

Wirkstoff: Nilotinib

CAS-Nr.: 641571-10-0

Summenformel: $C_{28}H_{22}F_3N_7O$

Molare Masse: $529,52 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$

Charge: E201b

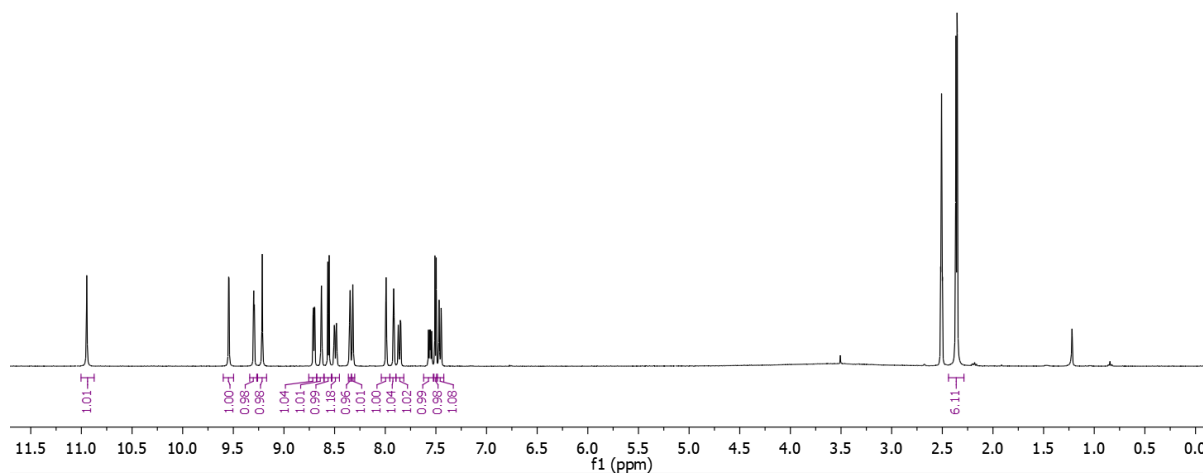
Herstellungsdatum: 06.02.2024

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes bis fast weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): m/z : 530,2 $[M+H]^+$	MS(ESI): m/z : 530,1 $[M+H]^+$
Schmelzpunkt	198-201°C	201,1°C unter Zersetzung

^1H -NMR Spektrum:

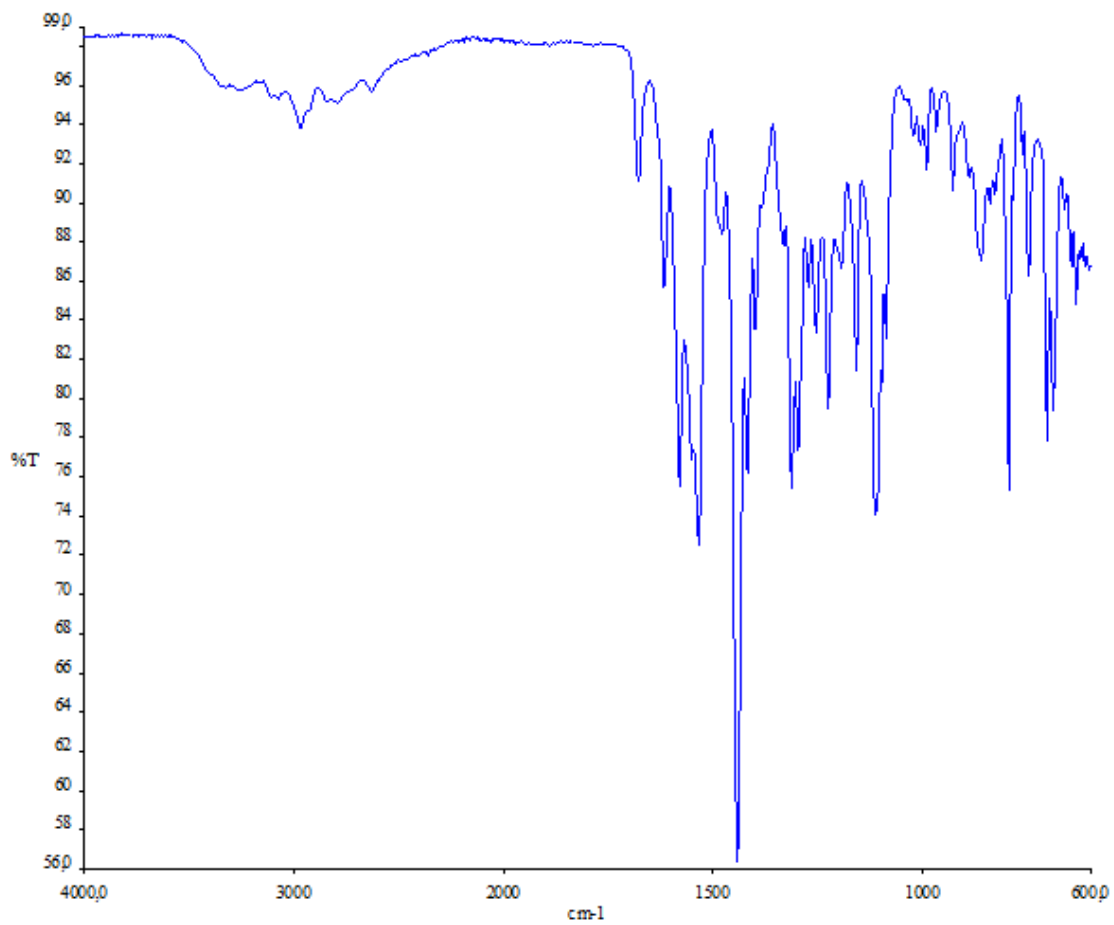
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (^1H : 400 MHz) Spektrometer



^1H NMR (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 10.95 (s, 1H), 9.54 (d, $J = 1.7 \text{ Hz}$, 1H), 9.30 (dd, $J = 2.3, 0.8 \text{ Hz}$, 1H), 9.21 (s, 1H), 8.70 (dd, $J = 4.8, 1.6 \text{ Hz}$, 1H), 8.63 (t, $J = 2.0 \text{ Hz}$, 1H), 8.56 (d, $J = 5.2 \text{ Hz}$, 1H), 8.49 (dt, $J = 8.1, 1.9 \text{ Hz}$, 1H), 8.35 (d, $J = 1.9 \text{ Hz}$, 1H), 8.33 – 8.30 (m, 1H), 8.04 – 7.95 (m, 1H), 7.95 – 7.89 (m, 1H), 7.86 (dd, $J = 8.0, 1.9 \text{ Hz}$, 1H), 7.56 (ddd, $J = 8.0, 4.8, 0.9 \text{ Hz}$, 1H), 7.50 (d, $J = 5.2 \text{ Hz}$, 1H), 7.46 (d, $J = 8.1 \text{ Hz}$, 1H), 2.44 – 2.29 (m, 6H).

IR Spektrum:

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



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

