

Pyrazolobenzothiazine-based carbothioamides as new structural leads for the inhibition of monoamine oxidases: design, synthesis, *in-vitro* bioevaluation and molecular docking studies

Syed Mobasher Ali Abid^{†a}, Sana Aslam^{†b,c}, Sumera Zaib^a, Syeda Mahwish Bakht^a, Matloob Ahmad^d, Muhammad Makshoof Athar^c, John M Gardiner^{e,*}, Jamshed Iqbal^{a,*}

^a*Centre for Advanced Drug Research, COMSATS Institute of Information Technology, Abbottabad-22060, Pakistan.*

^b*Department of Chemistry, Government College Women University, Faisalabad-38000, Pakistan.*

^d*Department of Chemistry, Government College University, Faisalabad-38000, Pakistan.*

^e*School of Chemistry and Manchester Institute of Biotechnology, University of Manchester, Manchester M1 7DN, UK.*

[†]*These authors contributed equally to this work.*

***Correspondence address:**

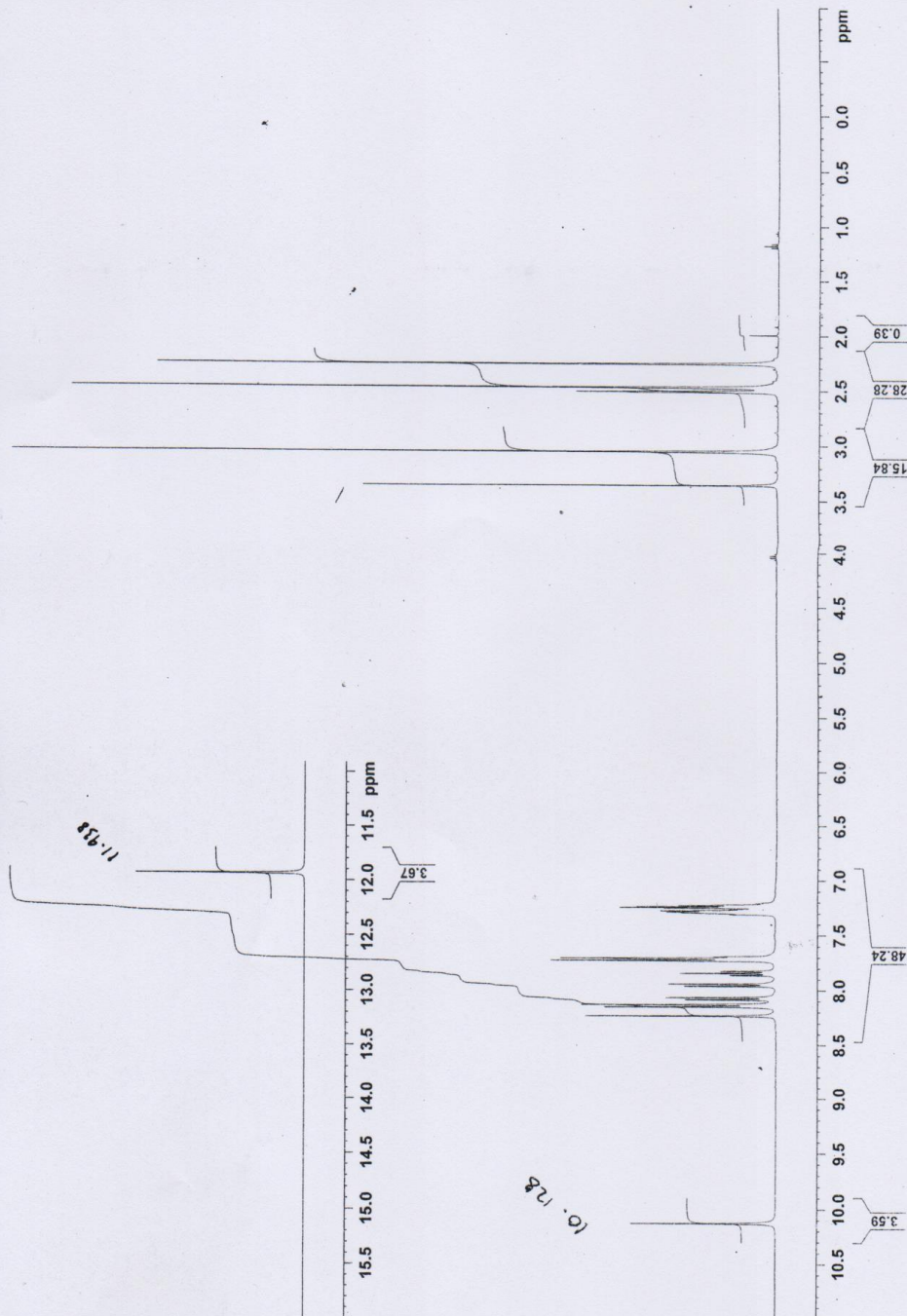
Tel.: +44 161 306 4530 (J.M. Gardiner); Tel: +92 992 383591 96; Fax: +92 992 383441 (J. Iqbal) E-mail address: gardiner@manchester.ac.uk (J.M. Gardiner); drjamshed@ciit.net.pk & jamshediqb@googlemail.com (J. Iqbal).

Compound 3a : ^1H NMR

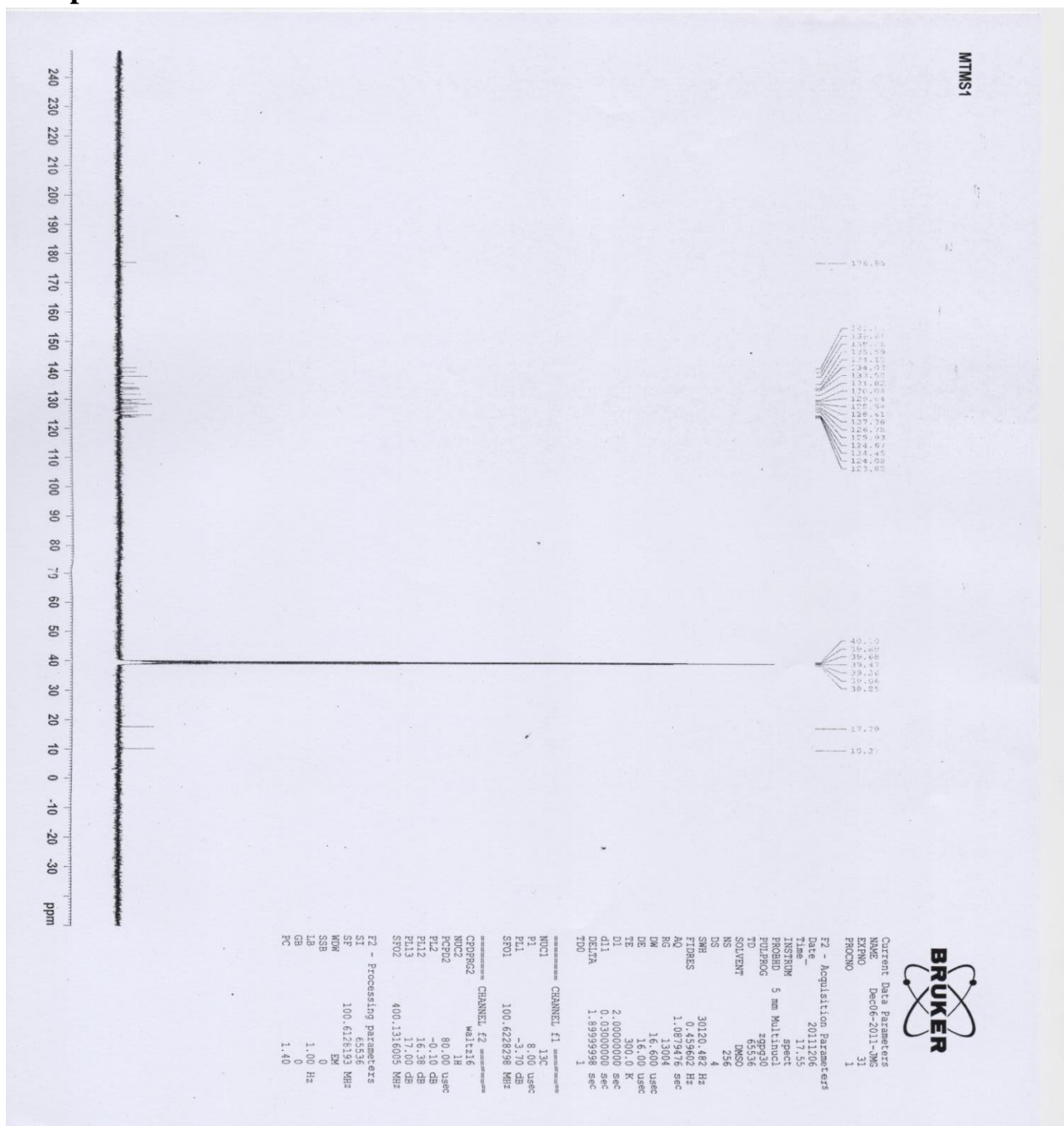
MTMS1



Current Data Parameters
 NAME Desc06-2011-JMG
 EXPNO 30
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20111206
 Time 17.41
 INSTRUM spect
 PROBRD 5 mm Multinucl
 PULPROG zgpg30
 TD 65536
 SOLVENT DMSO
 NS 16
 DS 2
 SWH 8278.146 Hz
 FIDRES 0.126314 Hz
 AQC 3.9584243 sec
 RG 256
 DW 60.400 usec
 DE 6.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.00000000 sec
 TDO 1
 CHANNEL f1
 NUC1 ^1H
 P1 10.00 usec
 PL -0.10 dB
 SF01 400.1324710 MHz
 F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 400.1300000 MHz
 WDM EM
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00



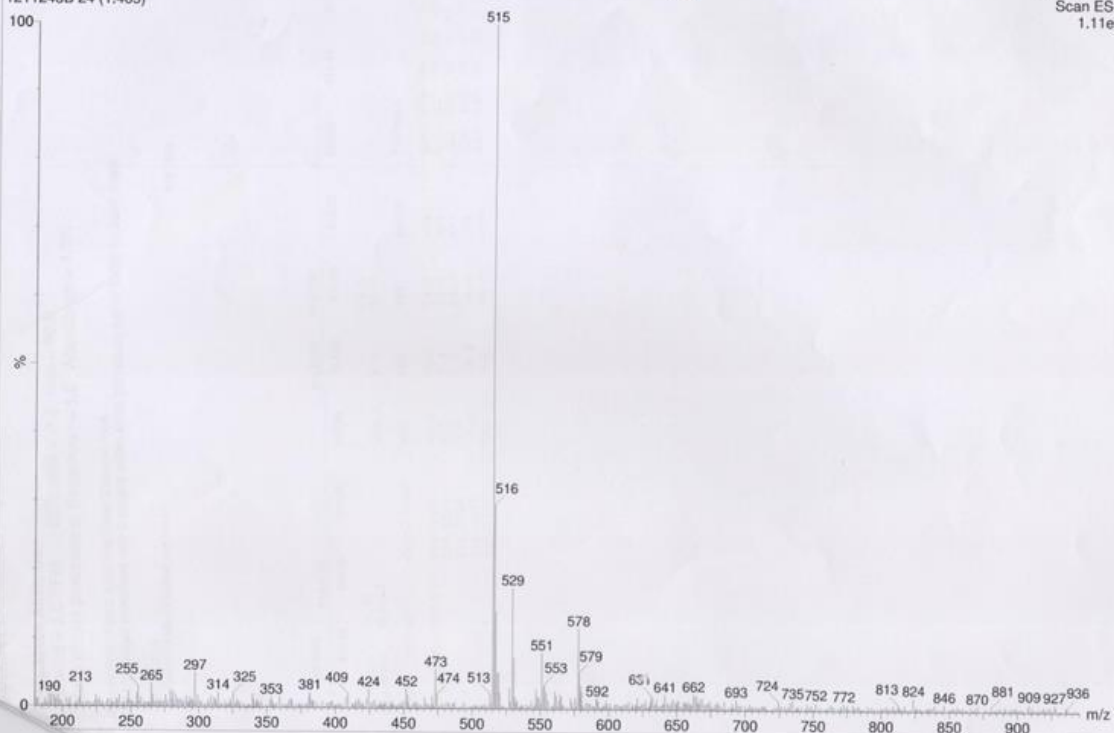
Compound 3a : ¹³C NMR



University of Manchester
1211243B 24 (1.465)

Aslam MTMS-1 3a

cone =30V
Scan ES-
1.11e4



Compound 3a : HRMS

Elemental Composition Report 3a

Page 1

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

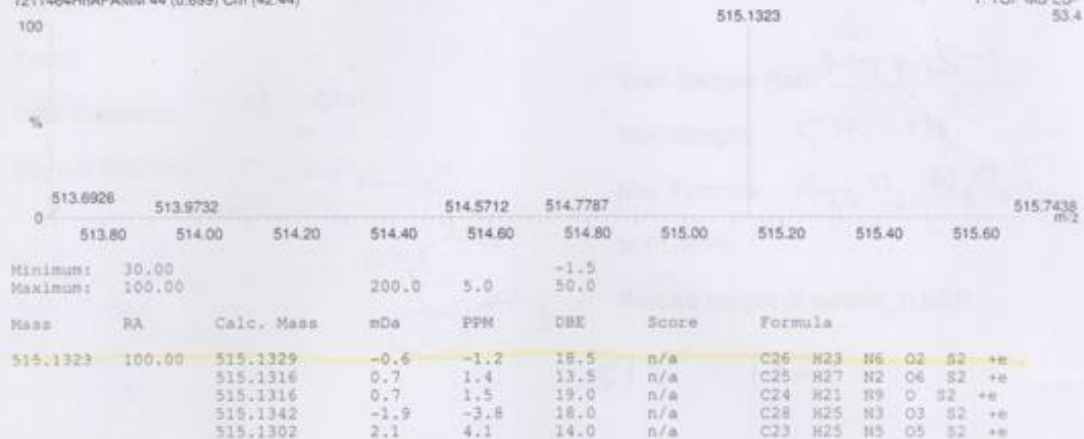
Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

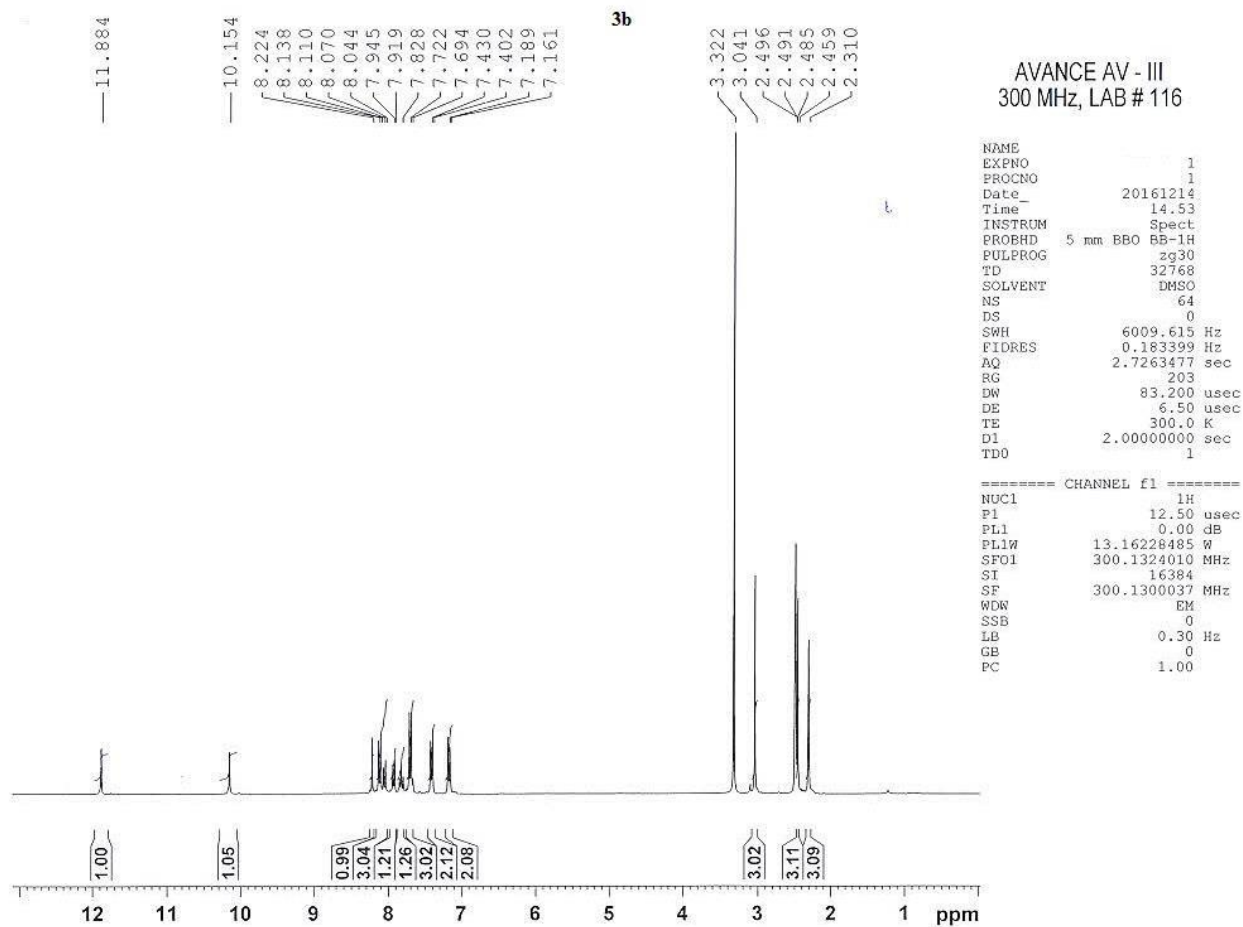
676 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Aslam MTMS-1
1211464HnAFAMM 44 (0.699) Cm (42.44)

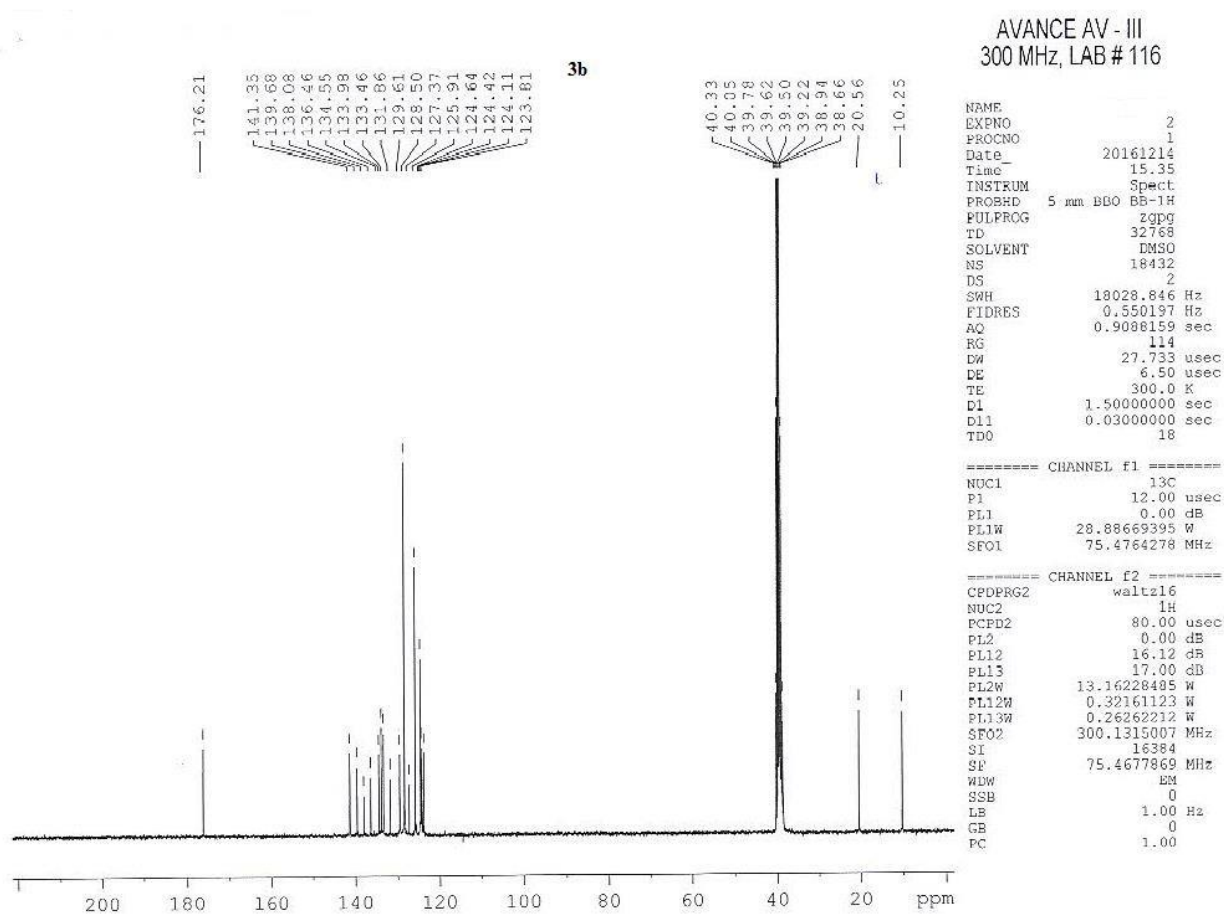
Cone= 30V
1: TOF MS ES-
53.4



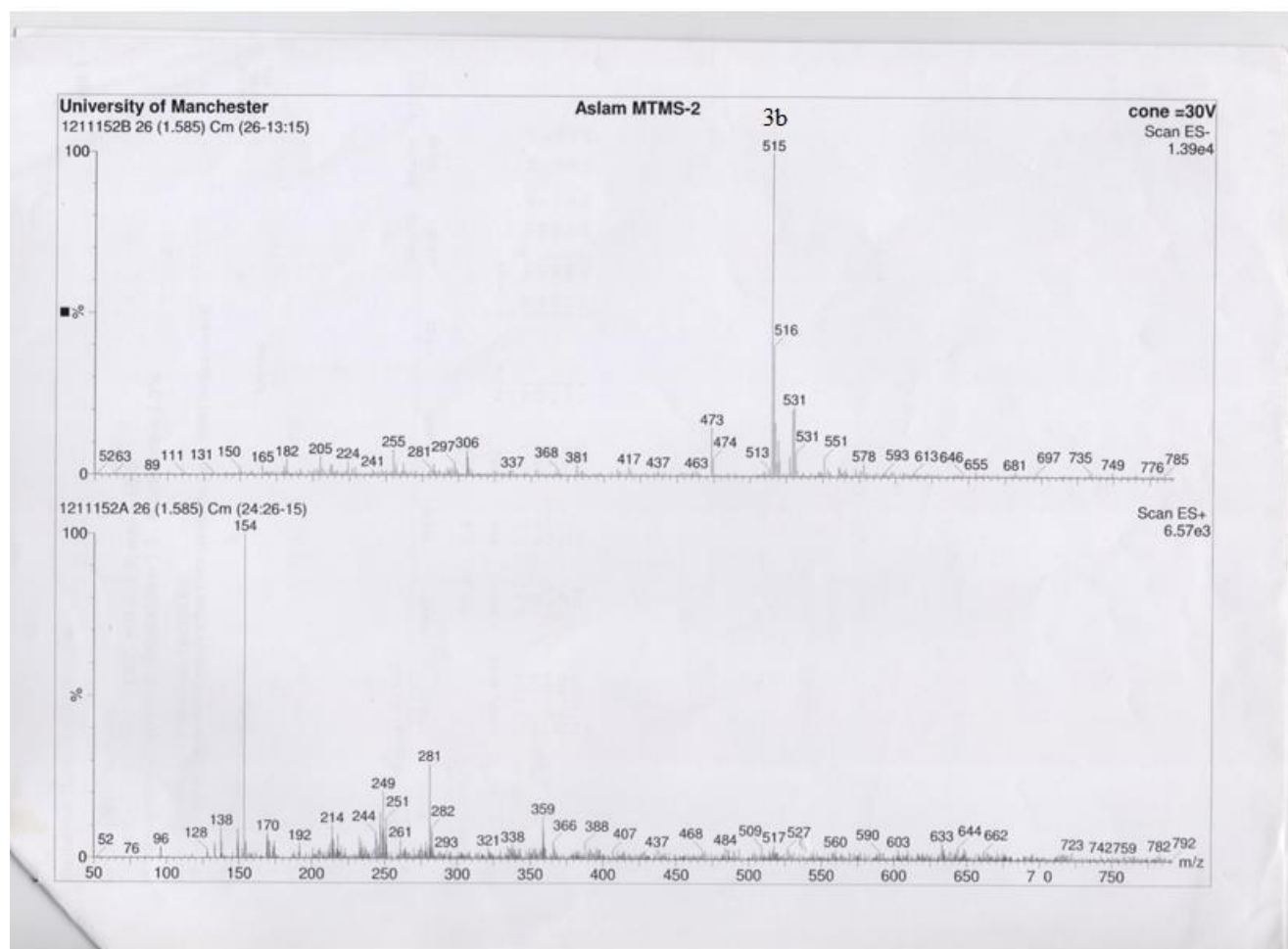
Compound 3b : ¹H NMR



Compound 3b : ¹³C NMR



Compound 3b : MS and HRMS



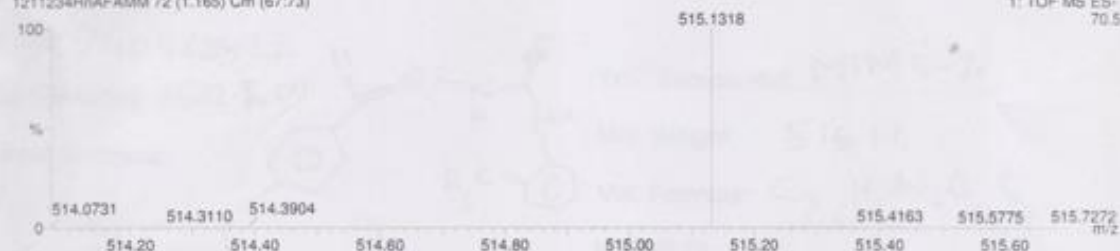
Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

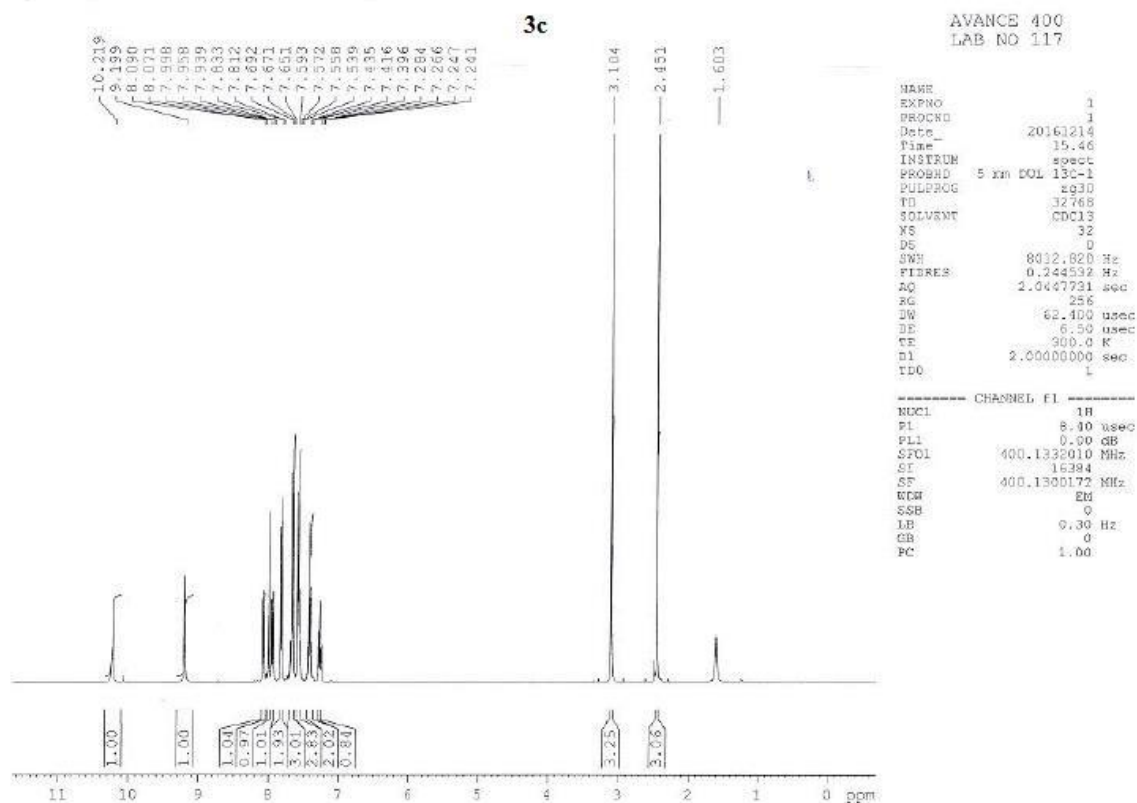
676 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Asiam MTMS-2
1211234HnAFAMM 72 (1.165) Cm (67.73)Core= 30V
1: TOF MS ES-
70.5

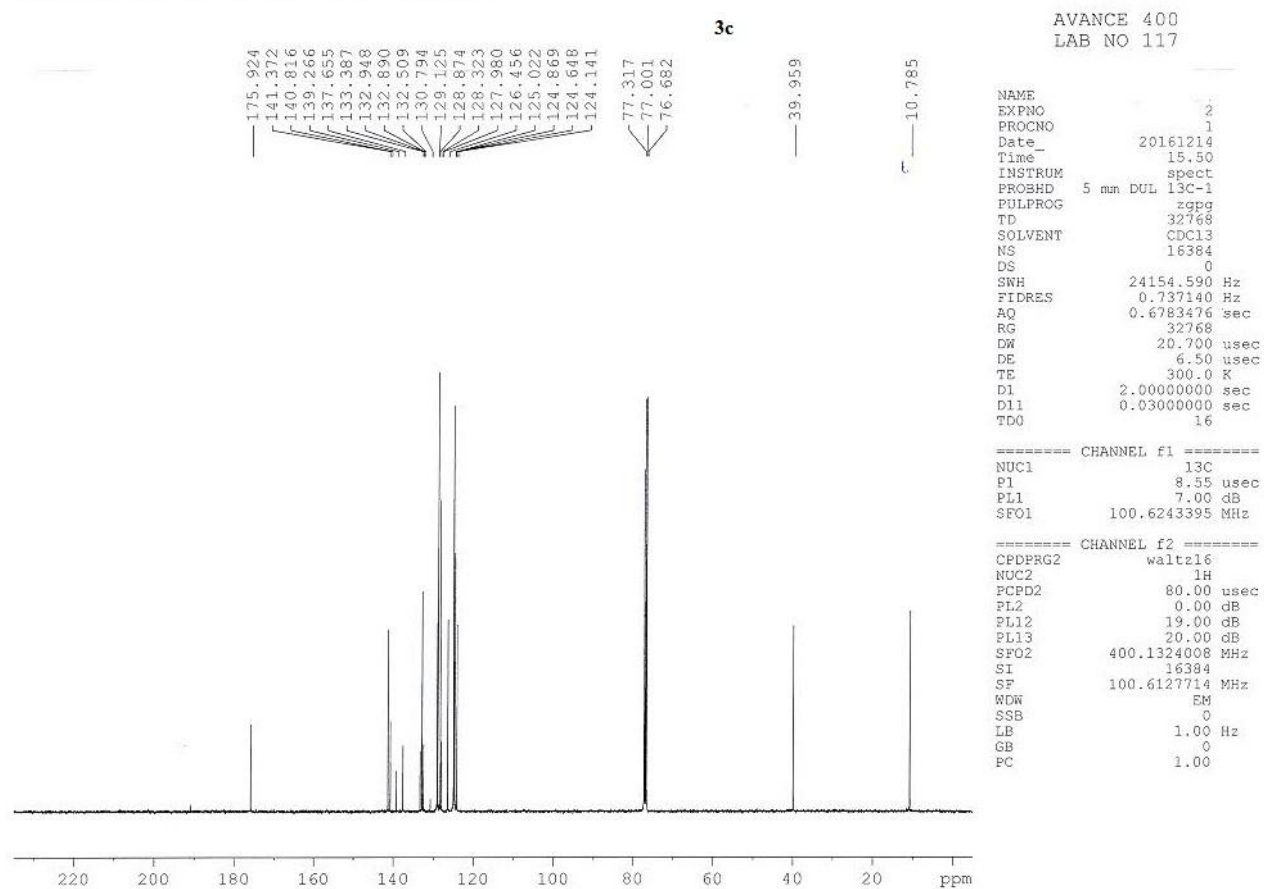
Minimum: 30.00
Maximum: 100.00
200.0 5.0 -1.5 50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
515.1318	100.00	515.1316	0.2	0.5	13.5	n/a	C25 H27 N2 O6 S2 +e
		515.1316	0.2	0.5	19.0	n/a	C24 H21 N9 O S2 +e
		515.1329	-1.1	-2.1	18.5	n/a	C26 H23 N6 O2 S2 +e
		515.1302	1.6	3.1	14.0	n/a	C23 H25 N5 O5 S2 +e
		515.1342	-2.4	-4.7	18.0	n/a	C28 H25 N3 O3 S2 +e

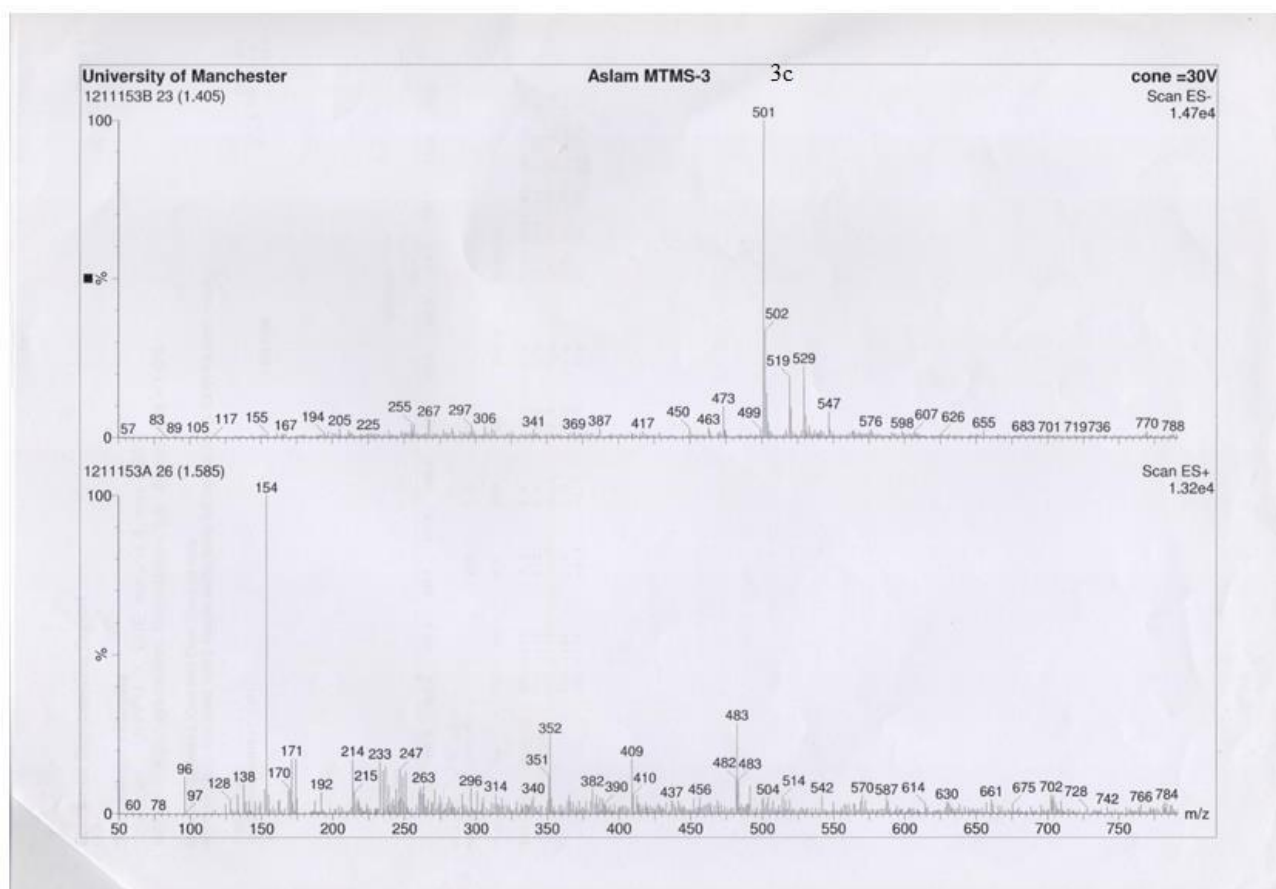
Compound 3c : ¹H NMR



Compound 3c : ¹³C NMR



Compound 3c : MS and HRMS



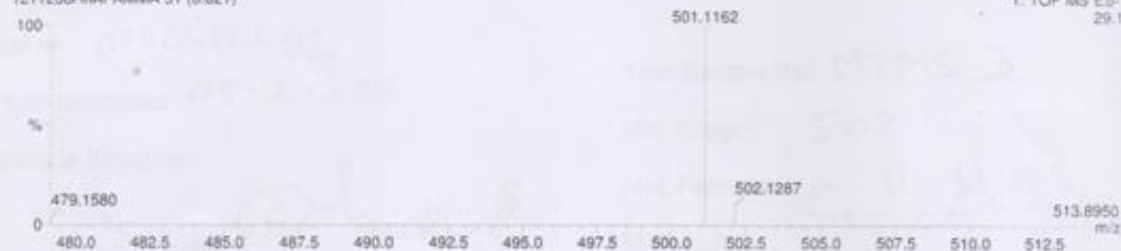
Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

605 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

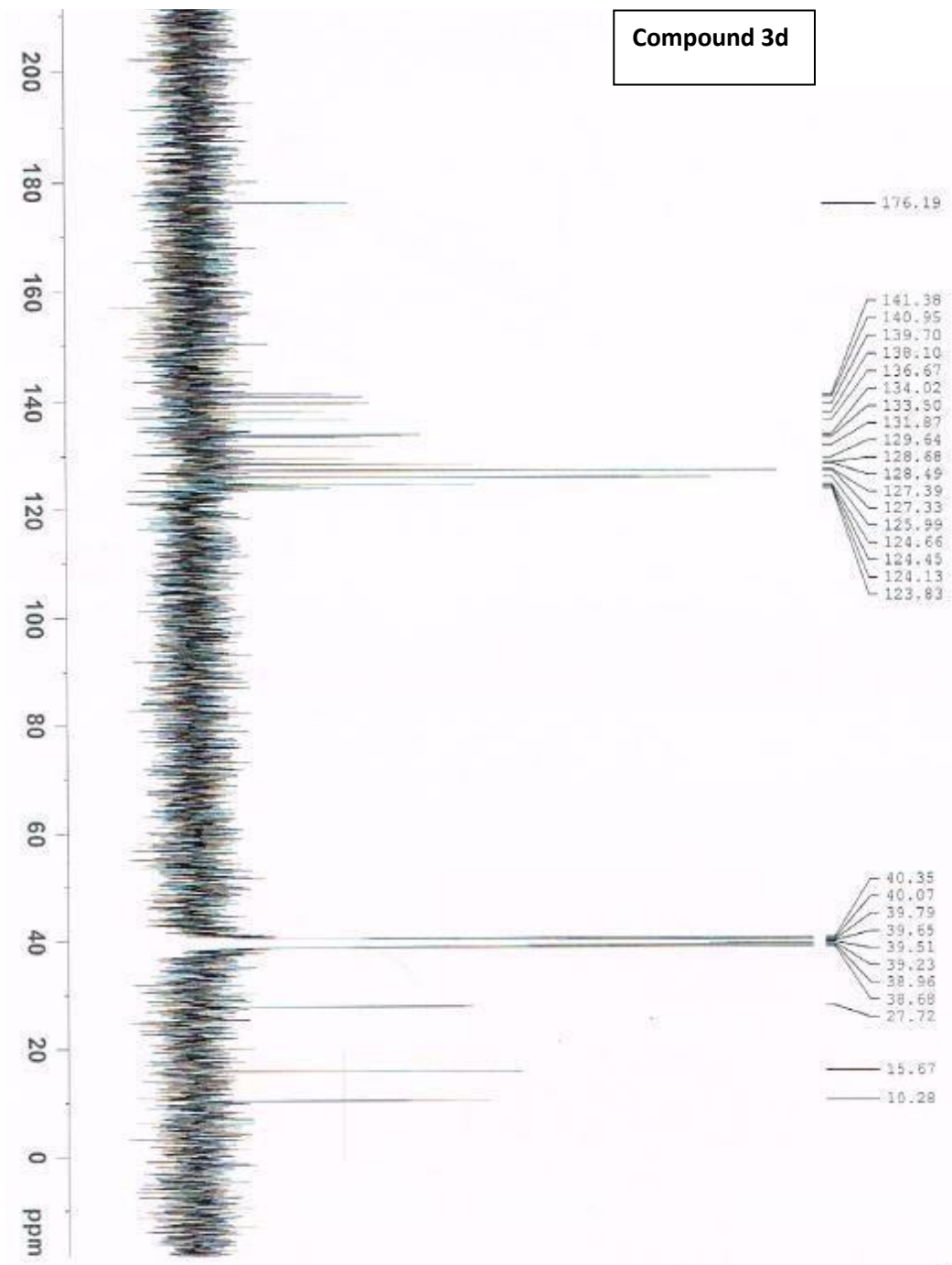
Asiam MTMS-3
1211236HnAFAMMA 51 (0.821)Cone= 30V
1: TOF MS ES-
29.1Minimum: 30.00
Maximum: 100.00200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
501.1162	100.00	501.1159	0.3	0.6	13.5	n/a	C24 H25 N2 O4 S2 +e
		501.1159	0.3	0.6	19.0	n/a	C23 H19 N9 O S2 +e
		501.1172	-1.0	-2.1	18.5	n/a	C25 H21 N6 O3 S2 +e
		501.1146	1.6	3.3	14.0	n/a	C22 H23 N5 O5 S2 +e
		501.1186	-2.4	-4.8	18.0	n/a	C27 H23 N3 O3 S2 +e



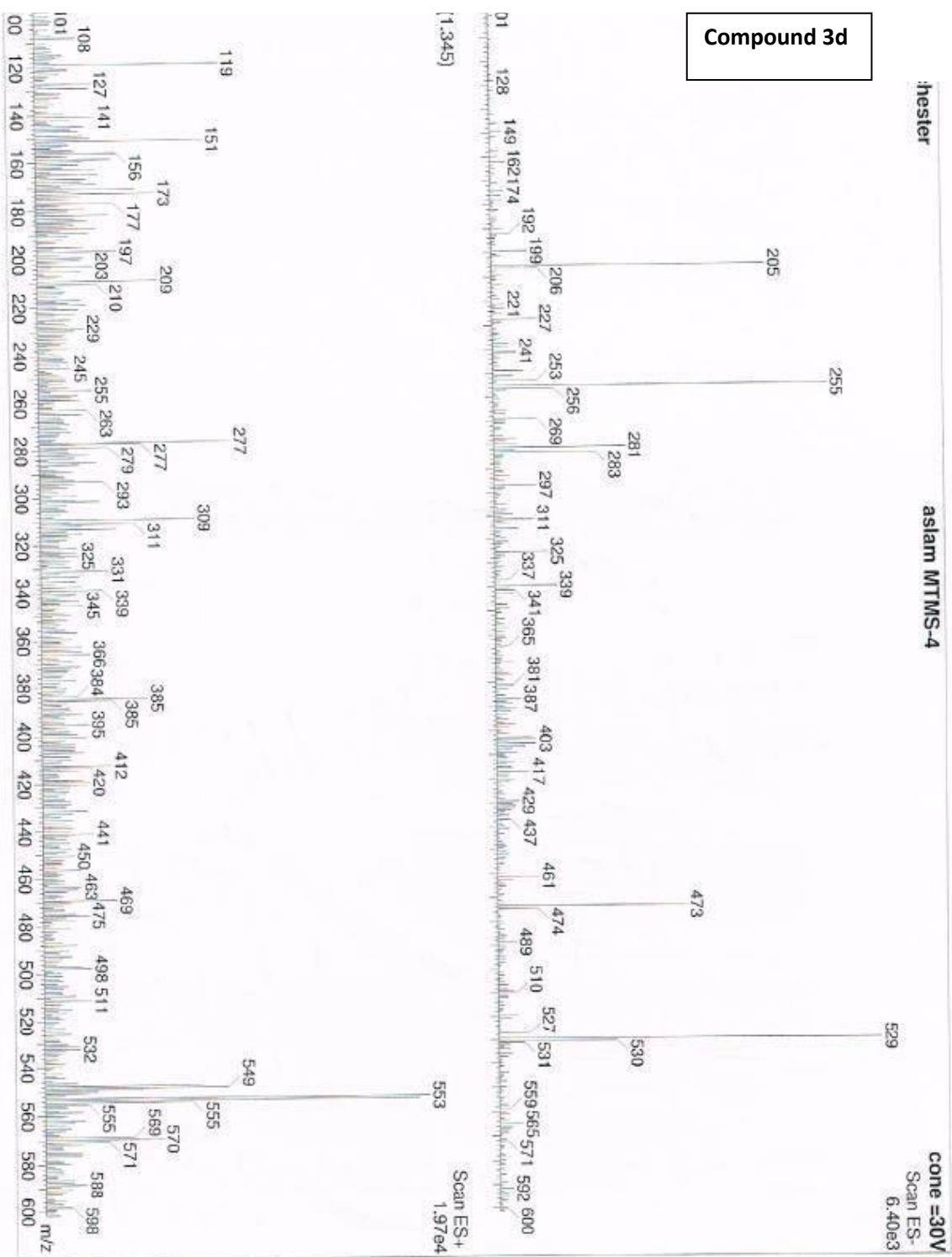
ONight DMSO {E:\bruk300data\2011\Dec} JMG 43

Compound 3d

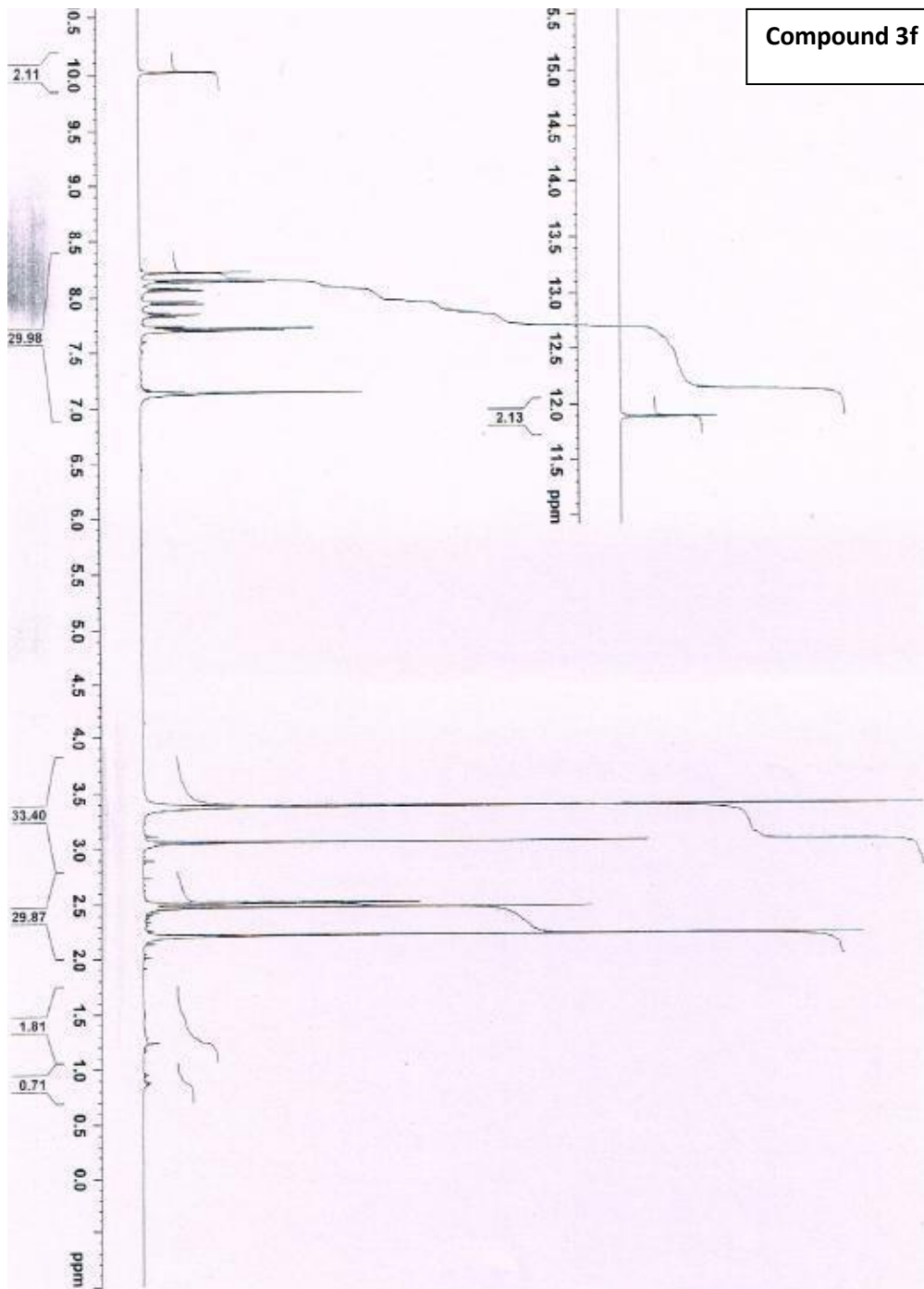


Current Data Parameters
 NAME 2011-12-14-05-43
 EXPNO 11
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 2011.12.14
 Time 5.36
 INSTRUM DEK300
 PROBRD 5 mm TRL 13C-1
 PULPROG zgpg30
 TD 65536
 SOLVENT DMSO
 NS 1024
 DS 2
 SWH 17057.143 Hz
 FIDRES 0.272498 Hz
 AQ 1.8350580 sec
 RG 9195.2
 AC 38.000 usec
 TC 6.40 usec
 TB 300.0 K
 D1 2.00000000 sec
 D11 0.00000000 sec
 DELTA 1.89999998 sec
 TDO 1
 ===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.00 usec
 PL1 -1.50 dB
 SFO1 75.430000 MHz
 ===== CHANNEL f2 =====
 COMPO2 water216
 NUC2 1H
 P2 80.00 usec
 PL2 -2.60 dB
 PL3 14.00 dB
 PL13 14.00 dB
 SFO2 299.9914000 MHz
 F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 25.426824 MHz
 MD 0
 AS 0
 SN 0
 DE 0
 SC 1.40

Compound 3d



Compound 3f



Current Data Parameters
NAME Morf-2012-09g
EXNO 50
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20120308
Time 10.26
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Multinuc
PULPROG zgpg30
FIDPROC 6336
TD 32768
SOLVENT H₂O
NS 2
DS 2
SWH 9278.146 Hz
FIDRES 0.12614 Hz
AQ 3.956243 sec
RG 256
EW 60.800 usec
DE 6.00 usec
TE 300.0 K
D1 1.00000000 sec
TD0 1

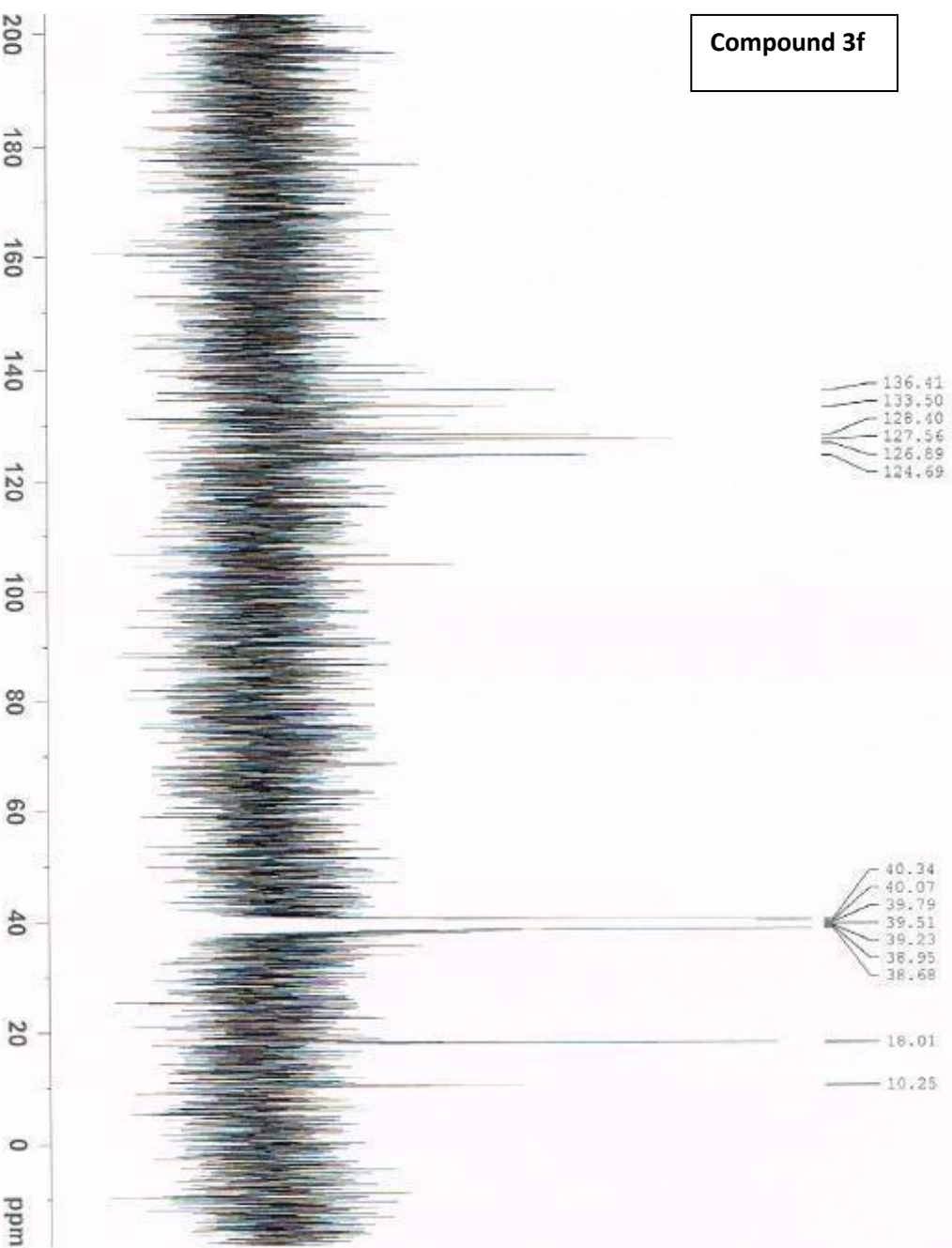
CHANNEL f1
NUC1 1H
P1 10.00 usec
PL -0.10 dB
SFO1 400.1324710 MHz

F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 400.1300000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00



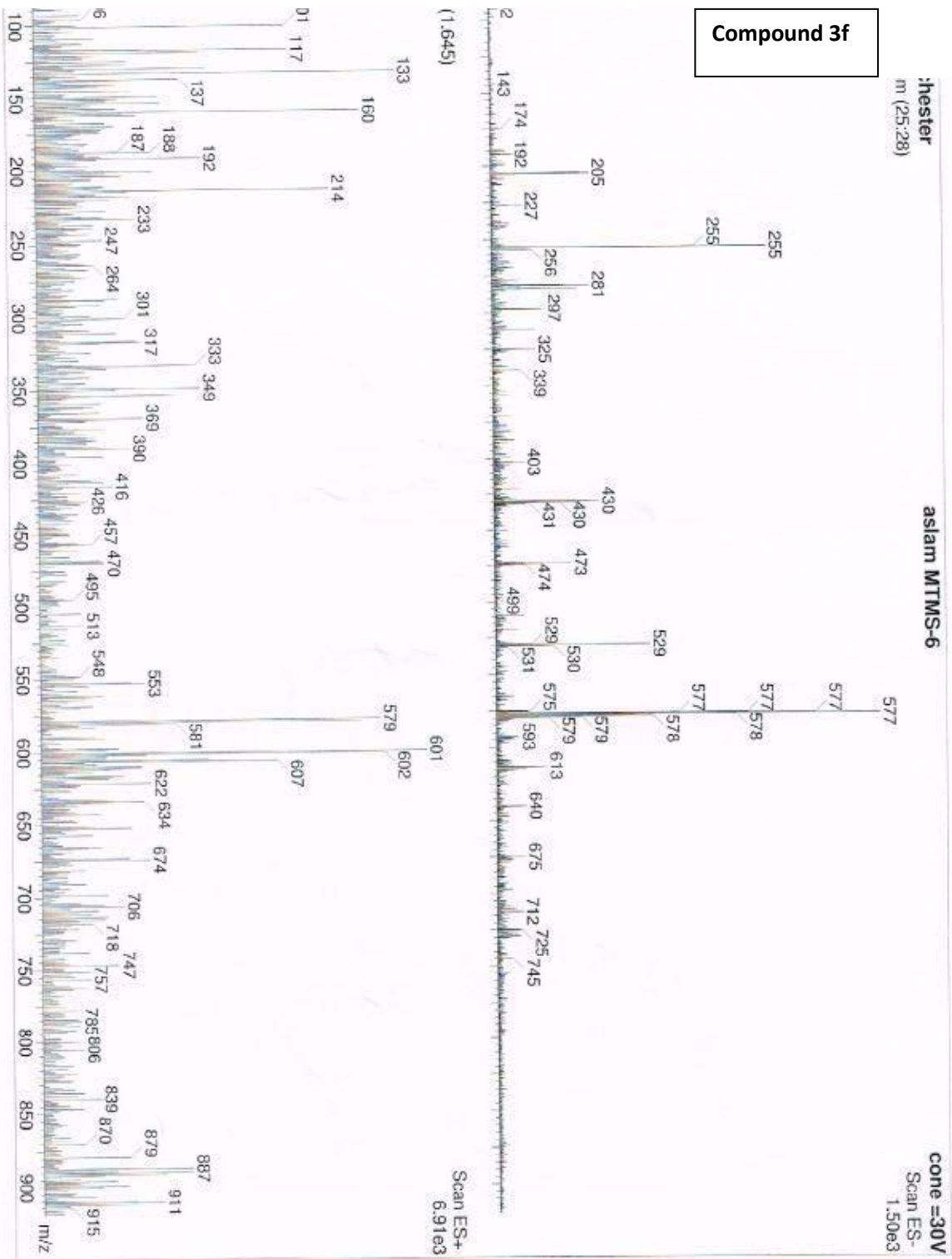
night DMSO {E:\bruk300data\2012\Jan\} JMG 39

Compound 3f



Current Data Parameters
NAME 2012-01-09-JMG-39
EXPNO 11
PROCNO 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20120110
Time 6.45
INSTRUM DFX300
PROBHD 5 mm DUL 1JC-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1024
DS 2
SWH 11851.143 Hz
FIDRES 0.272478 Hz
AQ 1.8350580 sec
RG 3155.2
FW 28.000 MHz
GB 6.00 MHz
DC 300.0 K
TS 2.00000000 sec
D1 0.01000000 sec
DELTA 1.89999998 sec
TD0 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.00 usec
PL1 -1.20 dB
SFO1 75.4700300 MHz
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 -2.60 dB
PL12 14.50 dB
PL13 15.00 dB
SFO2 299.9512000 MHz
F2 - Processing Parameters
SI 32768
SF 75.425447 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.40

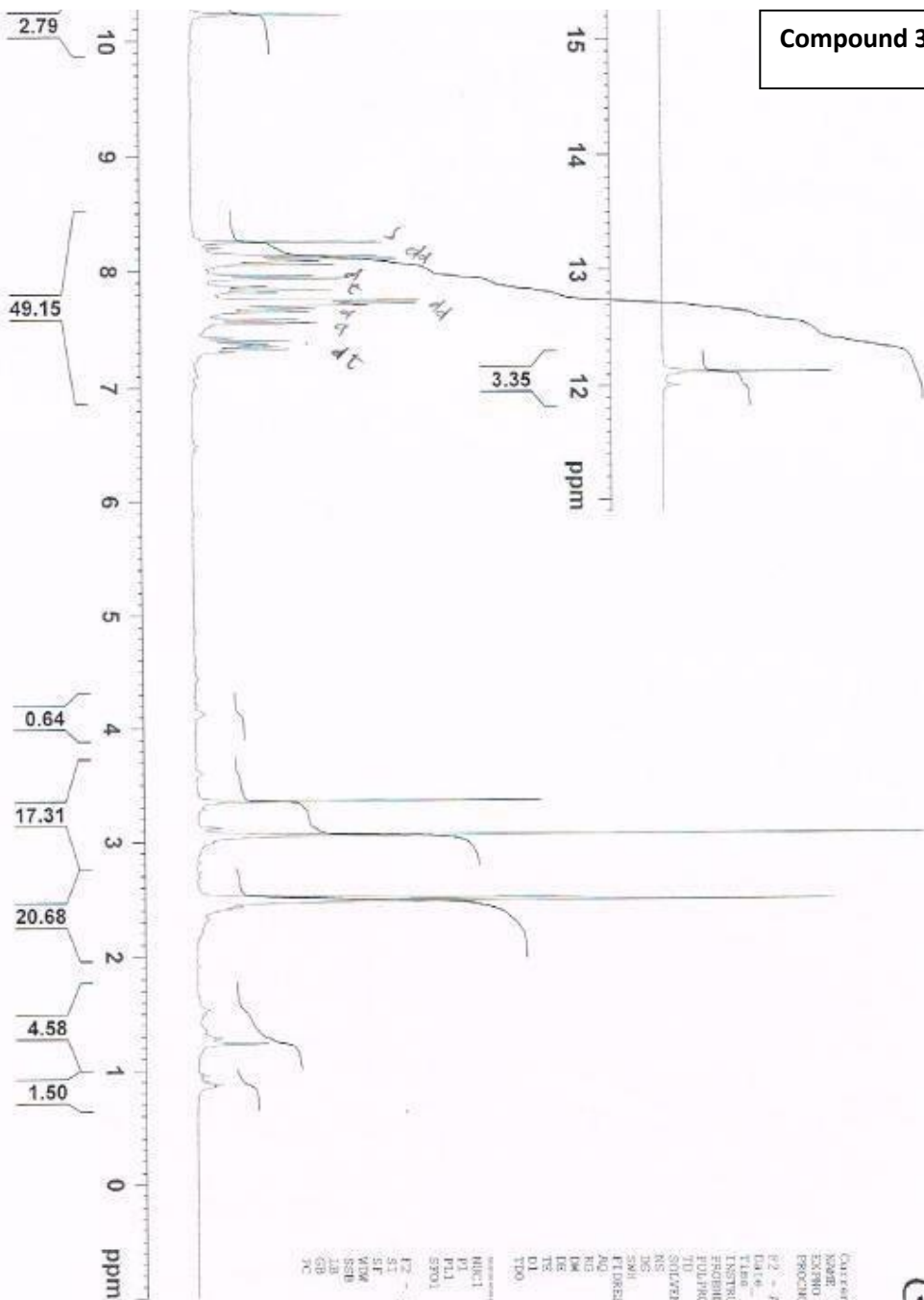
Compound 3f





Compound 3g

light DMSO {E:\brukr300data\2011\Dec\} JMG 42

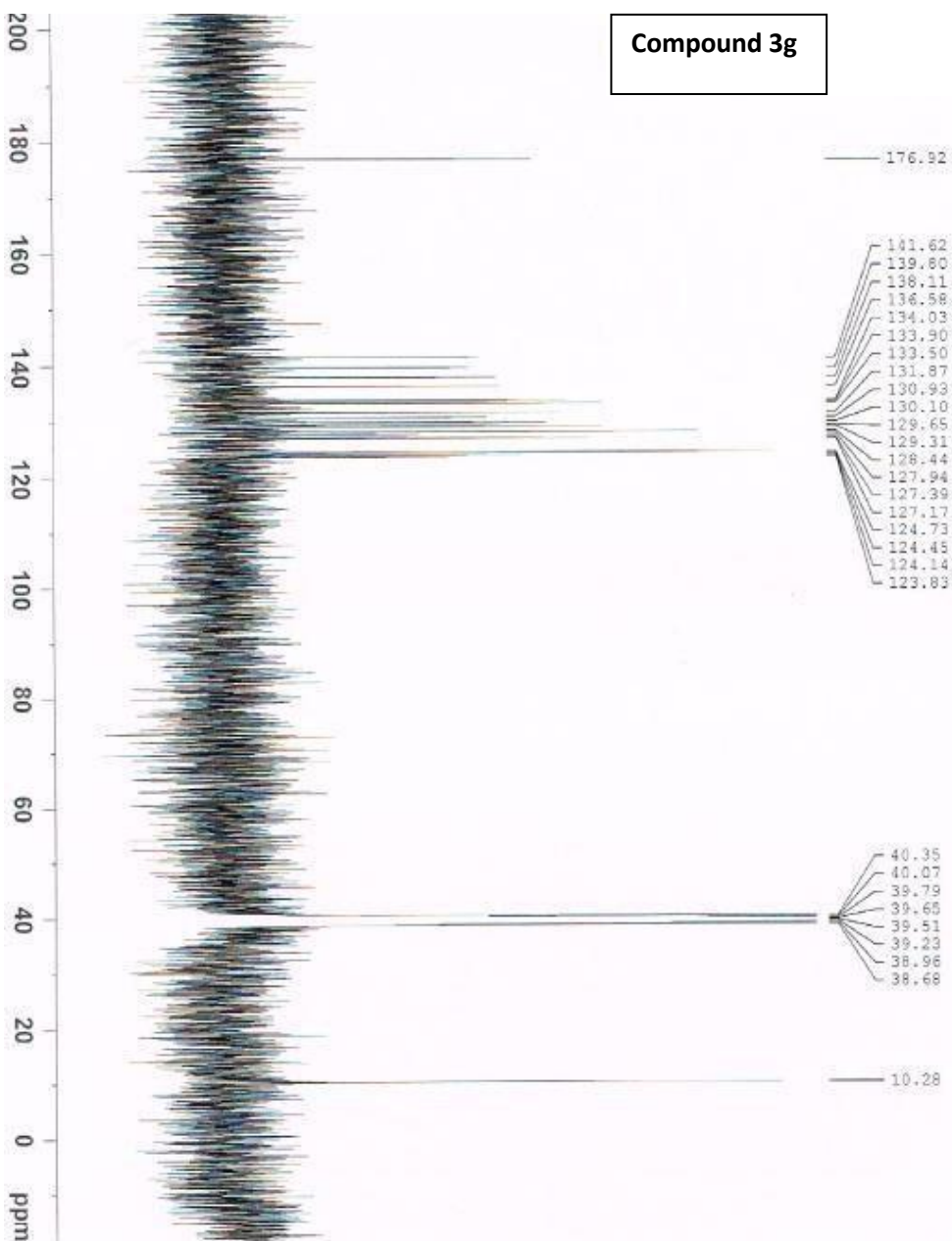


Current Data Parameters
NAME: 2011-12-14-JMG-42
EXTNO: 10
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_: 20111216
Time: 2.49
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm QNP 1H-13
PULPROG: zgpg30
FIDPROC: 65536
SOLVENT: DMSO
NS: 16
DS: 0
SWH: 6172.839 Hz
FIDRES: 0.094190 Hz
AQ: 5.3084660 sec
RG: 456.1
DM: 81.000 usec
DE: 6.00 usec
TE: 300.0 K
D1: 0.10000000 sec
TDO: 1
===== CH3OH, F1 =====
NUC1: 1H
P1: 10.00 usec
PL1: -2.00 dB
SFO1: 299.9518523 MHz
F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 299.9500000 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 0.30 Hz
GB: 0
PC: 1.00

night DMSO {E:\bruk300\data\2011\Dec} JMG 42



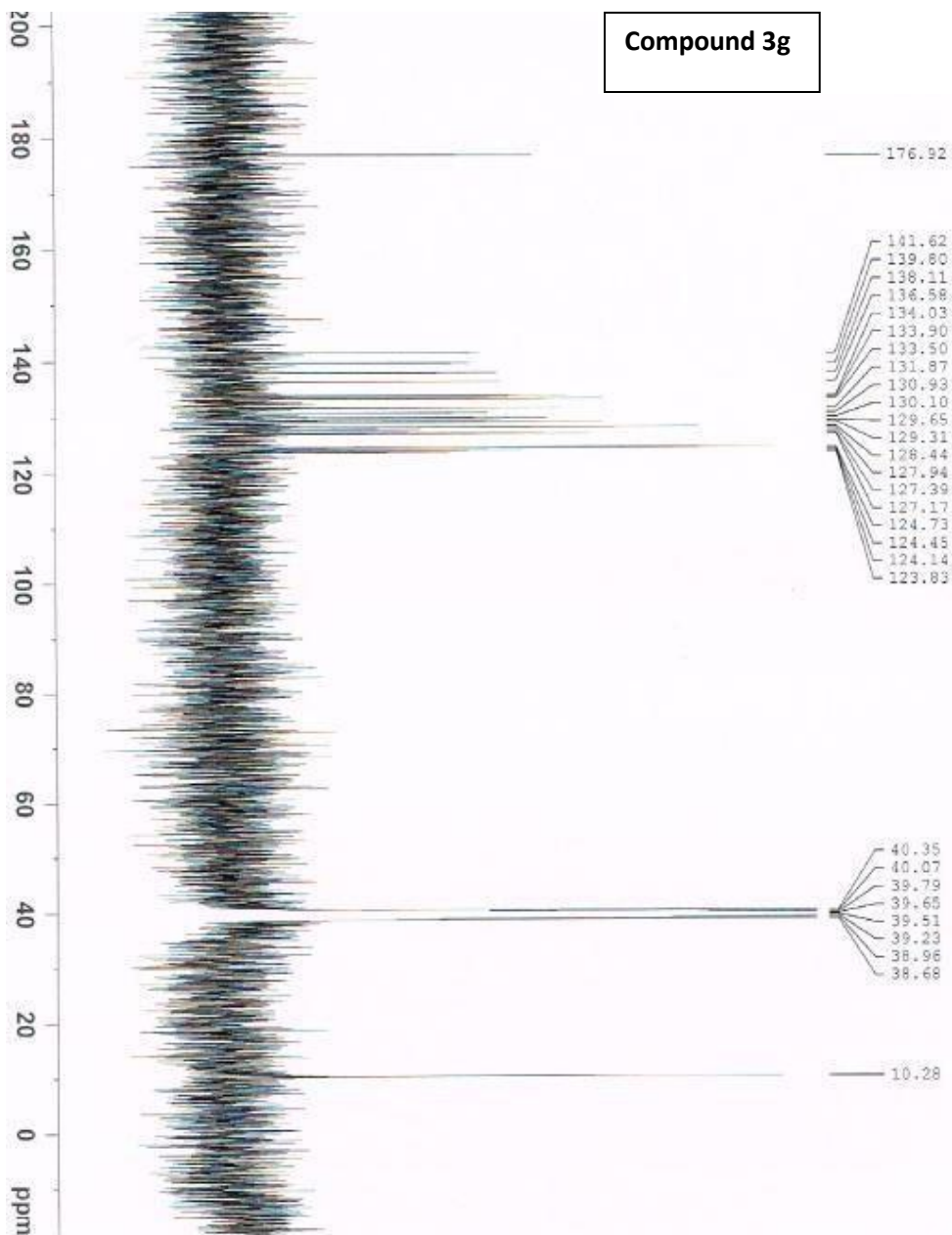
Compound 3g



Current Data Parameters
NAME 2011-12-11-005-42
EXPNO 1
PROCNO 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20111216
Time 1:57
INSTRUM DEK300
PROBHD 5 mm DPL 13C-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1020
DS 2
SWH 17857.143 Hz
FIDRES 0.272778 Hz
AQ 1.830300 sec
RG 128.000
RG 128.000
AQ 6.00 usec
RG 300.0 K
TE 300.2 K
DE 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
DELTA 1.89999998 sec
TDC
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.00 usec
PL1 -1.20 dB
SFO1 75.460050 MHz
===== CHANNEL f2 =====
CEPRPG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 60.00 usec
PL2 12.60 dB
PL12 14.50 dB
PL13 15.50 dB
SFO2 299.9912000 MHz
F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.425247 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

Compound 3g

light DMSO {E:\bruk300data\2011\Dec} JMG 42



Current Data Parameters
NAME 2011-12-14-BE-42
EXPNO 11
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20111216
Time 1:57
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm DPL 13C-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1024
DS 4
SWH 17857.141 Hz
FIDRES 0.27278 Hz
AQ 1.835080 sec
RG 14596.5
DM 28.000 usec
DE 6.00 usec
TE 300.2 K
D1 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
DELTA 1.89999998 sec
TDC 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.00 usec
PL1 -1.20 dB
SFO1 75.430050 MHz

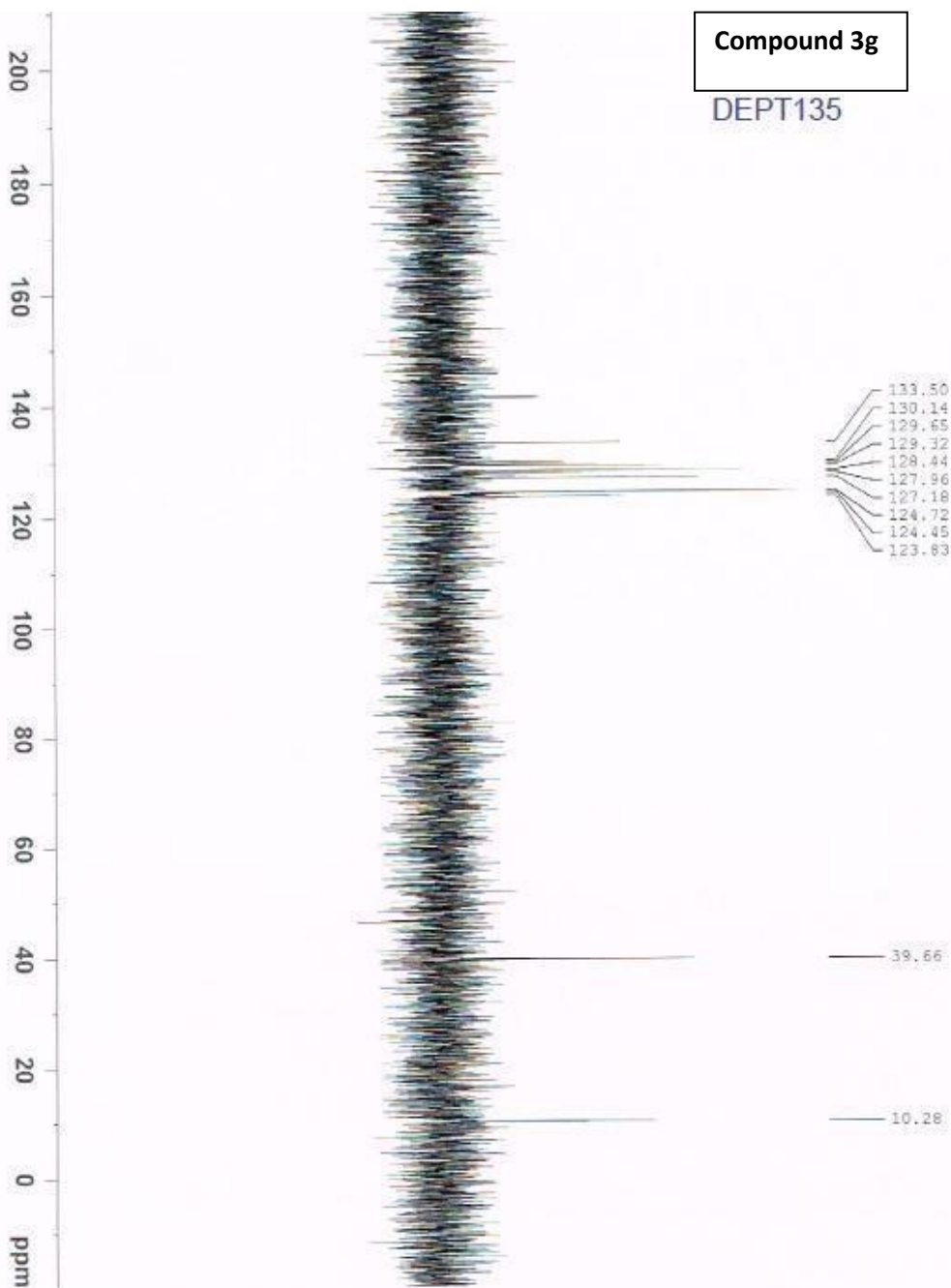
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
KIN2 18
PCPD2 60.00 usec
PL2 -2.60 dB
PL12 14.50 dB
PL13 15.00 dB
SFO2 299.9512000 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.422547 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

35night DMSO {E:\bruk300\data\2011\Dec\} JMG 42

Compound 3g

DEPT135



Current Data Parameters
 NAME 2011-12-14-JMG-42
 EXPNO 12
 PROCNO 1
 F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20111216
 Time_ 4.06
 INSTRUM DEK300
 PROBRD 5 mm ETV 13C-1
 PULPROG zgpg30
 TD 65536
 FIDRES 0.0001273
 AQ 1.6384
 SFO1 125.760327
 SOLVENT DMSO
 NS 120
 DS 4
 SWH 11965.411 Hz
 FIDRES 0.0001273 Hz
 AQ 1.6384
 SFO1 125.760327
 SFO2 299.611996 MHz
 CHANNEL F1
 NUC1 13C
 P1 10.00 usec
 P2 20.00 usec
 PL1 -1.20 dB
 SFO1 125.760327 MHz
 CHANNEL F2
 NUC2 1H
 P3 10.50 usec
 P4 21.00 usec
 PCPDZ 60.00 usec
 PL2 2.00 dB
 PL12 14.50 dB
 SFO2 299.611996 MHz
 F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 75.422547 MHz
 WHW 0
 WDW EM
 RB 1.00 Hz
 GB 0
 SC 1.40

Elemental Composition Report

Compound 3g

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

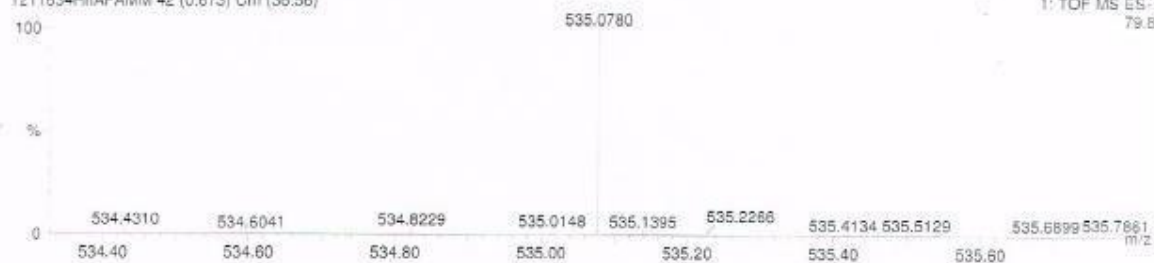
Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

593 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

aslam MTMS-7

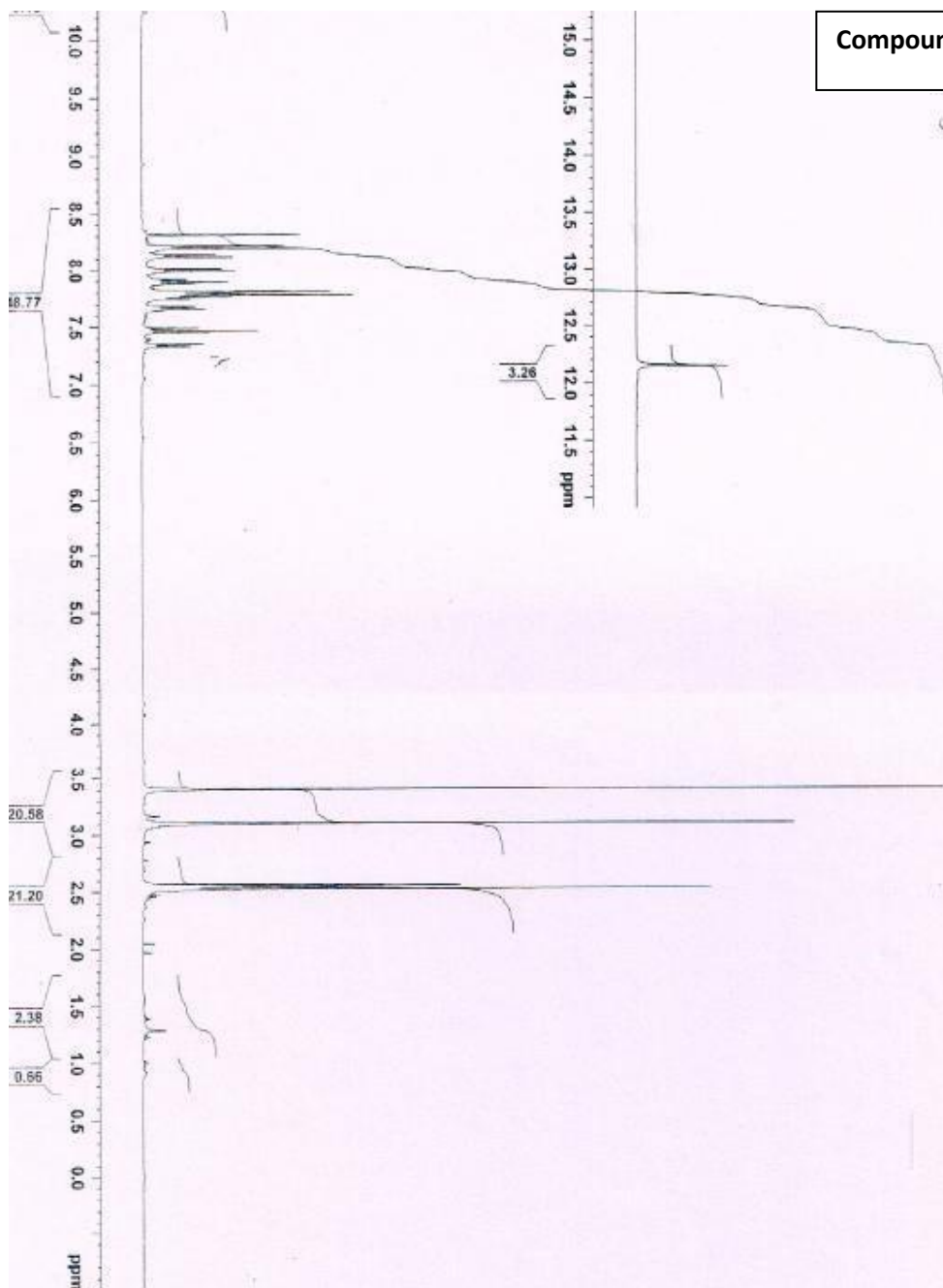
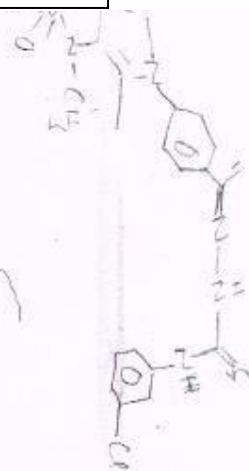
1211634-HnAFAMM 42 (0.673) Cm (36:56)

100

Cone: 30V
1: TOF MS ES-
79.8Minimum: 30.00
Maximum: 100.00200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
535.0780	100.00	535.0783	-0.3	-0.5	18.5	n/a	C25 H20 N6 O2 S2 Cl +e
		535.0769	1.1	2.0	13.5	n/a	C24 H24 N2 O6 S2 Cl +e
		535.0769	1.1	2.0	19.0	n/a	C23 H18 N9 O S2 Cl +e
		535.0796	-1.6	-3.0	18.0	n/a	C27 H22 N3 O3 S2 Cl +e
		535.0756	2.4	4.5	14.0	n/a	C22 H22 N5 O5 S2 Cl +e

Compound 3h



Current Data Parameters
NAME Dec06-2011-1MG
EXPNO 40
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20111206
Time 18:23
INSTRUM spect
PROCNO 5
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 16
DS 2
SWH 8278.146 Hz
FIDRES 0.126314 Hz
AQ 3.9986203 sec
RG 327.5
AQ 64.100 usec
DE 6.00 usec
TE 300.1 K
D1 1.00000000 sec
TDO 1

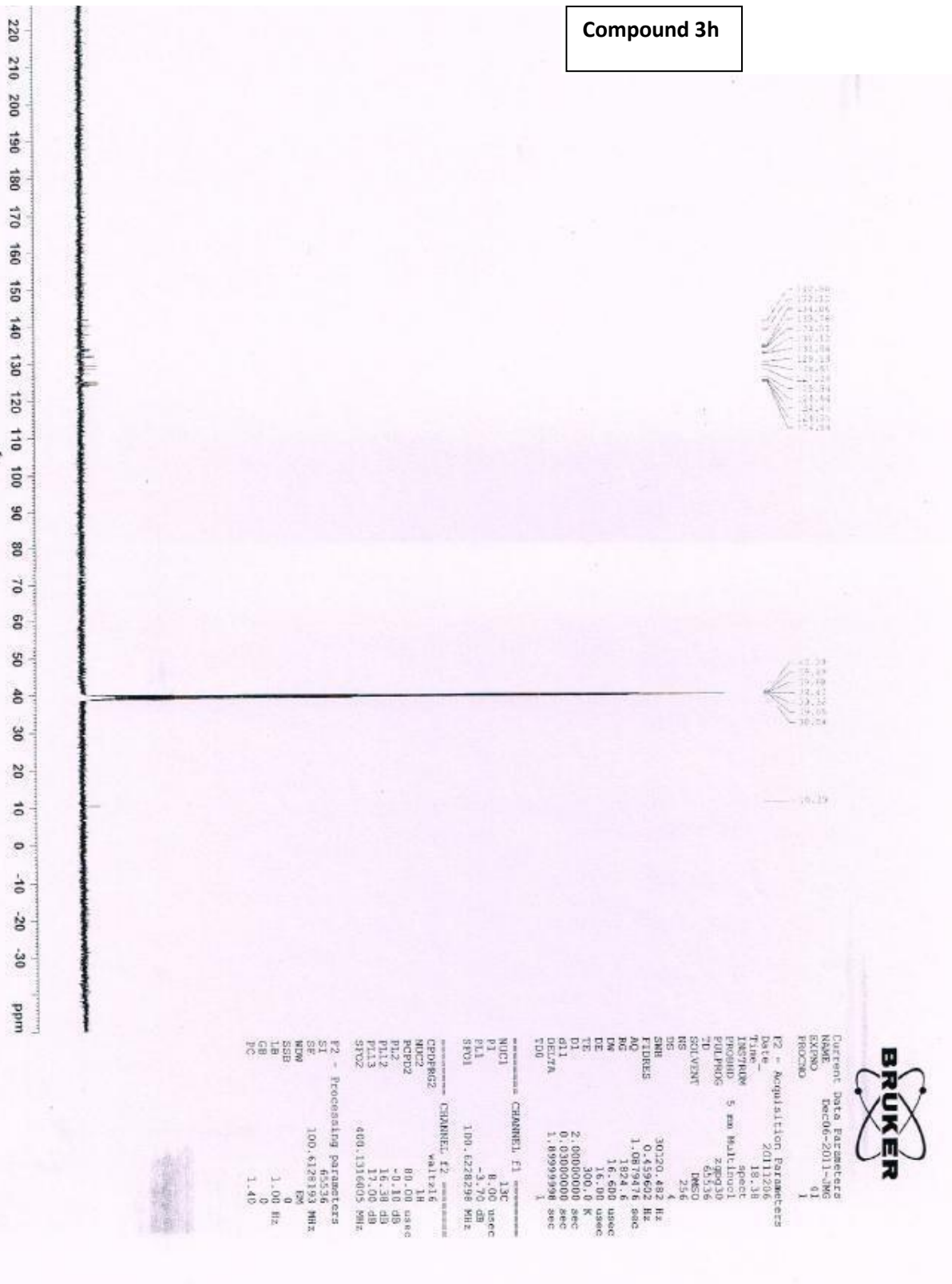
===== CHANNEL f1 =====

MUCL 1H
P1 10.00 usec
PL1 -0.10 dB
SFO1 400.1324710 MHz

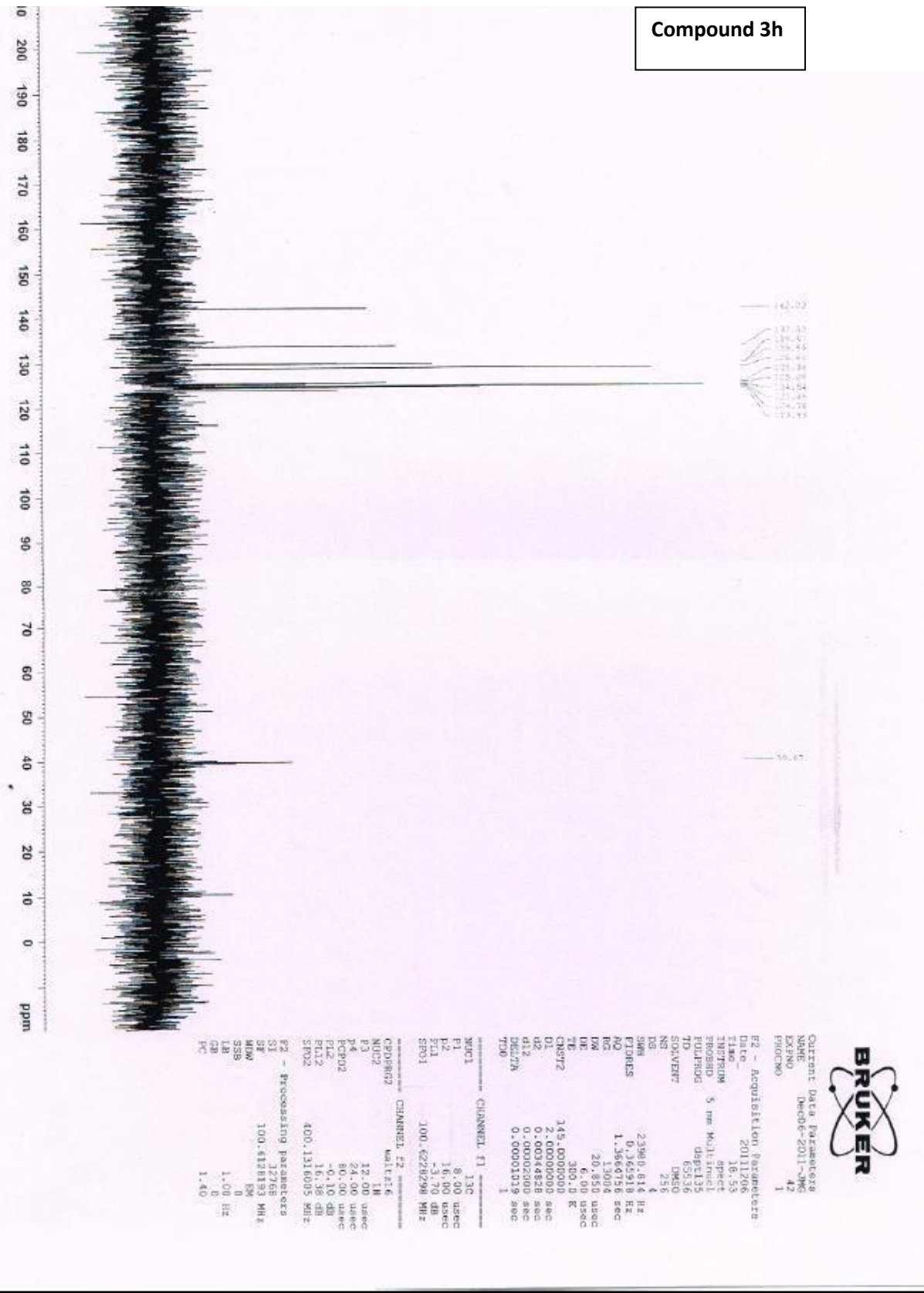
F2 - Processing parameters

SI 65536
SF 400.1299797 MHz
WDW EM
SSB 0
GB 0
PC 1.00

Compound 3h



Compound 3h



Compound 3h

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

593 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Asiam MTMS-8

1211465HnAFAMM 67 (1.099) Cm (67.69)

Cone= 30V
1: TOF MS ES-
30.8



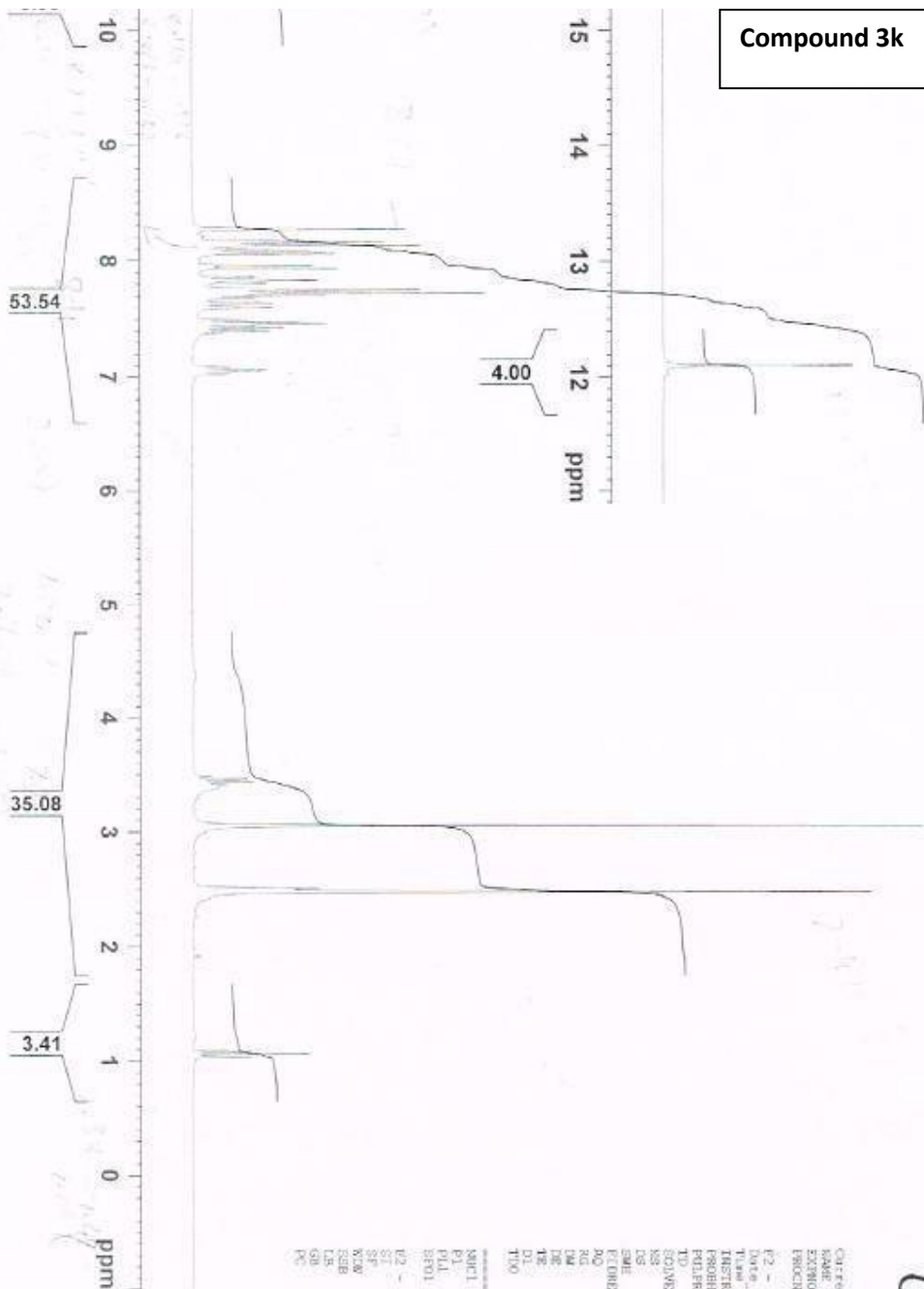
Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

200.0 5.0 50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
535.0777	100.00	535.0783	-0.6	-1.1	18.5	n/a	C25 H20 N6 O2 S2 Cl +e
		535.0769	0.8	1.4	13.5	n/a	C24 H24 N2 O6 S2 Cl +e
		535.0769	0.8	1.4	19.0	n/a	C23 H18 N9 O S2 Cl +e
		535.0796	-1.9	-3.6	18.0	n/a	C27 H22 N3 O3 S2 Cl +e
		535.0756	2.1	3.9	14.0	n/a	C22 H22 N5 O5 S2 Cl +e

Compound 3k

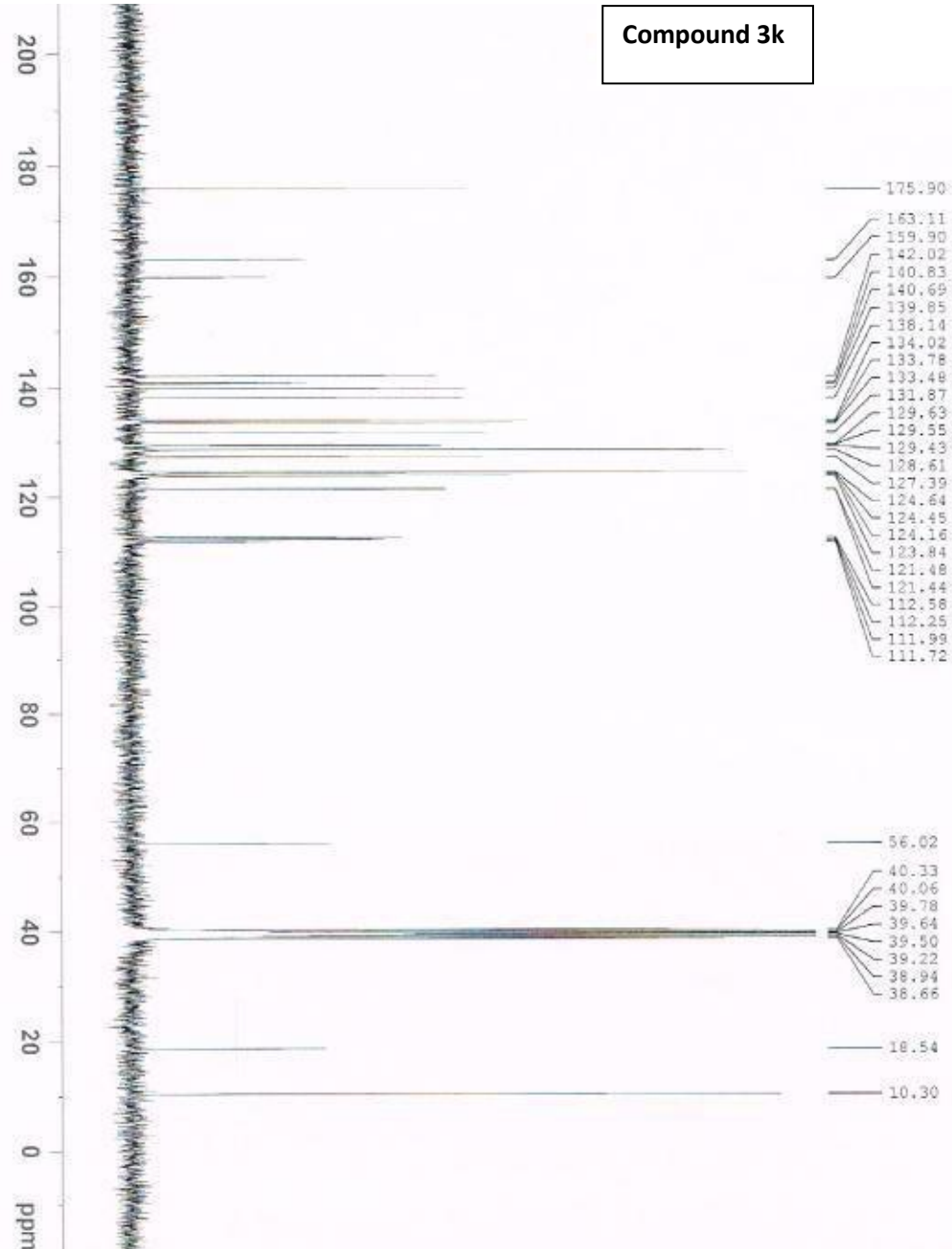
ght DMSO {E:\bruk300\data\2012\Feb\} JMG 51



Current Data Parameters
NAME 2012-02-29-385-51
EXTNO 10
PROCNO 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20120306
Time 12:42
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm ERL 113C-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 16
DS 4
SWH 6172.819 Hz
FIDRES 0.096190 Hz
AQ 5.368660 sec
RG 181
RM 0.000 usec
DE 3.000 usec
TE 300.2 K
D1 0.1000000 sec
T10
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 18.00 usec
PL1 -2.60 dB
PL10 299.951823 kHz
F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 299.950000 MHz
WDW EM
SSB 0
GB 0.30 Hz
PC 1.00

Compound 3k

Night DMSO {E:\bruk300\data\2012\Feb\} JMG 51



Current Data Parameters
NAME 2012-02-25-50F-51
EXPTNO 11
PROCNO 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20120206
Time 7.39
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm DUL 13C-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1024
DS 2
SWH 17857.143 Hz
FIDRES 0.212478 Hz
AQ 1.8350580 sec
RG 91.95.2
DB 28.000 usec
DE 6.00 usec
TE 300.0 K
D1 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
DELTA 1.89999996 sec
TDO 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.00 usec
PL1 -1.20 dB
SFO1 75.480300 MHz
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
P2 80.00 usec
PL2 -2.50 dB
F12 14.50 dB
F13 15.00 dB
SFO2 299.9512000 MHz
F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.425247 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = 1.0, max = 99.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 3k

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions
 593 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Asiam MTMS-11
 1211468HnAFAMM 52 (0.840) Cm (48-56)

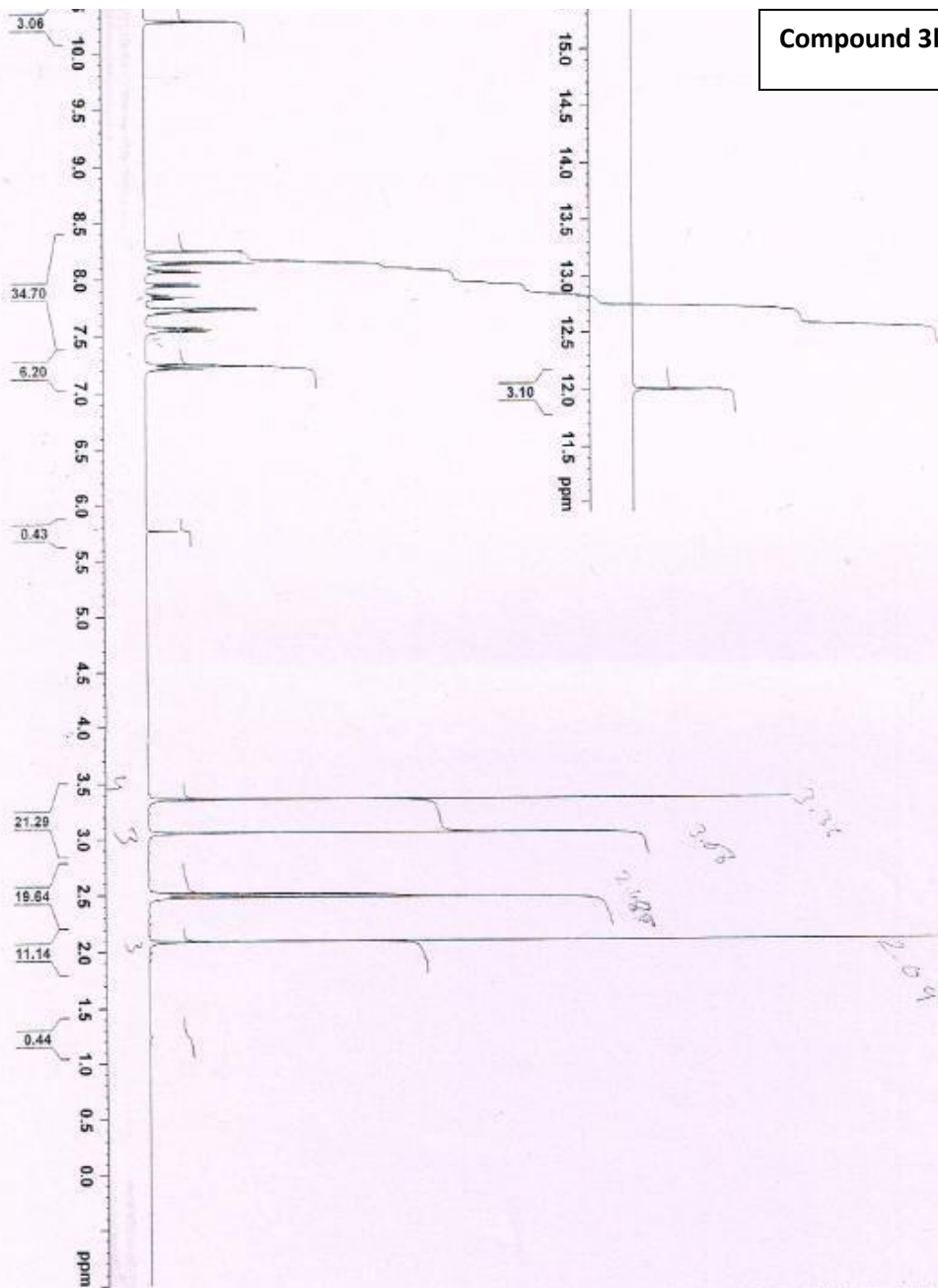


Minimum: 30.00
 Maximum: 100.00

200.0 5.0 50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
519.1072	100.00	519.1078	-0.6	-1.2	18.5	n/a	C25 H20 N6 O2 S2 F +e
		519.1065	0.7	1.4	13.5	n/a	C24 H24 N2 O6 S2 F +e
		519.1065	0.7	1.4	19.0	n/a	C23 H18 N9 O S2 F +e
		519.1092	-2.0	-3.8	18.0	n/a	C27 H22 N3 O3 S2 F +e
		519.1051	2.1	4.0	14.0	n/a	C22 H22 N5 O5 S2 F +e

Compound 3l



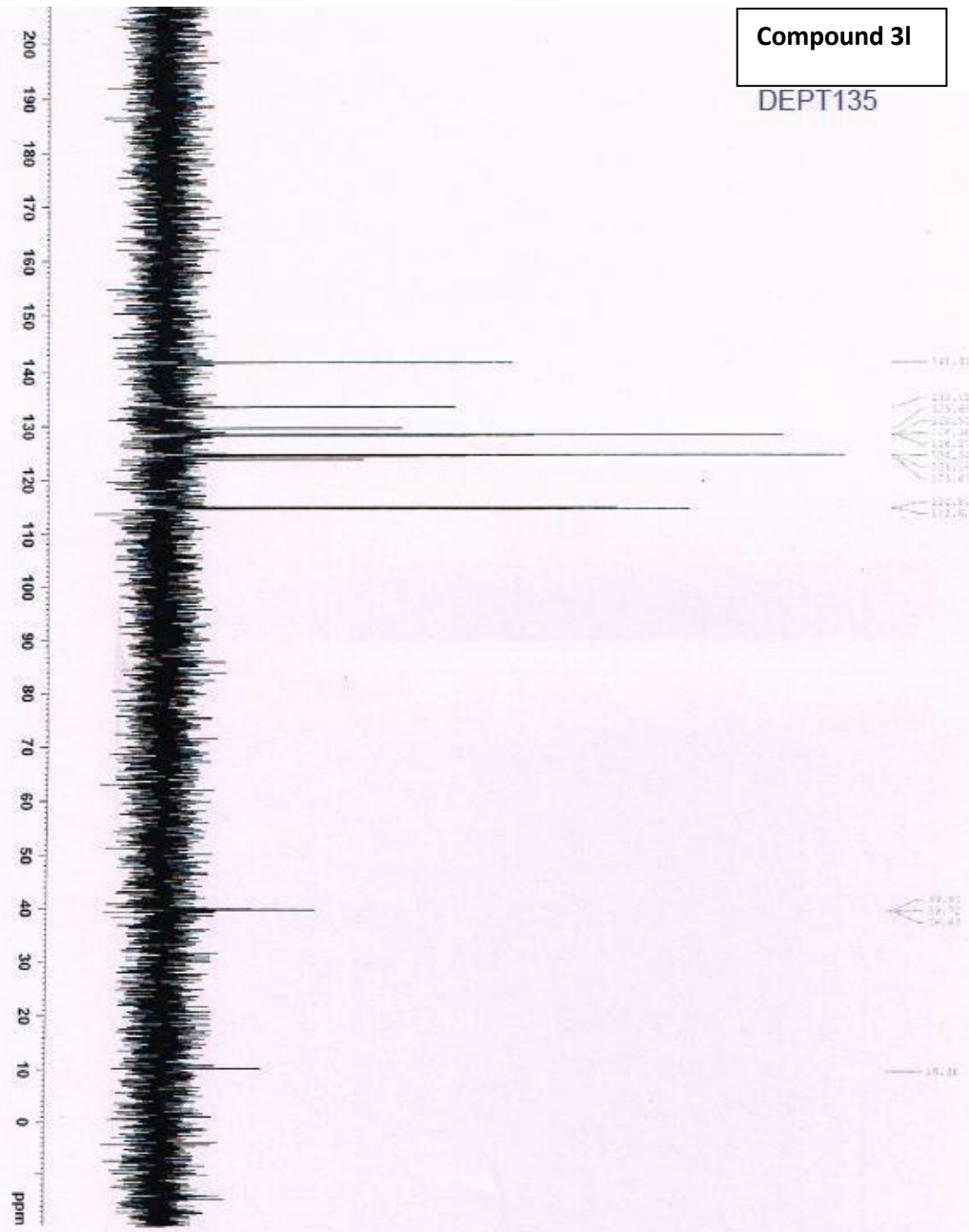
Current Data Parameters
NAME: Max05-2012-7HS
EXPNO: 20
PROCNO: 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20120105
Time 16.13
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm Naltrinecl
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 16
DS 2
SWH 8278.146 Hz
FIDRES 0.12614 Hz
AQ 1.504243 sec
RG 287.4
BW 60.400 kHz
DE 6.00 kHz
TE 300.0 K
D1 1.80000000 sec
T00 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 18
PL1 10.00 uPaG
SFO1 400.1324710 MHz
F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 400.1300000 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 1.00

Compound 3l

DEPT135



Current Data Parameters
NAME: MARD-2012-JMG
EXPER: 22
PROCNO: 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_: 20120306
Time: 5.19
INSTRUM: spect
PROBHD: 5 mm BBO1HNP2
PULPROG: zgpg30
TD: 65536
SOLVENT: DMSO
NS: 256
DS: 4
SWH: 23980.814 Hz
FIDRES: 0.365118 Hz
AQ: 1.3664756 sec
RG: 8192
BQ: 8192
BW: 20.858 usec
DE: 6.00 usec
TE: 300.2 K
CSTRT: 145.0000000 sec
D1: 3.00000000 sec
d2: 3.00344828 sec
d12: 0.00002000 sec
DELTA: 0.00001019 sec
TDO: 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1: 13C
P1: 8.00 usec
P2: 16.00 usec
PL1: 0 dB
PL2: 0 dB
SFO1: 100.628193 MHz
===== CHANNEL f2 =====
NUC2: 1H
P1: 12.00 usec
P2: 24.00 usec
PL1: 0 dB
PL2: -9.10 dB
SFO2: 400.1516005 MHz
F2 - Processing parameters
SI: 32768
SF: 100.6128193 MHz
WDW: EM
SSB: 0
LB: 1.00 Hz
GB: 0
PC: 1.40

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 3I

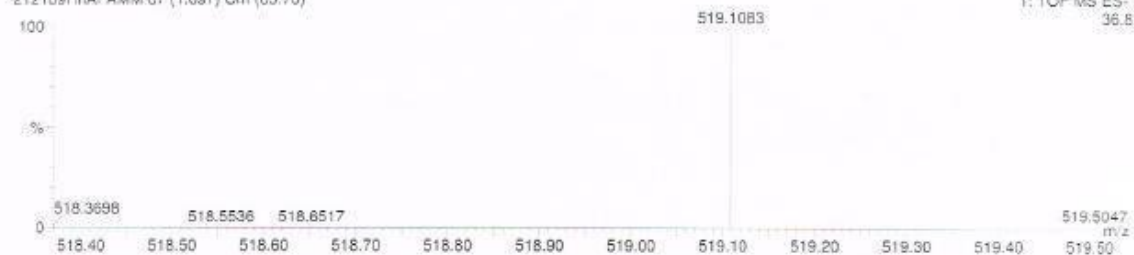
Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

593 formula(e) evaluated with 4 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

asiam MTMS-12

212189HnAFAMM 67 (1.097) Cm (65:70)

Cone= 30V
1: TOF MS ES-
36.6

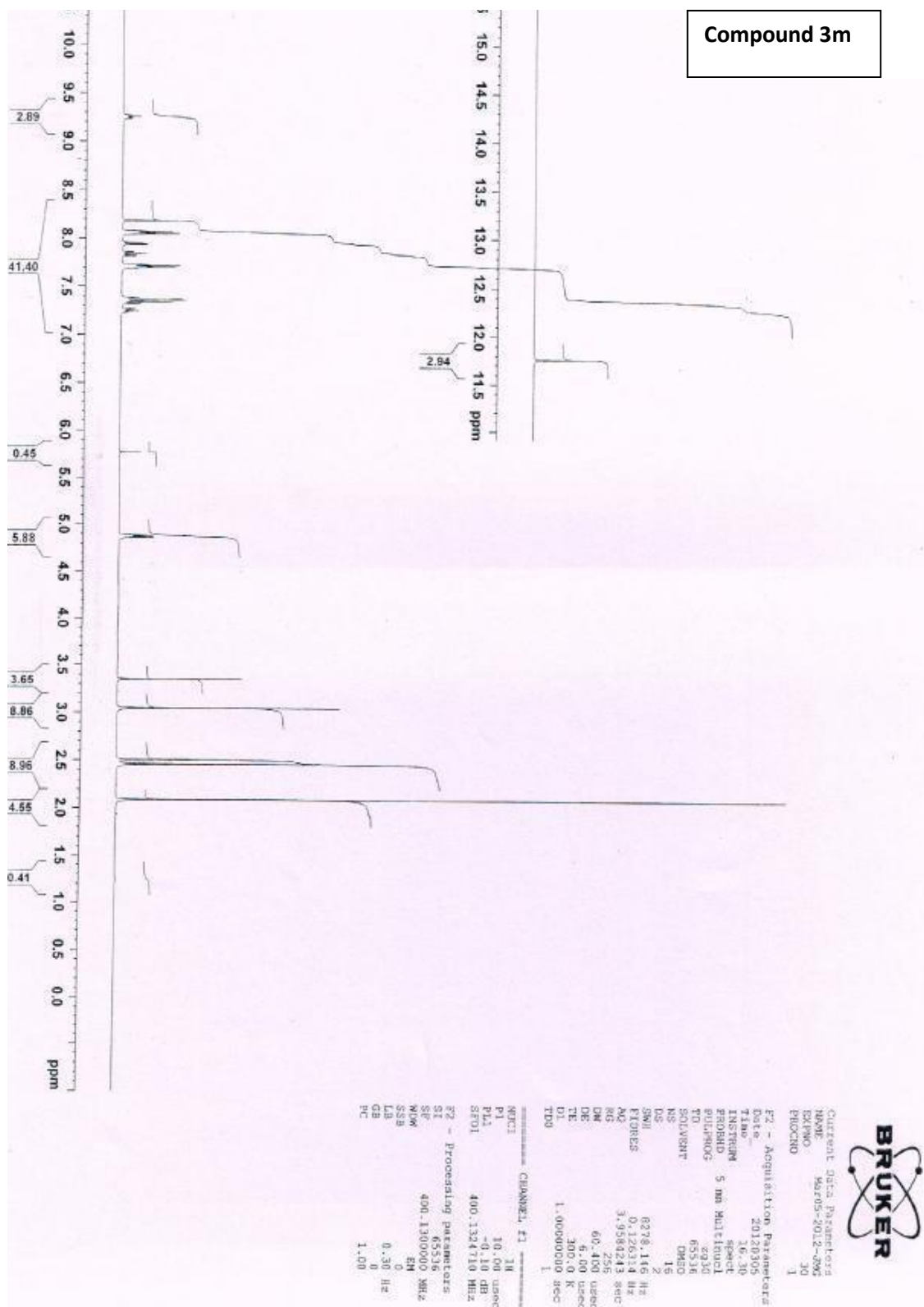


Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

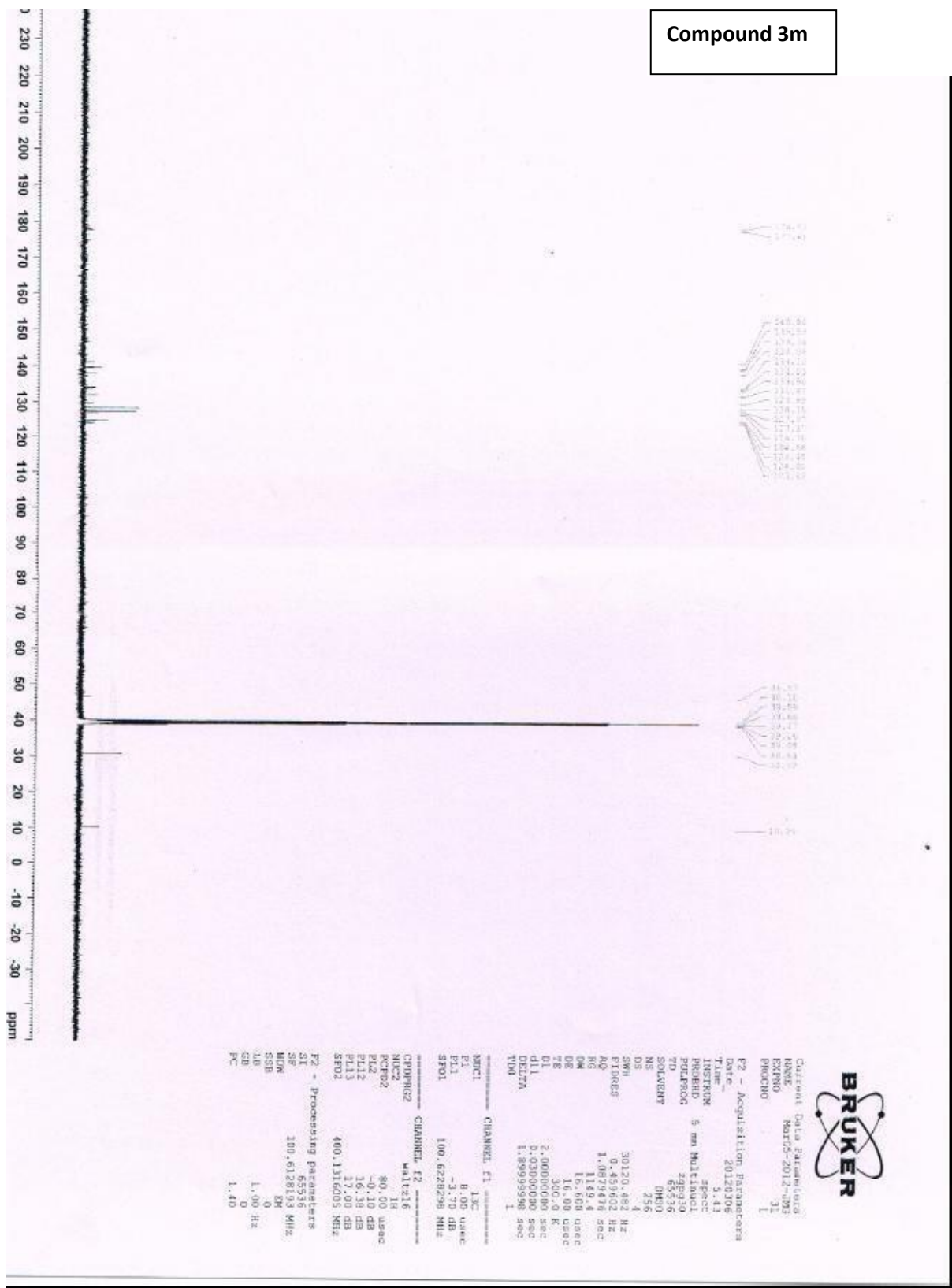
Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
519.1083	100.00	519.1078	0.5	0.9	18.5	n/a	C25 H20 N5 O2 F S2 +e
		519.1092	-0.9	-1.7	18.0	n/a	C27 H22 N3 O3 F S2 +e
		519.1065	1.8	3.5	13.5	n/a	C24 H24 N2 O6 F S2 +e
		519.1065	1.8	3.5	19.0	n/a	C23 H18 N9 O F S2 +e

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
519.1083	100.00	519.1078	0.5	0.9	18.5	n/a	C25 H20 N5 O2 F S2 +e
		519.1092	-0.9	-1.7	18.0	n/a	C27 H22 N3 O3 F S2 +e
		519.1065	1.8	3.5	13.5	n/a	C24 H24 N2 O6 F S2 +e
		519.1065	1.8	3.5	19.0	n/a	C23 H18 N9 O F S2 +e

Compound 3m



Compound 3m



Page 1

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

676 formula(e) evaluated with 5 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

aslam MTMS-13
212190HnAFAMM 79 (1.288) Cm (78.89)

1: TOF MS ES-
60.8



Minimum:	30.00					-1.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							</
----------	-------	--	--	--	--	------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	----

Compound 3m

hnt DMSO {E:\bruk300\data\2011\Dec\} JMG 18



Compound 3o



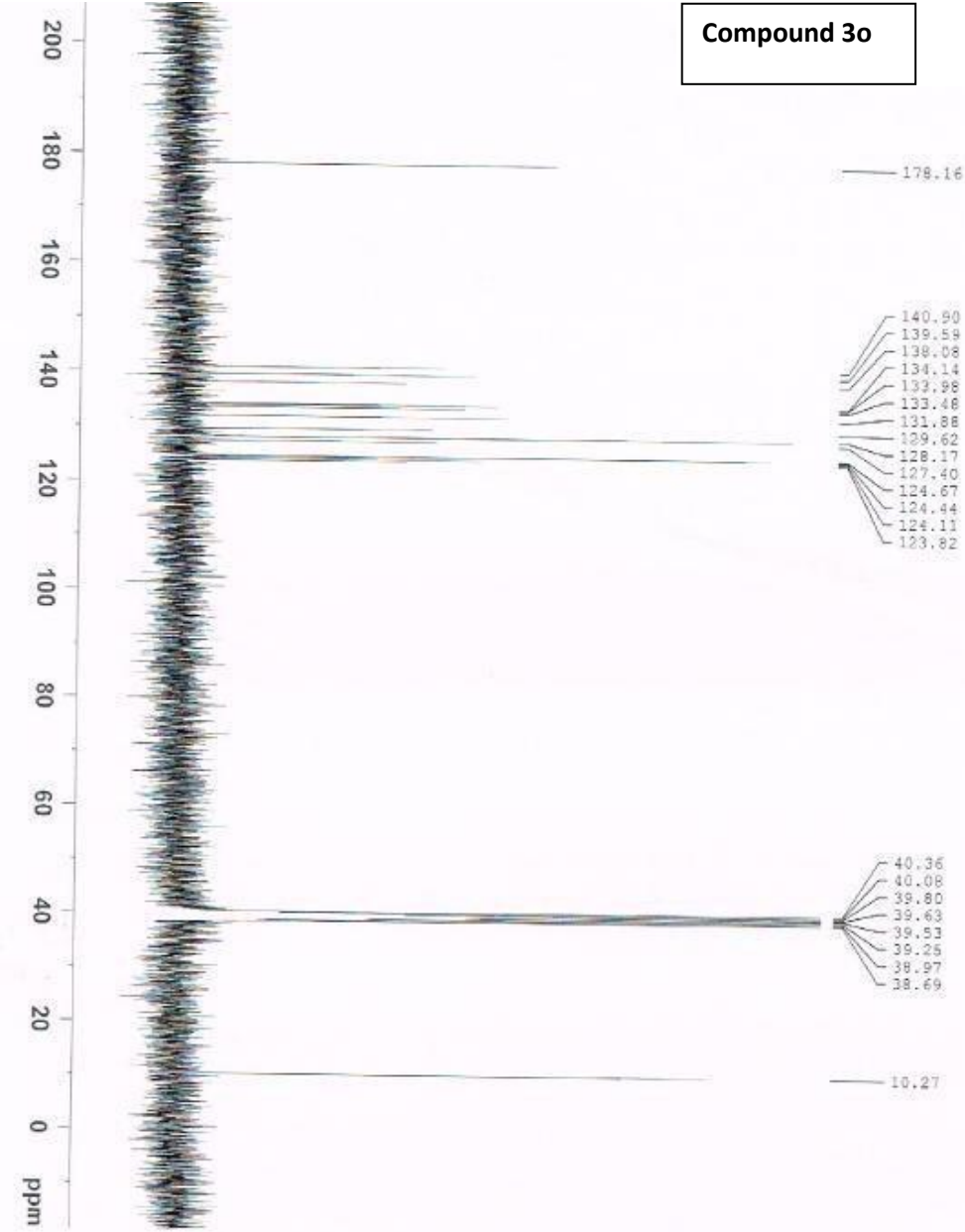
Current Data Parameters
 NAME 2011-12-01-C05-18
 DATE 2011-12-01
 TIME 10:00
 INSTRUM DMSO
 PROBHD 5 mm DOL 13C-1
 PULPROG zgpg30
 TD 65536
 FIDRES 0.094190 Hz
 AQ 5.308460 sec
 RG 456.1
 DS 0
 SFO 400.146 MHz
 SOLVENT DMSO
 NS 16
 DS 0
 SWH 6171.839 Hz
 F1CHSE 0.094190 Hz
 AQ 5.308460 sec
 RG 456.1
 DS 0
 SFO 400.146 MHz
 T1 1.500000 sec
 T1R 0.1000000 sec
 T1D 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -2.00 dB
 SFO1 299.9918521 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 32768
 SF 299.9900000 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0.30 Hz
 GB 0
 PC 1.00

Compound 3o

Night DMSO {E:\bruk300data\2011Dec} JMG 18



Current Data Parameters
NAME 2011-12-07-JMG-18
EXTNO 11
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 2011.12.10
Time 9.03
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO 125-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1024
DS 2
SWH 17857.143 Hz
FIDRES 0.272478 Hz
AQ 1.8356580 sec
RG 9195.2
IN 28.000 umsc
NUC 13C
P1 10.00
PC 1.00
DELT 0.0300000 sec
T1 1.0394529 sec
T1RHO 1.0394529 sec
T2 1.0394529 sec

Channel F1
NUC1 13C
P1 10.00 umsc
PL1 -1.20 dB
SFO1 75.480300 MHz

Channel F2
NAME 2011.12.10
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO 125-1
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT DMSO
NS 1024
DS 2
SWH 17857.143 Hz
FIDRES 0.272478 Hz
AQ 1.8356580 sec
RG 9195.2
IN 28.000 umsc
NUC 13C
P1 10.00
PC 1.00
DELT 0.0300000 sec
T1 1.0394529 sec
T1RHO 1.0394529 sec
T2 1.0394529 sec

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.480300 MHz
WDW EM
SSB 0
GB 0
PC 1.00

Elemental Composition Report

Compound 3o

Page 1

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

525 formula(e) evaluated with 4 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

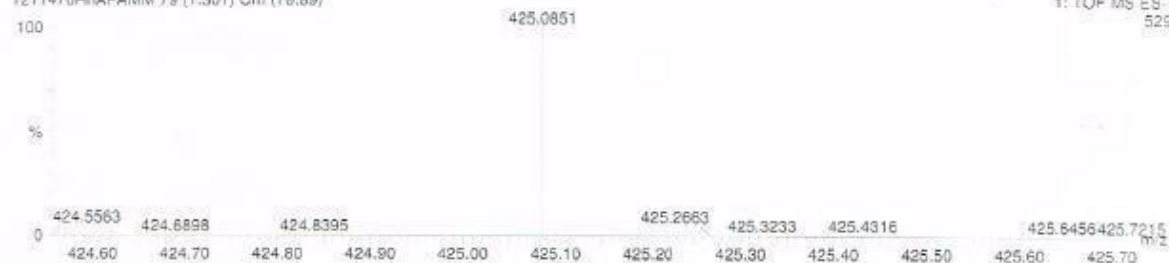
Aslan MTMS-15

1211470HzAFAMM 79 (1.301) Cm (78:89)

Cone= 30V

1: TOF MS ES

529



Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
425.0851	100.00	425.0846	0.5	1.2	9.5	n/a	C18 H21 N2 O6 S2 +e
		425.0846	0.5	1.2	15.0	n/a	C17 H15 N9 O S2 +e
		425.0859	-0.8	-2.0	14.5	n/a	C19 H17 N6 O2 S2 +e
		425.0833	1.8	4.3	10.0	n/a	C16 H19 N5 O5 S2 +e

MTMS-16

Compound 4a

MTNS-16

Compound 4a

210

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0
Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4a

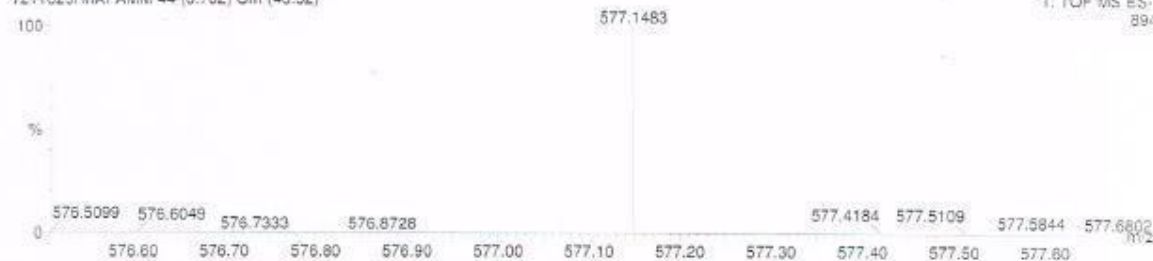
Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

1066 formula(e) evaluated with 6 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

aslam MTMS-16

1211629HnAFAMM 44 (0.702) Cm (43.52)

Cone= 30V
1, TOF MS ES-
894



Minimum: 30.00
Maximum: 100.00
200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
577.1483	100.00	577.1485	-0.2	-0.4	22.5	n/a	C31 H25 N6 O2 S2 +e
		577.1472	1.1	1.9	17.5	n/a	C30 H29 N2 O6 S2 +e
		577.1472	1.1	1.9	23.0	n/a	C29 H23 N9 O S2 +e
		577.1499	-1.6	-2.7	22.0	n/a	C33 H27 N3 O3 S2 +e
		577.1504	-2.1	-3.6	4.0	n/a	C20 H35 N O14 S2 +e
		577.1459	2.4	4.2	18.0	n/a	C28 H27 N5 O5 S2 +e

MTMS-17
mPROTONhigh

Compound 4b

15

10

2.17

MTMS-17
mCARBO

Compound 4b



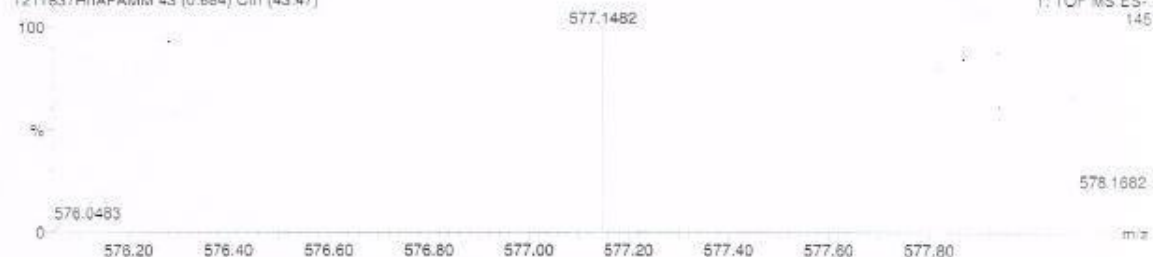
Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4b

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions
 1066 formula(e) evaluated with 6 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

asiam MTMS-17
 1211637HnAFAMM 43 (0.684) Cm (43.47)

Cone= 30V
 1: TOF MS ES-
 145



Minimum: 30.00
 Maximum: 100.00

200.0 5.0
 -1.5 50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula					
577.1482	100.00	577.1485	-0.3	-0.6	22.5	n/a	C31	H25	N6	O2	S2	+e
		577.1472	1.0	1.7	17.5	n/a	C30	H29	N2	O6	S2	+e
		577.1472	1.0	1.7	23.0	n/a	C29	H23	N9	O	S2	+e
		577.1499	-1.7	-2.9	22.0	n/a	C33	H27	N3	O3	S2	+e
		577.1504	-2.2	-3.8	4.0	n/a	C20	H35	N	O14	S2	+e
		577.1459	2.3	4.0	18.0	n/a	C28	H27	N5	O5	S2	+e

MTMS-20
mPROTONic

Compound 4e



MTMS-20
mCARBONn

Compound 4e

208.44



20

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4e

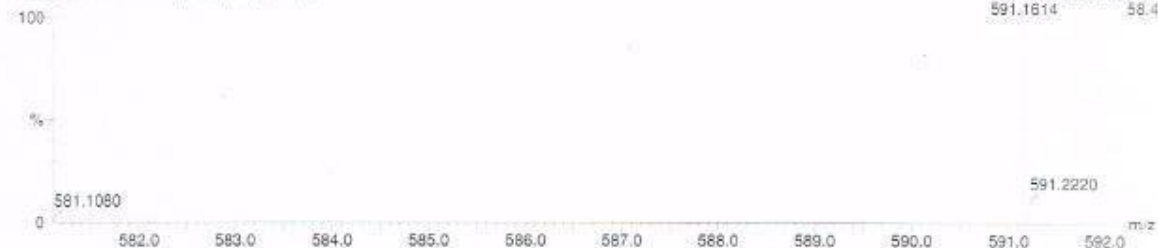
Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

739 formula(e) evaluated with 3 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

asiam MTMS-20

112091HnAFAMM 44 (0.698) Cm (39:47)

Cone= 30V
1: TOF MS ES-
591.1614 58.4

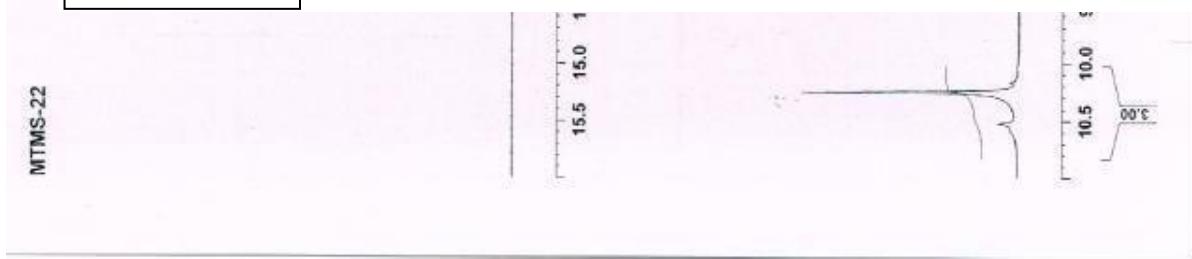


Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
591.1614	100.00	591.1629	-1.5	-2.5	23.0	n/a	C30 H25 N9 O S2 +e
		591.1629	-1.5	-2.5	17.5	n/a	C31 H31 N2 O6 S2 +e
		591.1642	-2.8	-4.7	22.5	n/a	C32 H27 N6 O2 S2 +e

Compound 4g



Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4g

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

603 formula(e) evaluated with 2 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

asiam MTMS-22
1211635HnAFAMM 48 (0.780) Cm (45.47)

Conew 30V
1: TOF MS ES-
14.9



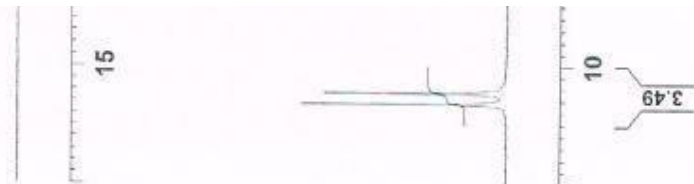
Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
597.0935	100.00	597.0939	-0.4	-0.7	22.5	n/a	C30 H22 N6 O2 S2 Cl1 +e
		597.0953	-1.8	-3.0	22.0	n/a	C32 H24 N3 O3 S2 Cl1 +e

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
597.0935	100.00	597.0939	-0.4	-0.7	22.5	n/a	C30 H22 N6 O2 S2 Cl1 +e
		597.0953	-1.8	-3.0	22.0	n/a	C32 H24 N3 O3 S2 Cl1 +e

MTMS-23
mPROTONight D

Compound 4h



MTMS-23
mCARBONn

Compound 4h



21

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4h

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions
 603 formula(e) evaluated with 1 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

aslan MTMS-23
 1211636HnAFAMM 85 (1.379) Cm (81:87)

Conc= 30V
 1: TOF MS ES.
 13.3

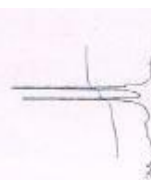


Minimum: 30.00
 Maximum: 100.00
 200.00 5.00 50.00

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
597.0911	100.00	597.0939	-2.8	-4.7	22.5	n/a	C30H22N6O2S2Cl1

MTMS-26

15.5 15.0 1



10.5 10.0 9

2.39

Compound 4k

MTWS-26

Compound 4k

210

Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4k

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

603 formula(e) evaluated with 2 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Asiam MTMS-26

1211471HnAFAMM 40 (0.647) Cm (37:43)

Cone= 30V
1: TOF MS ES-
19.6

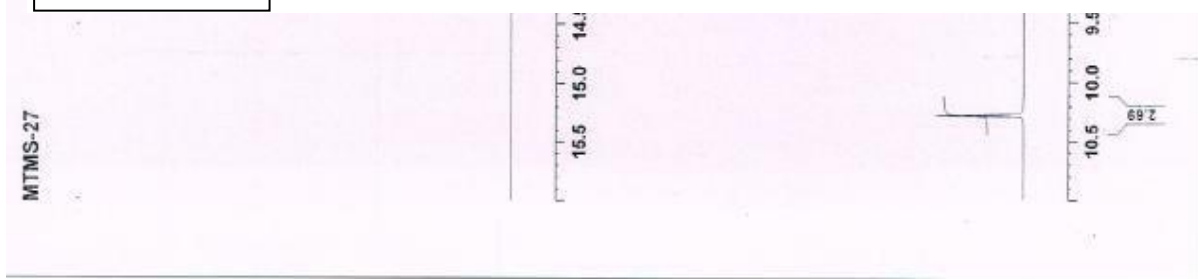


Minimum: 30.00
Maximum: 100.00

200.0 5.0 -1.5
50.0

Mass	RR	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula					
581.1246	100.00	581.1248	-0.2	-0.4	22.0	n/a	C32	H24	N3	O3	S2	F: +6
		581.1235	1.1	1.9	22.5	n/a	C30	H22	N6	O2	S2	P: +6

Compound 4l



MTMS-27

Compound 4l

Maxfield
240 230

NTMS-27

Compound 4l

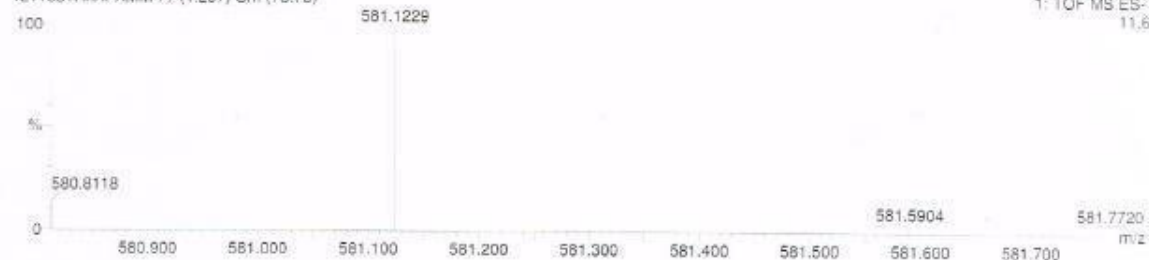


210

Compound 4l

aslam MTMS-27
1211631HnAFAMM 77 (1.237) Crt (75:78)

Cone= 30V
1: TOF MS ES-
11.6



Minimum:	30.00				-1.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
----------	-------	--	--	--	------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

MTMS-28
mPROTONiQ

Compound 4m



MTMS-28
mCARBO

Compound 4m



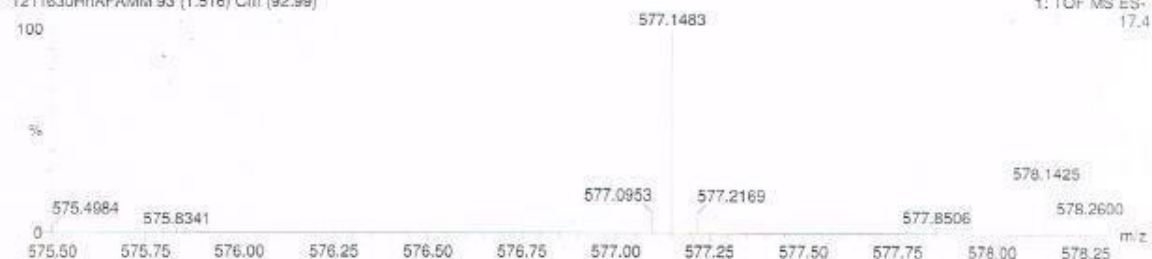
Tolerance = 5.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0
 Isotope cluster parameters: Separation = 1.0 Abundance = 1.0%

Compound 4m

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions
 1066 formula(e) evaluated with 6 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

asiam MTMS-28
 1211630HnAFAMM 93 (1.516) Cm (92:99)

Conc= 30V
 1: TOF MS ES+
 17.4



Minimum: 30.00
 Maximum: 100.00

200.0 5.0 -1.5
 50.0

Mass	RA	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Score	Formula
577.1483	100.00	577.1485	-0.2	-0.4	22.5	n/a	C31 H25 N6 O2 S2 +e
		577.1472	1.1	1.9	17.5	n/a	C30 H29 N2 O6 S2 +e
		577.1472	1.1	1.9	23.0	n/a	C29 H23 N9 O S2 +e
		577.1499	-1.6	-2.7	22.0	n/a	C33 H27 N3 O3 S2 +e
		577.1504	-2.1	-3.6	4.0	n/a	C20 H35 N O14 S2 +e
		577.1459	2.4	4.2	18.0	n/a	C28 H27 N5 O5 S2 +e