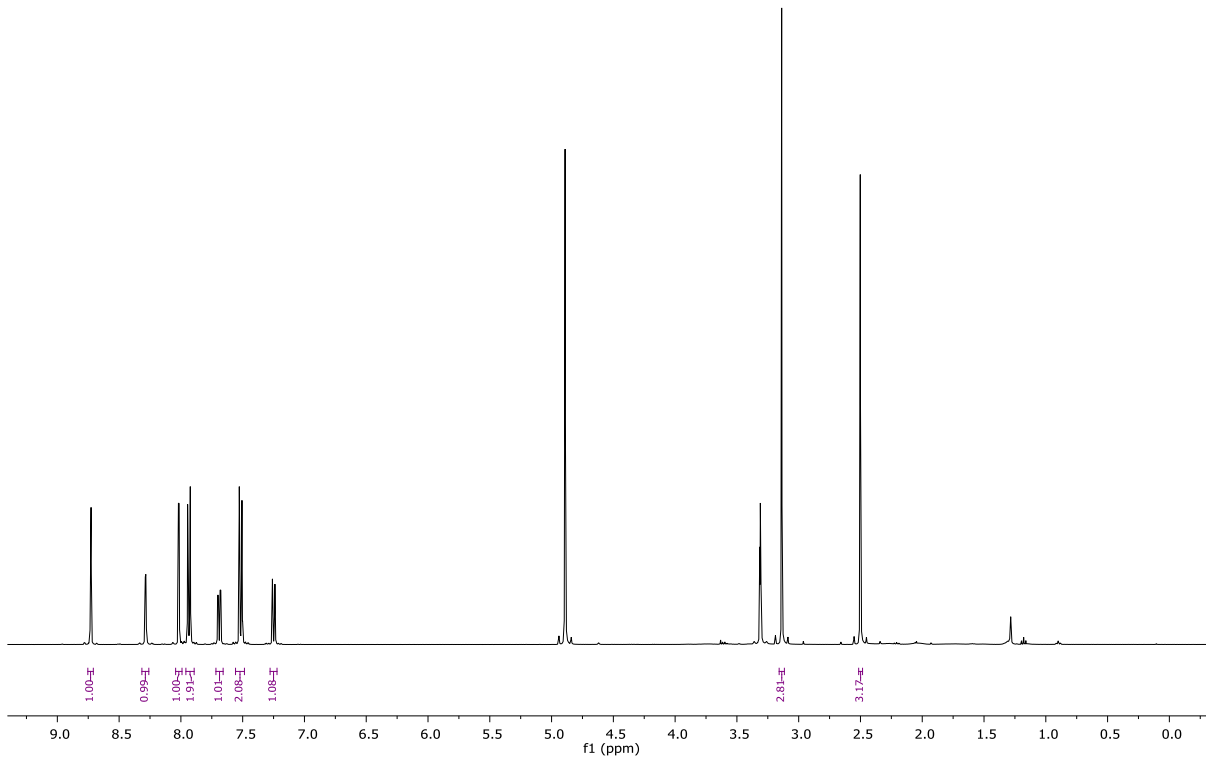
CAS-Nr.: 202409-33-4
Summenformel: C₁₈H₁₅ClN₂O₂S
Molare Masse: 358,8 g/mol
Charge: E165a
Herstellungsdatum: 17.07.2023

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): m/z : 359,1 [M+H ⁺]	MS(ESI): m/z : 359,0 [M+H ⁺]
Schmelzpunkt	127-128°C	137,5°C

¹H-NMR Spektrum:

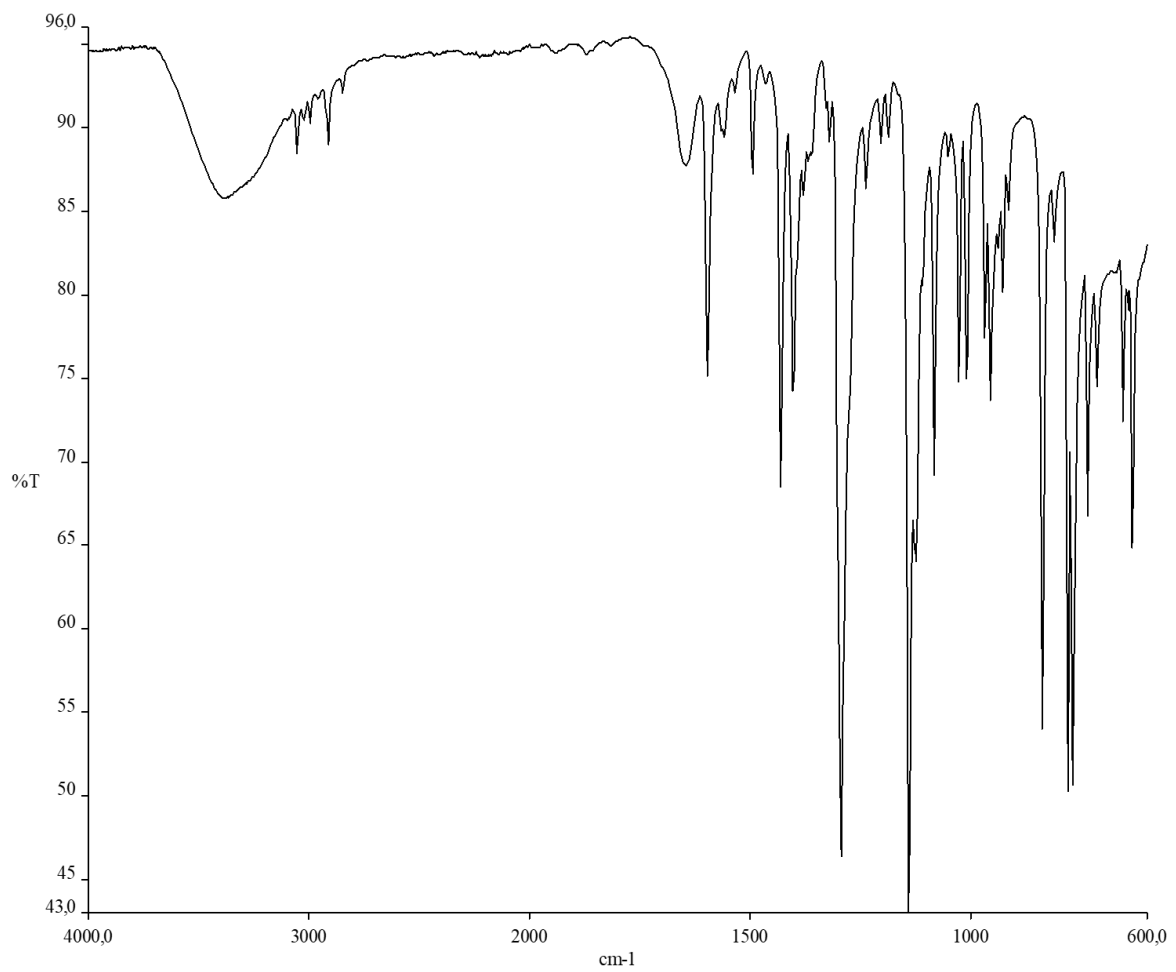
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (¹H: 400 MHz) Spektrometer



¹H NMR (400 MHz, Methanol-d₄) δ 8.73 (d, J = 2.4 Hz, 1H), 8.29 (dd, J = 2.4, 0.8 Hz, 1H), 8.02 (d, J = 2.3 Hz, 1H), 7.96 – 7.89 (m, 2H), 7.69 (dd, J = 8.1, 2.3 Hz, 1H), 7.56 – 7.49 (m, 2H), 7.25 (dt, J = 8.1, 0.7 Hz, 1H), 3.14 (s, 3H), 2.50 (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

