

## RAPPORT D'ANALYSE

### Analyse en spectrométrie de Masse haute résolution

Notre référence interne (Sayens) de l'échantillon : **WPCM\_026478**

Votre référence de l'échantillon : **JH\_334\_1**

**Société Institut UTINAM**

Analyses du 18/02/2021

Analyses et rapport réalisés par MJ PENOUILH selon le devis n°4753026

Validé le :

**APPROUVÉ**

Par :

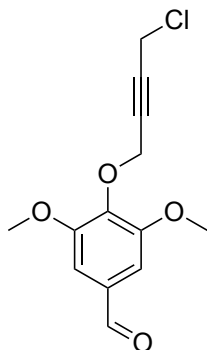
**Par Marie-José Penouilh , 10:05, 18/02/2021**

Signature :



## 1/ Projet

Caractérisation par spectrométrie de Masse haute résolution d'un composé dont la structure attendue est la suivante :



Chemical Formula: C<sub>13</sub>H<sub>13</sub>ClO<sub>4</sub>  
Exact Mass: 268,05  
Molecular Weight: 268,69  
Elemental Analysis: C, 58.11; H, 4.88; Cl, 13.19; O, 23.82

## 2/ Échantillon(s)

Échantillon à analyser :

- WPCM\_026478 : JH\_334\_1

## 3/ Analyses par spectrométrie de masse haute résolution

### a/ Appareillage

L'échantillon a été analysé sur un appareil LTQ Orbitrap XL (Thermo Scientific) muni d'une source d'ionisation électrospray. L'analyse a été réalisée en mode positif.

### b/ Préparation de l'échantillon

L'échantillon a été solubilisé dans du dichlorométhane puis une deuxième dilution a été effectuée dans du méthanol pour obtenir une concentration d'environ 10<sup>-5</sup> M.

#### c/ Résultats

*Le spectre de masse obtenu est présenté en Annexes.*

Le spectre présente un pic principal monochargé à  $m/z$  291,3818, correspondant à l'ion moléculaire  $[M+Na]^+$  du composé attendu. Le massif isotopique et la masse mesurée de ce pic sont en accord avec la formule brute proposée  $C_{13}H_{13}ClO_4$  (cf spectre en Annexe et Tableau 1 ci-dessous).

Plusieurs autres pics sont présents. L'ion à  $m/z$  559,08700 est un ion dimère du produit attendu de type  $[2M+Na]^+$  et les pics à  $m/z$  323,06395,  $m/z$  591,11311 et  $m/z$  623,13918 correspondent à des ions du produit attendu formés avec des adduits de méthanol.

Tableau 1 : Tableau de différence (en ppm) entre la masse exacte mesurée et la masse isotopique théorique

Échantillon	Masse Exacte mesurée	Masse isotopique théorique	$\Delta$ en ppm
JH 334_1	291,03818	$[C_{13}H_{13}Cl_3O_4+Na]^+ = 291,03946$	<b>-4,398</b>

#### 4/ Conclusion

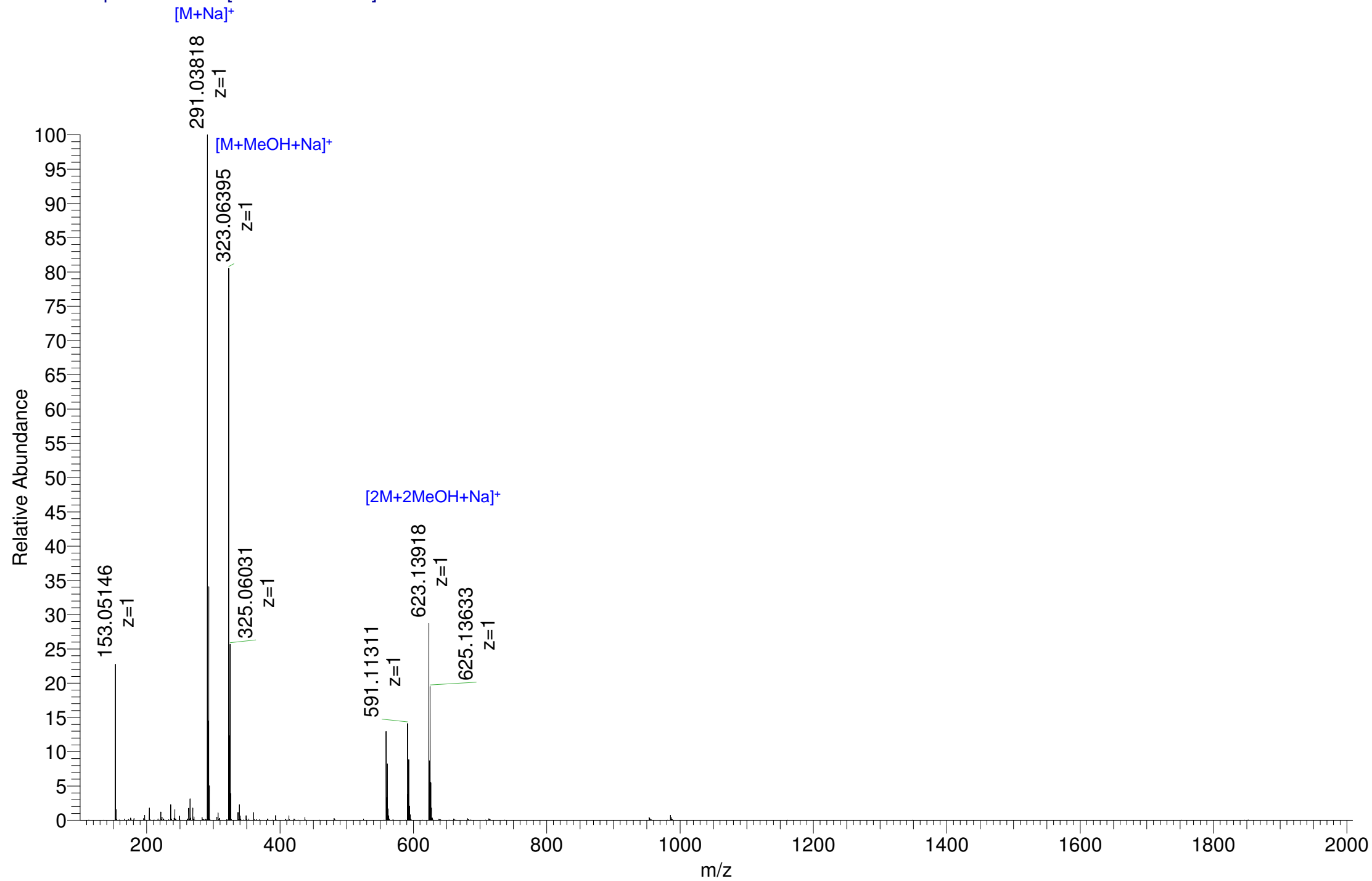
L'analyse par spectrométrie de masse est en accord avec la formule brute proposée  $C_{13}H_{13}ClO_4$ .

# Annexes

DCM/MeOH

21mjp\_wpcm026478\_5 #3-8 RT: 0.04-0.12 AV: 6 NL: 1.96E7

T: FTMS + p ESI Full ms [100.00-2000.00]



DCM/MeOH

21mjp\_wpcm026478\_5 #3-8 RT: 0.04-0.12 AV: 6 NL: 1.96E7

T: FTMS + p ESI Full ms [100.00-2000.00]

