

**Wirkstoff:** Ketoconazol

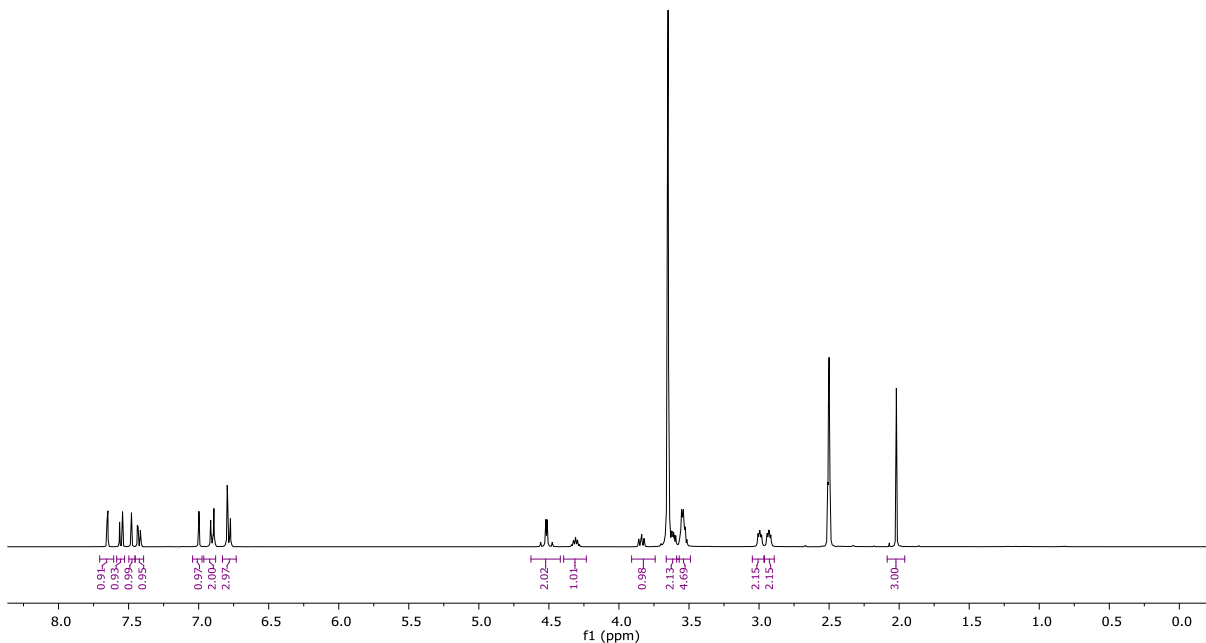
**CAS-Nr.:** 65277-42-1  
**Summenformel:** C<sub>26</sub>H<sub>28</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub>  
**Molare Masse:** 531,4 g/mol  
**Charge:** L205a  
**Herstellungsdatum:** 21.11.2023

## Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes bis fast weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): $m/z$ : 531,2 [M+H <sup>+</sup> ]	MS(ESI): $m/z$ : 531,1 [M+H <sup>+</sup> ]
Schmelzpunkt	148-152°C	149,8 °C

## <sup>1</sup>H-NMR Spektrum:

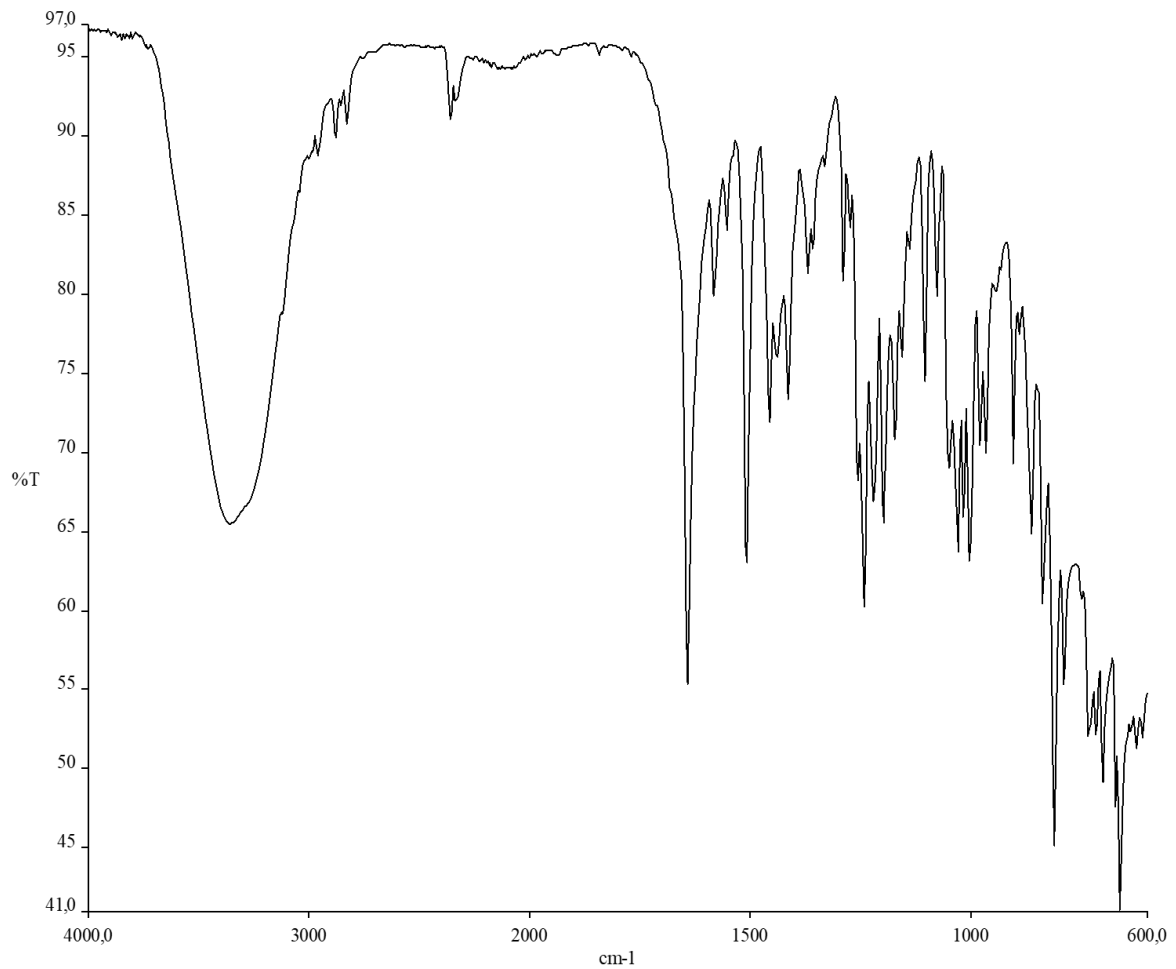
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (<sup>1</sup>H: 400 MHz) Spektrometer



<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>) δ 7.65 (d, J = 2.1 Hz, 1H), 7.55 (d, J = 8.5 Hz, 1H), 7.48 (t, J = 1.1 Hz, 1H), 7.42 (dd, J = 8.5, 2.1 Hz, 1H), 7.00 (t, J = 1.2 Hz, 1H), 6.96 – 6.88 (m, 2H), 6.83 – 6.73 (m, 3H), 4.63 – 4.42 (m, 2H), 4.31 (p, J = 5.7 Hz, 1H), 3.84 (dd, J = 8.5, 6.6 Hz, 1H), 3.66 – 3.57 (m, 2H), 3.59 – 3.49 (m, 5H), 2.99 (t, J = 5.2 Hz, 2H), 2.93 (t, J = 5.2 Hz, 2H), 2.02 (s, 3H).

### IR Spektrum:

gemessen mit einem FT-IR Spektrometer (Spectrum BX) mit ATR-Technik von 600-4000 $\text{cm}^{-1}$



### Analytische HPLC:

Phenomenex Gemini NX-C18, 250 x 4,6 mm, 5  $\mu\text{m}$ , Fluss Rate: 2 ml/min, Eluent:  $\text{CH}_3\text{CN}$  in  $\text{H}_2\text{O}$  + 0.1%  $\text{HCO}_2\text{H}$  (0-15 min 5%-90%), 254nm

