

HRMS Manuscript references	HRMS document references
3	B1
4a	B10
4b	B11
4c	B12
4d	B13
4^e	B14
4f	B15
4g	B16
4h	B17
4i	B18
4j	B19
5a	B59
5b	B58
5c	B57
5d	B60
5e	B61
5f	B62
5g	B63
5h	B64
5i	B65
6a	B53
6b	B52
6c	B55
6d	B54
6^e	B51
6f	B56
7a	B22
7b	B23
7c	B24
8a	B66
8b	B67
9a	B48
9b	B49

Plateforme
Scientifique et
Technique
-
Analyses des
Systèmes
Biologiques

PST-ASB
Faculté de médecine
Boulevard Tonnellé
37000 Tours
02-47-36-61-53
www.analyse.srm.med.univ-tours.fr



► Analyses HRMS

Montigny

► 10/11/2022

► Département d'Analyse Chimique Biologique et Médicale

► 7/8/2020

Patrick Emond

patrick.emond@univ-tours.fr

Frédéric Montigny

frederic.montigny@univ-tours.fr

Antoine Lefevre

antoine.lefevre@univ-tours.fr

Contents

INFORMATIONS.....	0
COORDONNEES DU DEMANDEUR.....	0
DEMANDE D'ANALYSE.....	0
REMARQUES.....	0
PREPARATION DES ECHANTILLONS.....	1
ECHANTILLON B1 COMPOUND 3	1
ECHANTILLON B10 COMPOUND 4A	1
ECHANTILLON B11 COMPOUND 4B	2
ECHANTILLON B12 COMPOUND 4C	2
ECHANTILLON B13 COMPOUND 4D	2
ECHANTILLON B14 COMPOUND 4E	3
ECHANTILLON B15 COMPOUND 4F	3
ECHANTILLON B16 COMPOUND 4G	4
ECHANTILLON B17 COMPOUND 4H	4
ECHANTILLON B18 COMPOUND 4I	5
ECHANTILLON B19 COMPOUND 4J	5
ECHANTILLON B22 COMPOUND 7A	5
ECHANTILLON B23 COMPOUND 7B	6
ECHANTILLON B24 COMPOUND 7C	6
TABLEAU RECAPITULATIF.....	8

Informations

Coordonnées du demandeur

Nom : Messaoudi Chaima

E-Mail : mohamed.abarbri@univ-tours.fr

Responsable : Mohamed Abarbri

Demande d'analyse

Demande d'analyse HRMS : confirmation de structure connue, 45 échantillons, série B 24 échantillons.

Remarques

Analyses effectuées par : Antoine Lefevre et Frédéric Montigny

Interprétation des résultats et rapport d'analyse : Frédéric Montigny

Toutes les acquisitions HRMS ont été effectuées à une résolution de 140 000 pour une m/z de 200.

La détection se fait systématiquement dans les modes positif et négatif, par contre les résultats du mode négatif ne sont présentés que s'ils apportent des informations supplémentaires par rapport aux résultats du mode positif.

Préparation des échantillons

Tous les échantillons ont été préparés en solution dans MeOH : CH₂Cl₂ (50:50 vol).

Echantillon B1 **Compound 3**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 346.89 g.mol⁻¹

Formule brute : C₉H₇Br₂N₃O₂

Détection mode positif :

On observe trois pics majoritaires M+I à 347.89784 (formule brute proposée C₉H₈⁷⁹Br₂N₃O₂ à 0.17396 ppm près, résolution supérieure à 110000), M+I à 349.89566 (formule brute proposée C₉H₈⁷⁹Br⁸¹BrN₃O₂ à -0.21742 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M+I à 351.89355 (formule brute proposée C₉H₈⁸¹Br₂N₃O₂ à -0.37654 ppm près, résolution supérieure à 110000) correspondants tous trois au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe trois pics minoritaires M-I à 345.88333 (formule brute proposée C₉H₆⁷⁹Br₂N₃O₂ à 0.30161 ppm près, résolution supérieure à 110000), M-I à 347.88152 (formule brute proposée C₉H₆⁷⁹Br⁸¹BrN₃O₂ à 0.97129 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M-I à 349.87955 (formule brute proposée C₉H₈⁸¹Br₂N₃O₂ à 1.18235 ppm près, résolution supérieure à 110000) correspondants tous trois au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B10 **Compound 4a**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 369.01 g.mol⁻¹

Formule brute : C₁₇H₁₂BrN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 370.01869 (formule brute proposée C₁₇H₁₃⁷⁹BrN₃O₂ à 0.34663 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M+I à 372.01662 (formule brute proposée C₁₇H₁₃⁸¹BrN₃O₂ à 0.27219 ppm près, résolution supérieure à 110000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B11 Compound 4b**Indications fournies :**Masse moléculaire : 383.03 g.mol⁻¹Formule brute : C₁₈H₁₄BrN₃O₂**Détection mode positif :**

On observe deux pics majoritaires M+I à 384.03428 (formule brute proposée C₁₈H₁₅⁷⁹BrN₃O₂ à 0.17170 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M+I à 386.03219 (formule brute proposée C₁₈H₁₅⁸¹BrN₃O₂ à 0.04987 ppm près, résolution supérieure à 110000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B12 Compound 4c**Indications fournies :**Masse moléculaire : 425.07 g.mol⁻¹Formule brute : C₂₁H₂₀BrN₃O₂**Détection mode positif :**

On observe deux pics majoritaires M+I à 426.08123 (formule brute proposée C₂₁H₂₁⁷⁹BrN₃O₂ à 0.14018 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 428.07899 (formule brute proposée C₂₁H₂₁⁸¹BrN₃O₂ à 0.23320 ppm près, résolution supérieure à 90000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B13 Compound 4d**Indications fournies :**Masse moléculaire : 399.02 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{18}H_{14}BrN_3O_3$

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 400.02923 (formule brute proposée $C_{18}H_{15}^{79}BrN_3O_3$ à 0.24913 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M+I à 402.02719 (formule brute proposée $C_{18}H_{15}^{81}BrN_3O_3$ à 0.25455 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B14 **Compound 4e**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 402.97 g.mol⁻¹
Formule brute : $C_{17}H_{11}BrClN_3O_2$

Détection mode positif :

On observe trois pics majoritaires M+I à 403.97976 (formule brute proposée $C_{17}H_{12}^{79}Br^{35}ClN_3O_2$ à 0.42308 ppm près, résolution supérieure à 110000), M+I à 405.97747 (formules brutes proposées $C_{17}H_{12}^{79}Br^{37}ClN_3O_2$ et $C_{17}H_{12}^{81}Br^{35}ClN_3O_2$ à -0.20050 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 407.97472 (formule brute proposée $C_{17}H_{12}^{81}Br^{37}ClN_3O_2$ à 0.30682 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous trois au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B15 **Compound 4f**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 387.00 g.mol⁻¹
Formule brute : $C_{17}H_{11}BrFN_3O_2$

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 388.00924 (formule brute proposée $C_{17}H_{12}^{79}BrFN_3O_2$ à 0.24252 ppm près, résolution supérieure à 110000) et M+I à 390.00718 (formule brute proposée $C_{17}H_{12}^{81}BrFN_3O_2$ à 0.20025

ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B16 Compound 4g**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 402.97 g.mol⁻¹

Formule brute : C₁₇H₁₁BrClN₃O₂

Détection mode positif :

On observe trois pics majoritaires M+I à 403.97972 (formule brute proposée C₁₇H₁₂⁷⁹Br³⁵ClN₃O₂ à 0.30129 ppm près, résolution supérieure à 100000), M+I à 405.97747 (formules brutes proposées C₁₇H₁₂⁷⁹Br³⁷ClN₃O₂ et C₁₇H₁₂⁸¹Br³⁵ClN₃O₂ à -0.19066 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 407.97466 (formule brute proposée C₁₇H₁₂⁸¹Br³⁷ClN₃O₂ à 0.15362 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous trois au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B17 Compound 4h**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 387.00 g.mol⁻¹

Formule brute : C₁₇H₁₁BrFN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 388.00922 (formule brute proposée C₁₇H₁₂⁷⁹BrFN₃O₂ à 0.19084 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 390.00712 (formule brute proposée C₁₇H₁₂⁸¹BrFN₃O₂ à 0.06214 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B18 **Compound 4i**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 370.01 g.mol⁻¹

Formule brute : C₁₆H₁₁BrN₄O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+1 à 371.01405 (formule brute proposée C₁₆H₁₂⁷⁹BrN₄O₂ à 0.63955 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+1 à 373.01190 (formule brute proposée C₁₆H₁₂⁸¹BrN₄O₂ à 0.36150 ppm près, résolution supérieure à 110000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B19 **Compound 4j**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 375.06 g.mol⁻¹

Formule brute : C₁₇H₁₈BrN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+1 à 376.06568 (formule brute proposée C₁₇H₁₉⁷⁹BrN₃O₂ à 0.43972 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+1 à 378.06358 (formule brute proposée C₁₇H₁₉⁸¹BrN₃O₂ à 0.296460 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B22 **Compound 7a**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 397.14 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₄H₁₉N₃O₃

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 398.15010 (formule brute proposée C₂₄H₂₀N₃O₃ à 0.46225 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B23 **Compound 7b**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 411.16 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₂₁N₃O₃

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 412.16569 (formule brute proposée C₂₅H₂₂N₃O₃ à 0.28918 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B24 **Compound 7c**

Indications fournies :

Masse moléculaire : 381.15 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₄H₁₉N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 382.15519 (formule brute proposée C₂₄H₂₀N₃O₂ à 0.49596 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Tableau récapitulatif

Bilan :

Manuscript references	Nom	Formule	M + I Calc.	M+ I Exp.	δ ppm	M - I Calc.	M - I Exp.	δ ppm	Validation
3	B1	C ₉ H ₇ ⁷⁹ Br ₂ N ₃ O ₂	347.89778	347.89784	0.17396	345.88322	345.88333	0.30161	Oui
		C ₉ H ₇ ⁷⁹ Br ⁸¹ BrN ₃ O ₂	349.89573	349.89566	-0.21742	347.88118	347.88152	0.97129	
		C ₉ H ₈ ⁸¹ Br ₂ N ₃ O ₂	351.89369	351.89355	-0.37654	349.87913	349.87955	1.18235	
4a	B10	C ₁₇ H ₁₂ ⁷⁹ BrN ₃ O ₂	370.01857	370.01869	0.34663	368.00401	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₂ ⁸¹ BrN ₃ O ₂	372.01652	372.01662	0.27219	370.00197	-	-	
4b	B11	C ₁₈ H ₁₄ ⁷⁹ BrN ₃ O ₂	384.03422	384.03428	0.17170	382.01966	-	-	Oui
		C ₁₈ H ₁₄ ⁸¹ BrN ₃ O ₂	386.03217	386.03219	0.04987	384.01762	-	-	
4c	B12	C ₂₁ H ₂₀ ⁷⁹ BrN ₃ O ₂	426.08117	426.08123	0.14018	424.06661	-	-	Oui
		C ₂₁ H ₂₀ ⁸¹ BrN ₃ O ₂	428.07912	428.07922	0.23320	426.06457	-	-	
4d	B13	C ₁₈ H ₁₄ ⁷⁹ BrN ₃ O ₃	400.02913	400.02923	0.24913	398.01458	-	-	Oui
		C ₁₈ H ₁₄ ⁸¹ BrN ₃ O ₃	402.02708	402.02719	0.25455	400.01253	-	-	
4e	B14	C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ Br ³⁵ ClN ₃ O ₂	403.97959	403.97976	0.42308	401.96504	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₁ ⁸¹ Br ³⁵ ClN ₃ O ₂	405.97755	405.97747	-0.20050	403.96299	-	-	
		C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ Br ³⁷ ClN ₃ O ₂	405.97755	405.97747	-0.20050	403.96299	-	-	
		C ₁₁ H ₁₁ ⁸¹ Br ³⁷ ClN ₃ O ₂	407.97460	407.97475	0.30682	405.96004	-	-	
4f	B15	C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ BrFN ₃ O ₂	388.00914	388.00924	0.24252	385.99459	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₁ ⁸¹ BrFN ₃ O ₂	390.00710	390.00718	0.20025	387.99254	-	-	
4g	B16	C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ Br ³⁵ ClN ₃ O ₂	403.97959	403.97972	0.30129	401.96504	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₁ ⁸¹ Br ³⁵ ClN ₃ O ₂	405.97755	405.97747	-0.19066	403.96299	-	-	
		C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ Br ³⁷ ClN ₃ O ₂	405.97755	405.97747	-0.19066	403.96299	-	-	
		C ₁₁ H ₁₁ ⁸¹ Br ³⁷ ClN ₃ O ₂	407.97460	407.97466	0.15362	405.96004	-	-	
4h	B17	C ₁₇ H ₁₁ ⁷⁹ BrFN ₃ O ₂	388.00914	388.00922	0.19084	385.99459	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₁ ⁸¹ BrFN ₃ O ₂	390.00710	390.00712	0.06214	387.99254	-	-	
4i	B18	C ₁₆ H ₁₁ ⁷⁹ BrN ₄ O ₂	371.01381	371.01405	0.63955	368.99926	-	-	Oui
		C ₁₆ H ₁₁ ⁸¹ BrN ₄ O ₂	373.01177	373.01190	0.336150	370.99721	-	-	
4j	B19	C ₁₇ H ₁₈ ⁷⁹ BrN ₃ O ₂	376.06552	376.06568	0.43972	374.05096	-	-	Oui
		C ₁₇ H ₁₈ ⁸¹ BrN ₃ O ₂	378.06347	378.06358	0.29646	376.04892	-	-	
7a	B22	C ₂₄ H ₁₉ N ₃ O ₃	398.14992	398.15010	0.46225	396.13536	-	-	Oui
7b	B23	C ₂₅ H ₂₁ N ₃ O ₃	412.16557	412.16569	0.28918	410.15101	-	-	Oui
7c	B24	C ₂₄ H ₁₉ N ₃ O ₂	382.15500	382.15519	0.49596	380.14045	-	-	Oui

Plateforme
Scientifique et
Technique
-
Analyse des
Systèmes
Biologiques

PST-ASB
Faculté de médecine
Boulevard Tonnellé
37000 Tours
02-47-36-61-53
www.analyse_srm.med.univ-tours.fr



► Analyses HRMS

Montigny

► 10/11/2022

► Département d'Analyse Chimique Biologique et Médicale

► 7/8/2020

Patrick Emond

patrick.emond@univ-tours.fr

Frédéric Montigny

frederic.montigny@univ-tours.fr

Antoine Lefevre

antoine.lefevre@univ-tours.fr

Contents

ECHANTILLON B48 COMPOUND 9A	1
ECHANTILLON B49 COMPOUND 9B	1
ECHANTILLON B51 COMPOUND 6E	1
ECHANTILLON B52 COMPOUND 6B	2
ECHANTILLON B53 COMPOUND 6A	2
ECHANTILLON B54 COMPOUND 6D	3
ECHANTILLON B55 COMPOUND 6C	3
ECHANTILLON B56 COMPOUND 6F	4
ECHANTILLON B57 COMPOUND 5C	4
ECHANTILLON B58 COMPOUND 5B	5
ECHANTILLON B59 COMPOUND 5A	5
ECHANTILLON B60 COMPOUND 5D	5
ECHANTILLON B61 COMPOUND 5E	6
ECHANTILLON B62 COMPOUND 5F	6
ECHANTILLON B63 COMPOUND 5G	7
ECHANTILLON B64 COMPOUND 5H	7
ECHANTILLON B65 COMPOUND 5I	8
ECHANTILLON B66 COMPOUND 8A	8
ECHANTILLON B67 COMPOUND 8B	8
TABLEAU RECAPITULATIF.....	9

Informations

Coordonnées du demandeur

Nom : Messaoudi Chaima

E-Mail : mohamed.abarbri@univ-tours.fr

Responsable : Mohamed Abarbri

Demande d'analyse

Demande d'analyse HRMS : confirmation de structure connue, 39 échantillons

Remarques

Analyses effectuées par : Antoine Lefevre et Frédéric Montigny

Interprétation des résultats et rapport d'analyse : Frédéric Montigny

Toutes les acquisitions HRMS ont été effectuées à une résolution de 140 000 pour une m/z de 200.

La détection se fait systématiquement dans les modes positif et négatif, par contre les résultats du mode négatif ne sont présentés que s'ils apportent des informations supplémentaires par rapport aux résultats du mode positif.

Préparation des échantillons

Tous les échantillons ont été préparés en solution dans MeOH : CH₂Cl₂ (50:50 vol).

Echantillon B48 Compound 9a**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 465.130 g.mol⁻¹
Formule brute : C₂₅H₁₈F₃N₃O₃

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+I à 466.13964 (formule brute proposée C₂₅H₁₉F₃N₃O₃ à 5.01361 ppm près, résolution supérieure à 90000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-I à 464.12308 (formule brute proposée C₂₅H₁₇F₃N₃O₃ à 0.71804 ppm près, résolution supérieure à 70000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B49 Compound 9b**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 435.1195 g.mol⁻¹
Formule brute : C₂₄H₁₆F₃N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+I à 436.12913 (formule brute proposée C₂₄H₁₇F₃N₃O₂ à 5.48259 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-I à 434.11264 (formule brute proposée C₂₄H₁₅F₃N₃O₂ à 1.05139 ppm près, résolution supérieure à 80000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B51 Compound 6e

Indications fournies :

Masse moléculaire : 427.1132 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₁₅F₂N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 428.12297 (formule brute proposée C₂₅H₁₆F₂N₃O₂ à 5.74901 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-1 à 426.10606 (formule brute proposée C₂₅H₁₄F₂N₃O₂ à 0.23273 ppm près, résolution supérieure à 80000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B52 Compound 6b**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 419.1634 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₇H₂₁N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 420.17289 (formule brute proposée C₂₇H₂₂N₃O₂ à 5.32396 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-1 à 418.15615 (formule brute proposée C₂₇H₂₀N₃O₂ à 0.12013 ppm près, résolution supérieure à 90000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B53 Compound 6a

Indications fournies :

Masse moléculaire : 391.1321 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₁₇N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 392.14147 (formule brute proposée C₂₅H₁₈N₃O₂ à 5.40497 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B54 Compound 6d**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 451.1532 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₇H₂₁N₃O₄

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 452.16297 (formule brute proposée C₂₇H₂₂N₃O₄ à 5.49650 ppm près, résolution supérieure à 90000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B55 Compound 6c**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 419.1634 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₇H₂₁N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 420.17305 (formule brute proposée $C_{27}H_{22}N_3O_2$ à 5.70650 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-1 à 418.15625 (formule brute proposée $C_{27}H_{20}N_3O_2$ à 0.35659 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B56 Compound 6f**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 427.1132 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{25}H_{15}F_2N_3O_2$

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 428.12302 (formule brute proposée $C_{25}H_{16}F_2N_3O_2$ à 5.87266 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic minoritaire M-1 à 426.10461 (formule brute proposée $C_{25}H_{14}F_2N_3O_2$ à -2.81199 ppm près, résolution supérieure à 80000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B57 Compound 5c**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 405.1477 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{26}H_{19}N_3O_2$

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 406.15731 (formule brute proposée $C_{26}H_{20}N_3O_2$ à 5.68814 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B58 Compound 5b**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 405.1477 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₆H₁₉N₃O₂

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 406.15726 (formule brute proposée C₂₆H₂₀N₃O₂ à 5.56498 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B59 Compound 5a**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 421.1426 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₆H₁₉N₃O₃

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 422.15227 (formule brute proposée C₂₆H₂₀N₃O₃ à 5.57007 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B60 Compound 5d

Indications fournies :

Masse moléculaire : 425.0931 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₁₆CIN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 426.10276 (formule brute proposée C₂₅H₁₇³⁵CIN₃O₂ à 5.57901 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 428.09987 (formule brute proposée C₂₅H₁₇³⁷CIN₃O₂ à 5.69598 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B61 Compound 5e**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 425.0931 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₁₆CIN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 426.10278 (formule brute proposée C₂₅H₁₇³⁵CIN₃O₂ à 5.63349 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 428.09992 (formule brute proposée C₂₅H₁₇³⁷CIN₃O₂ à 5.81404 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B62 Compound 5f**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 425.0931 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₅H₁₆CIN₃O₂

Détection mode positif :

On observe deux pics majoritaires M+I à 426.10288 (formule brute proposée $C_{25}H_{17}^{35}ClN_3O_2$ à 5.86493 ppm près, résolution supérieure à 100000) et M+I à 428.09994 (formule brute proposée $C_{25}H_{17}^{37}ClN_3O_2$ à 5.86133 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondants tous deux au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B63 Compound 5g**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 409.1227 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{25}H_{16}FN_3O_2$

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+I à 410.13231 (formule brute proposée $C_{25}H_{17}FN_3O_2$ à 5.78762 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B64 Compound 5h**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 371.1634 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{23}H_{21}N_3O_2$

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+I à 372.17277 (formule brute proposée $C_{23}H_{22}N_3O_2$ à 5.69130 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

On observe un pic M-I à 370.15612 (formule brute proposée $C_{23}H_{20}N_3O_2$ à 0.04098 ppm près, résolution supérieure à 80000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B65 Compound 5i**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 397.0885 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{23}H_{15}N_3O_2S$

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+I à 398.09816 (formule brute proposée $C_{23}H_{16}N_3O_2S$ à 5.98513 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B66 Compound 8a**Indications fournies :**

Masse moléculaire : 442.1463 g.mol⁻¹

Formule brute : $C_{25}H_{22}N_4O_2S$

Détection mode positif :

On observe un pic M+I à 443.15613 (formule brute proposée $C_{25}H_{23}N_4O_2S$ à 5.65933 ppm près, résolution supérieure à 100000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Echantillon B67 Compound 8b

Indications fournies :

Masse moléculaire : 468.1798 g.mol⁻¹

Formule brute : C₂₇H₂₄N₄O₄

Détection mode positif :

On observe un pic majoritaire M+1 à 469.18950 (formule brute proposée C₂₇H₂₅N₄O₄ à 5.26142 ppm près, résolution supérieure à 90000) correspondant au composé recherché. La répartition isotopique expérimentale est cohérente avec la formule brute proposée.

Détection mode négatif :

Aucune information supplémentaire.

Conclusion:

La masse moléculaire obtenue et le massif isotopique permettent de confirmer la structure du composé analysé.

Tableau récapitulatif

Bilan :

Manuscript references	Nom	Formule	M + I Calc.	M+ I Exp.	δ ppm	M - I Calc.	M - I Exp.	δ ppm	Validation
9a	B48	C ₂₅ H ₁₈ F ₃ N ₃ O ₃	466.13730	466.13964	5.01361	464.12275	464.12308	0.71804	Oui
9b	B49	C ₂₄ H ₁₆ F ₃ N ₃ O ₂	436.12674	436.12913	5.48259	434.11218	434.11264	1.05139	Oui
6e	B51	C ₂₅ H ₁₅ F ₂ N ₃ O ₂	428.12051	428.12297	5.74901	426.10596	426.10606	0.23273	Oui
6b	B52	C ₂₇ H ₂₁ N ₃ O ₂	420.17065	420.17289	5.32396	418.15610	418.15615	0.12013	Oui
6a	B53	C ₂₅ H ₁₇ N ₃ O ₂	392.13935	392.14147	5.40197	390.12480	-	-	Oui
6d	B54	C ₂₇ H ₂₁ N ₃ O ₄	452.16048	452.16297	5.49650	450.14593	-	-	Oui
6c	B55	C ₂₇ H ₂₁ N ₃ O ₂	420.17065	420.17305	5.70650	418.15610	418.15625	0.35659	Oui
6f	B56	C ₂₅ H ₁₅ F ₂ N ₃ O ₂	428.12051	428.12302	5.87266	426.10596	426.10461	-2.81199	Oui
5c	B57	C ₂₆ H ₁₉ N ₃ O ₂	406.15500	406.15731	5.68814	404.14045	-	-	Oui
5b	B58	C ₂₆ H ₁₉ N ₃ O ₂	406.15500	406.15726	5.56498	404.14045	-	-	Oui
5a	B59	C ₂₆ H ₁₉ N ₃ O ₃	422.14992	422.15227	5.57007	420.13536	-	-	Oui
5d	B60	C ₂₅ H ₁₆ ³⁵ CIN ₃ O ₂	426.10038	426.10276	5.57901	424.08583	-	-	Oui
		C ₂₅ H ₁₆ ³⁷ CIN ₃ O ₂	428.09743	428.09987	5.69598	426.08288	-	-	
5e	B61	C ₂₅ H ₁₆ ³⁵ CIN ₃ O ₂	426.10038	426.10278	5.63349	424.08583	-	-	Oui
		C ₂₅ H ₁₆ ³⁷ CIN ₃ O ₂	428.09743	428.09992	5.81404	426.08288	-	-	
5f	B62	C ₂₅ H ₁₆ ³⁵ CIN ₃ O ₂	426.10038	426.10288	5.86493	424.08583	-	-	Oui

5g	B63	$C_{25}H_{16}^{37}ClN_3O_2$	428.09743	428.09994	5.86133	426.08288	-	-	Oui
5h	B64	$C_{25}H_{16}FN_3O_2$	410.12993	410.13231	5.78762	408.11538	-	-	Oui
5i	B65	$C_{23}H_{21}N_3O_2$	372.17065	372.17277	5.69130	370.15610	-	-	Oui
8a	B66	$C_{25}H_{22}N_4O_2S$	443.15362	443.15613	5.65933	441.13907	-	-	Oui
8b	B67	$C_{27}H_{24}N_4O_4$	469.18703	469.18950	5.26142	467.17248	-	-	Oui