

Wirkstoff: Sitagliptin-Phosphat x H₂O

CAS-Nr.: 654671-77-9

Summenformel: C₁₆H₁₅F₆N₅O x H₃PO₄ x H₂O

Molare Masse: 523,3 g·mol⁻¹

Charge: E52j

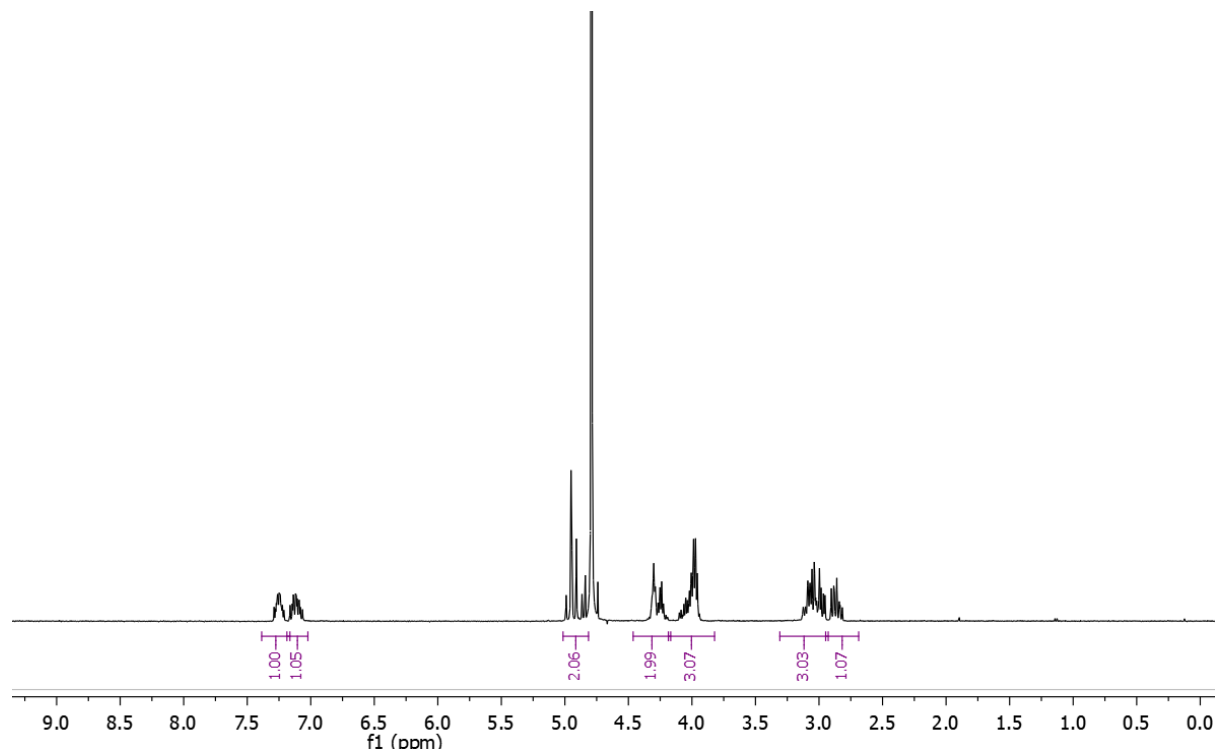
Herstellungsdatum: 14.11.2022

Analytik:

	Spezifikation	Analyse
Aussehen	Weißes Pulver	Weißes Pulver
Masse	MS(ESI): <i>m/z</i> : 408,0 [M+H ⁺]	MS(ESI): <i>m/z</i> : 408,1 [M+H ⁺]
Schmelzpunkt	206,4 °C	203,1 °C

¹H-NMR Spektrum:

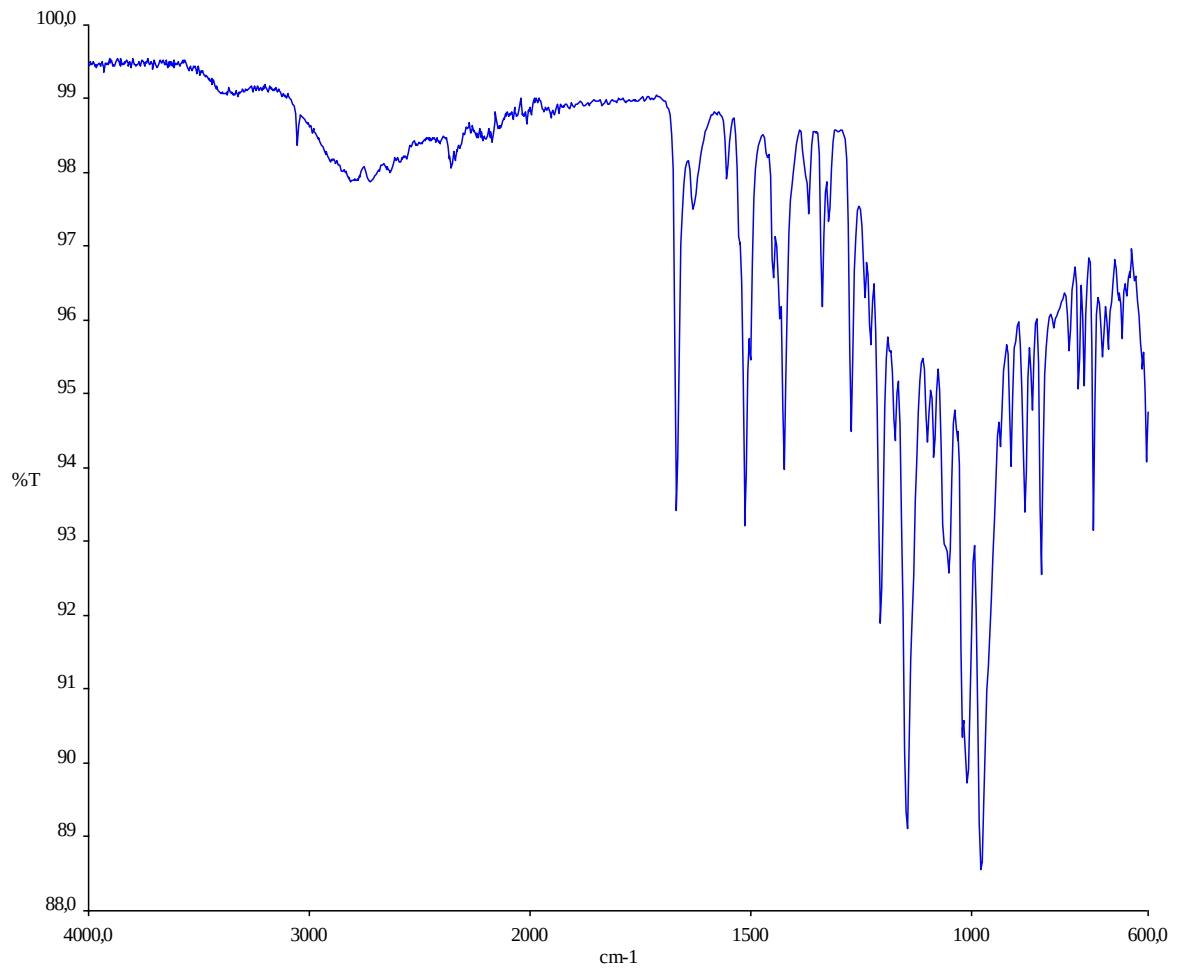
gemessen mit einem Bruker Avance 400 (¹H: 400 MHz) Spektrometer



¹H NMR (400 MHz, Deuterium Oxide) δ 7.39 – 7.16 (m, 1H), 7.19 – 7.02 (m, 1H), 5.01 – 4.81 (m, 2H), 4.46 – 4.17 (m, 2H), 4.19 – 3.82 (m, 3H), 3.31 – 2.93 (m, 3H), 2.95 – 2.69 (m, 1H).

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

