

ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ образца Э-31-9/2020

Средство измерений:

Комплекс аппаратно-программируемый для медицинских исследований на базе хроматографа «Хроматэк-Кристалл 5000.1» с МСД (детектором масс-спектрометрическим) Trace DSQ и программным обеспечением Xcalibur с масс-спектрометрической библиотекой данных органических веществ NIST11 и Wiley9 с кварцевой капиллярной колонкой THERMO TR-5MS (50м-0,25ID-1,0um).

Режим анализа: Время анализа [60 мин]
Термостат: Температура, °С [50 °С, 5 мин, 10 °С/мин, 280 °С]
Колонка: Газ-носитель (Гелий) [0.9 мл/мин, 0 мин]
Сброс потока [0 мл/мин, 1 мин; 30 мл/мин] Деление потока [0]
Испаритель: Температура, °С [250 °С, 1 мин; 10 °С/мин, 280 °С]
МСД: Температура, °С [250 °С, 0 мин]

Detector Gain: 1,00X10⁵ (1100 V)
Fore Pressure (mTorr): 50
Mass range (m/z): 15–650
Ionization Energy (eV): 70.0

Пробоподготовка:

Экстрагент: гексан/диэтиловый эфир (3/1 об.).

Экстракция: 100 г образца воды упаривают на вакуумном испарителе (вакуум 25-27 мм.рт.ст. и температура не более 50°C) до объема около 10 мл и добавляют 5 мл экстрагента.

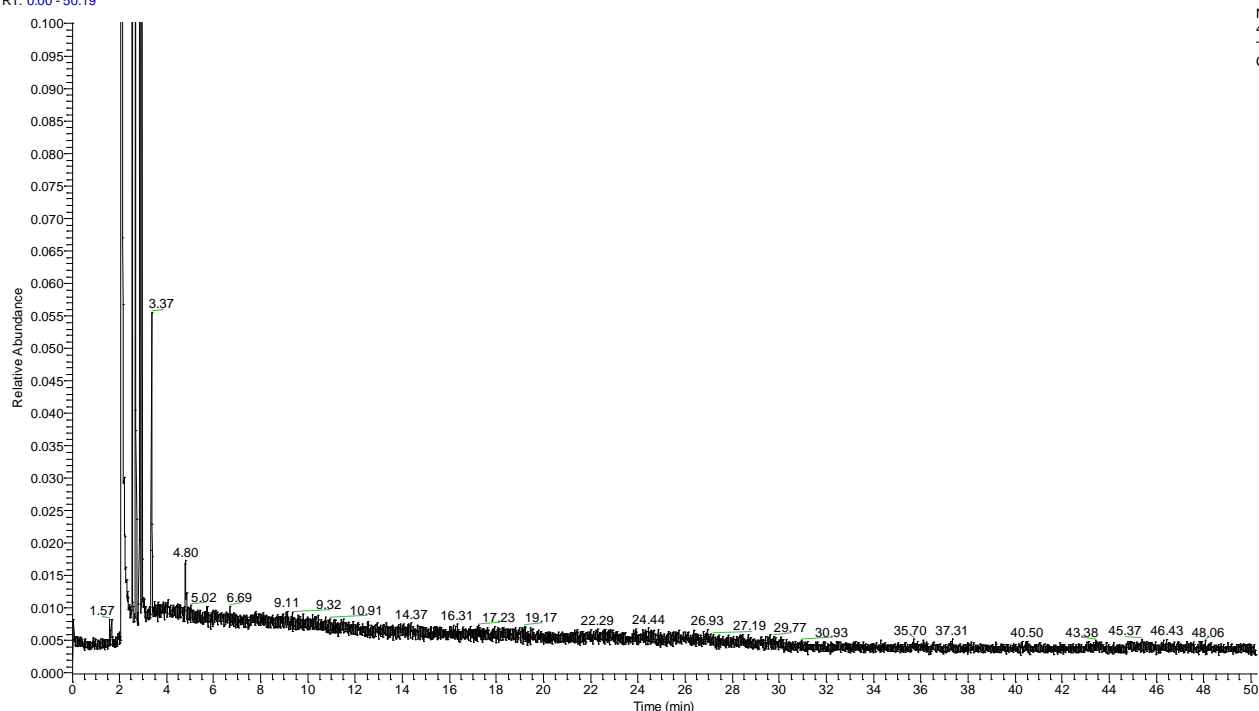
Время экстракции: 1 сутки.

Объем закола: 1 мкл.

Задержка МС-детектирования: 5 мин.

Хроматограмма экстрагента:

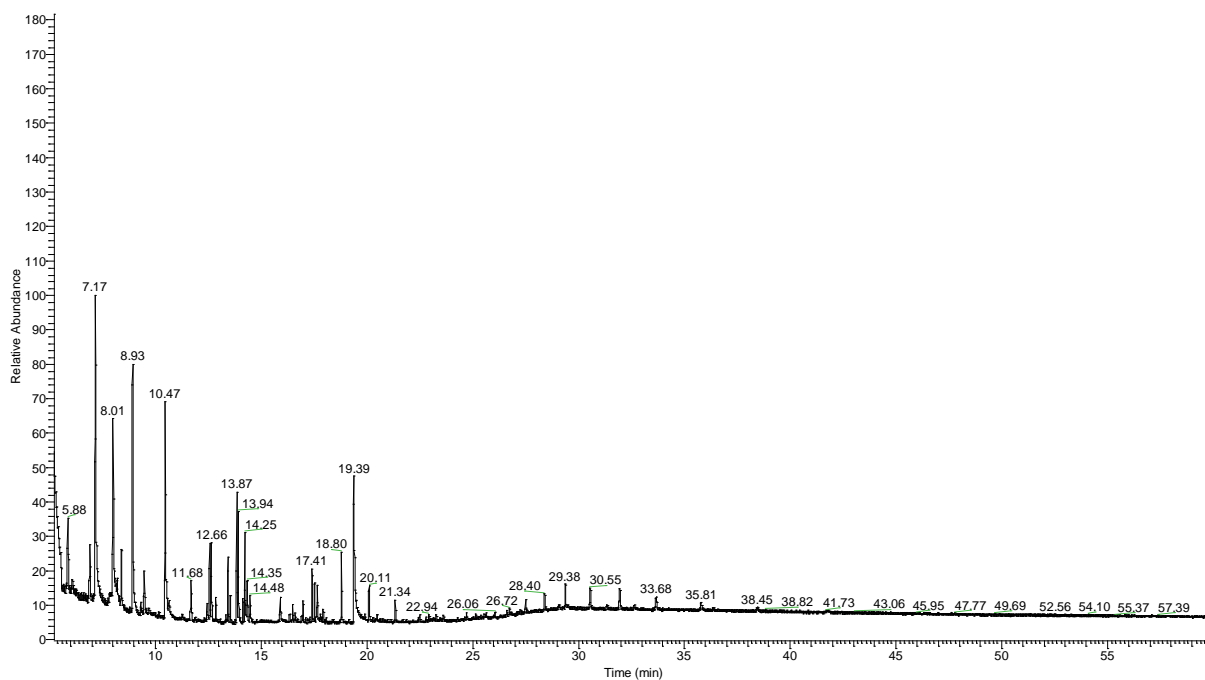
RT: 0.00 - 50.19



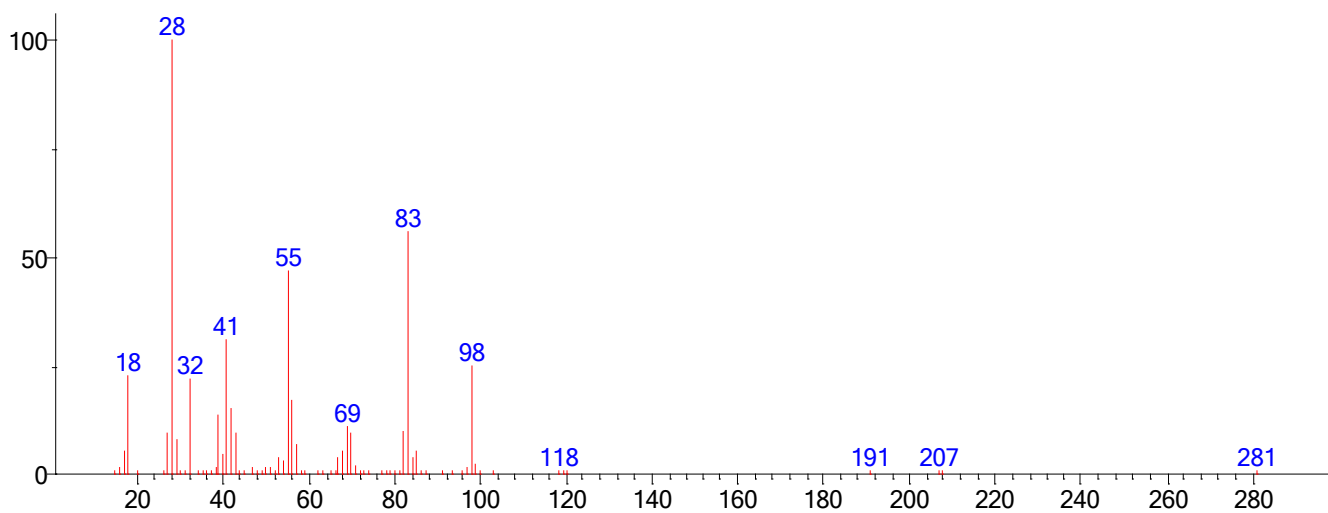
Общая хроматограмма образца:

RT: 5.22 - 59.99

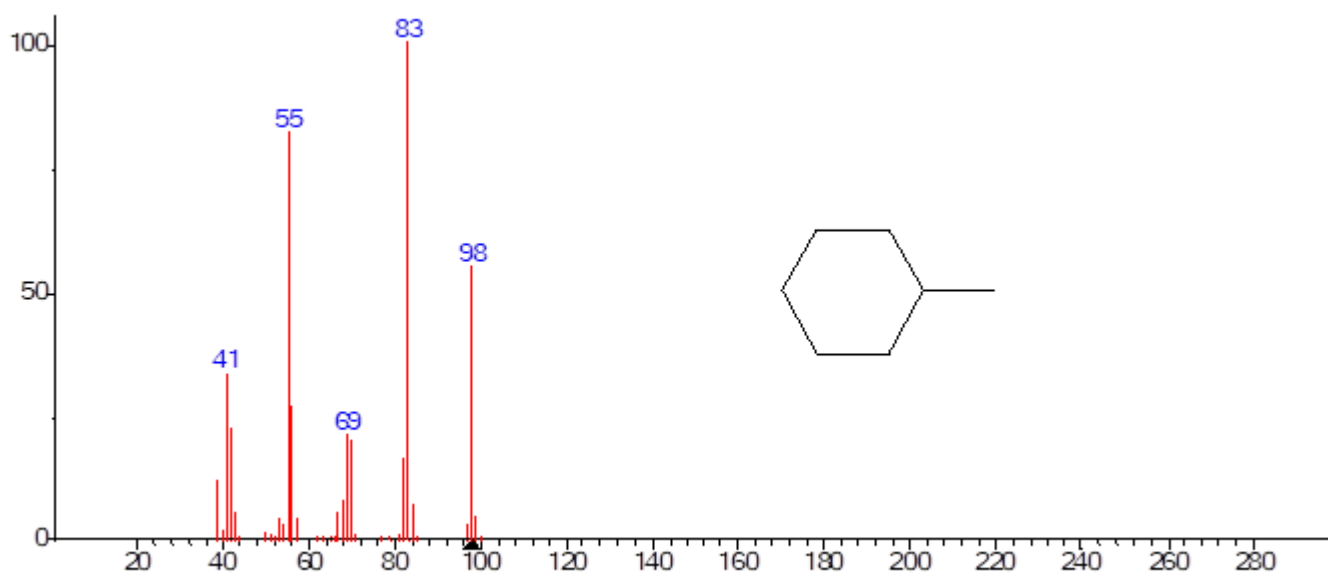
NL:
1.77E8
TIC MS
B12_0_G



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 5.88

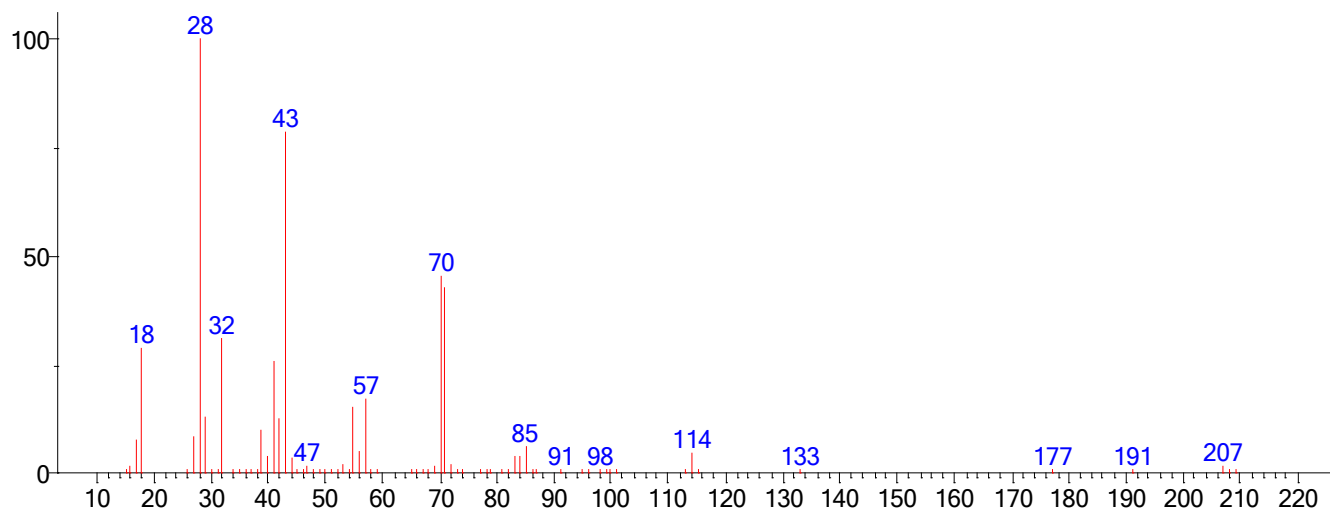


(Text File) B12_0_G#553 RT: 5.88 AV: 1

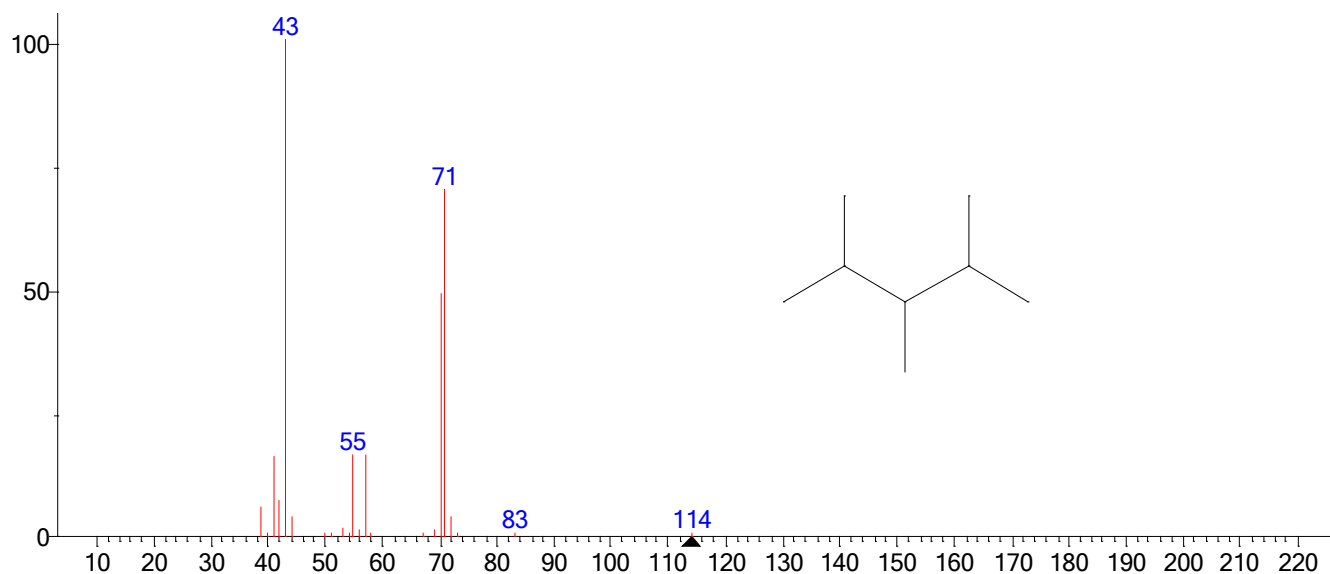


(wiley9) Cyclohexane, methyl- (CAS)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 6.91

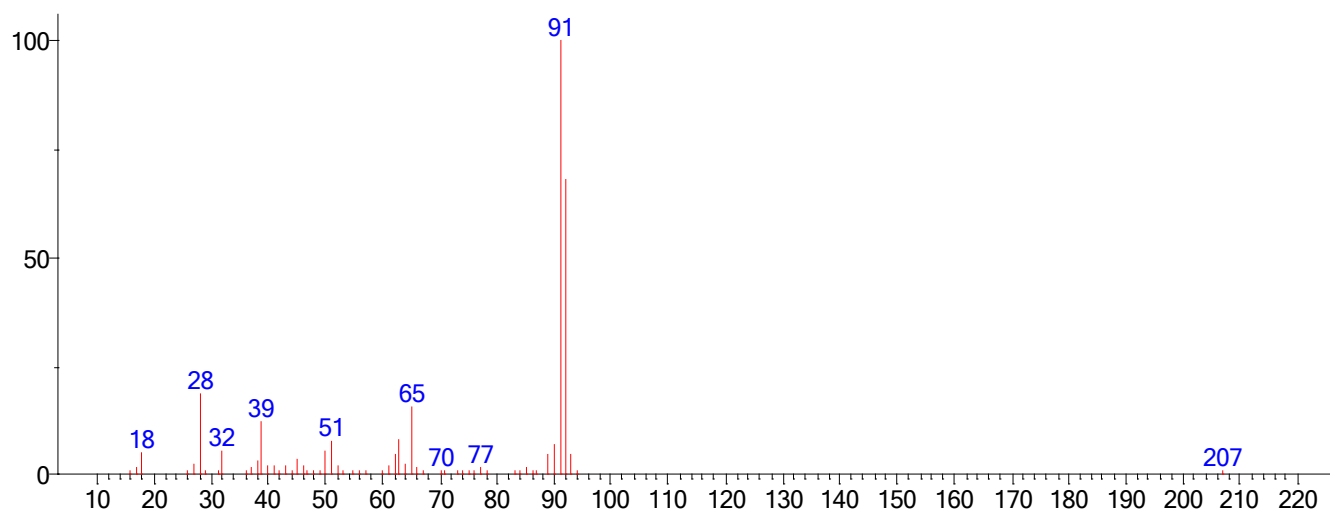


(Text File) B12_0_G#855 RT: 6.90 AV: 1

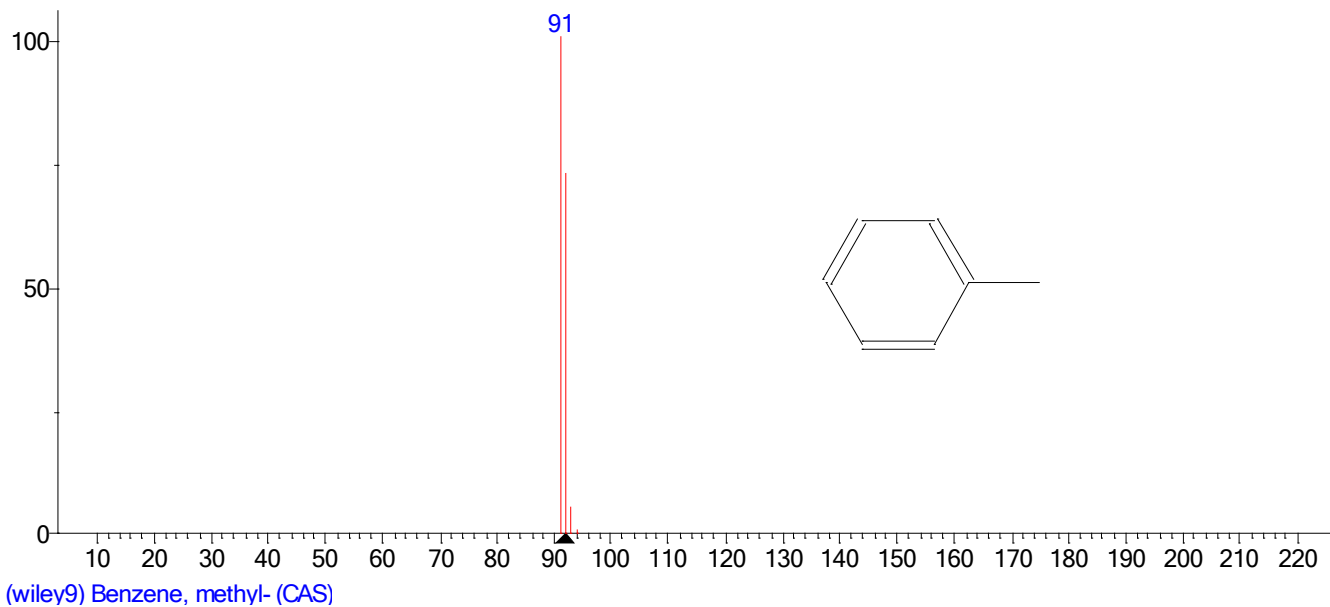


(wiley9) Pentane, 2,3,4-trimethyl- (CAS)

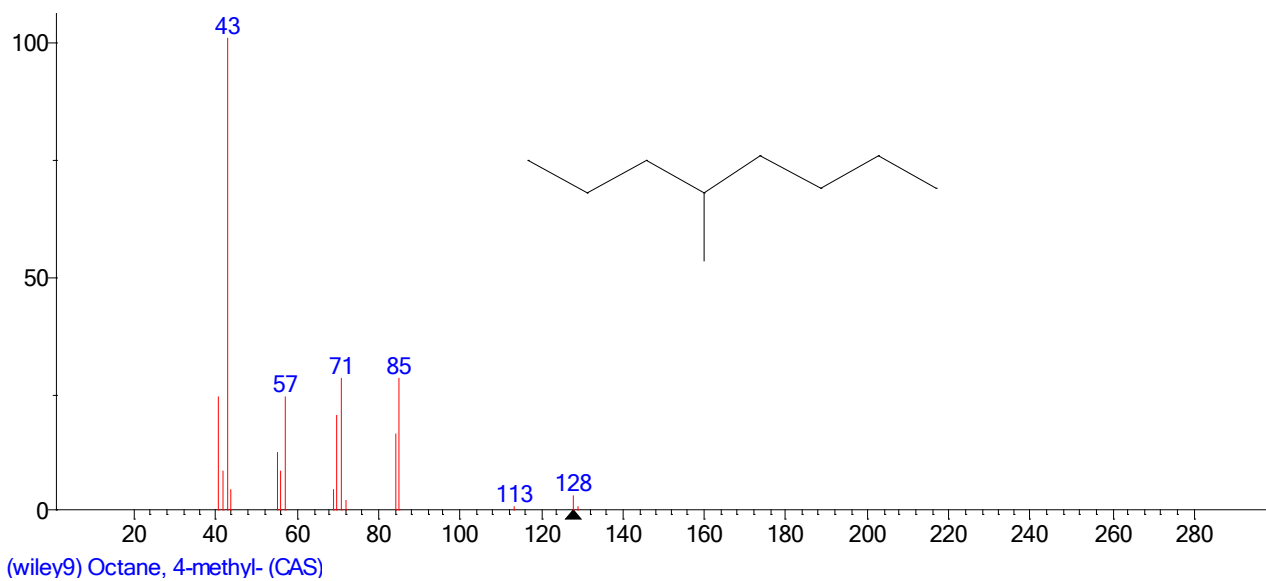
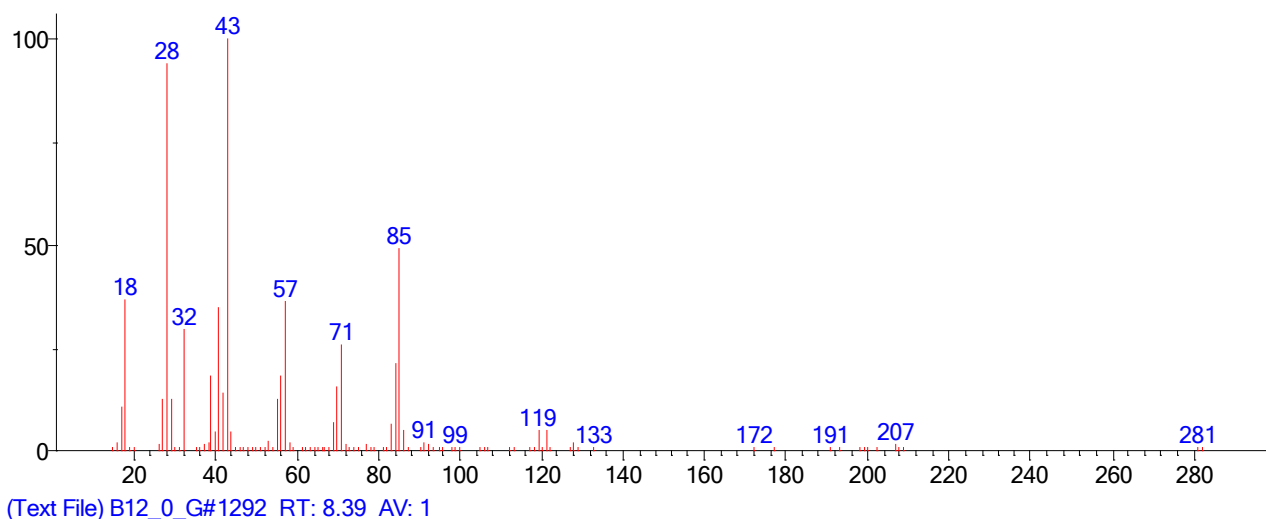
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.17



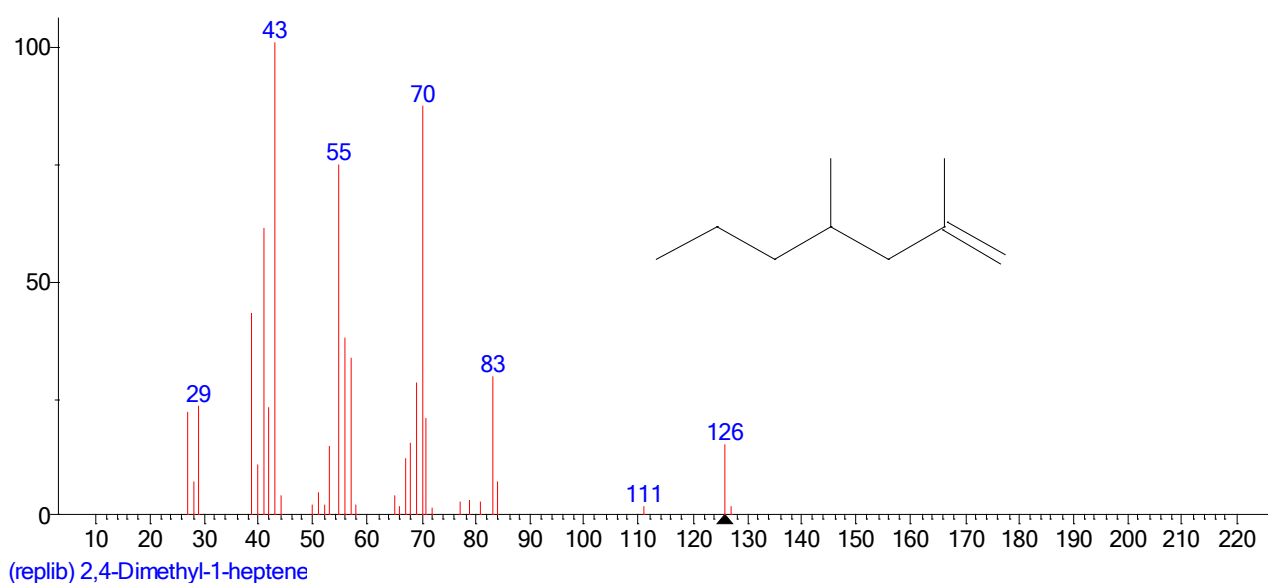
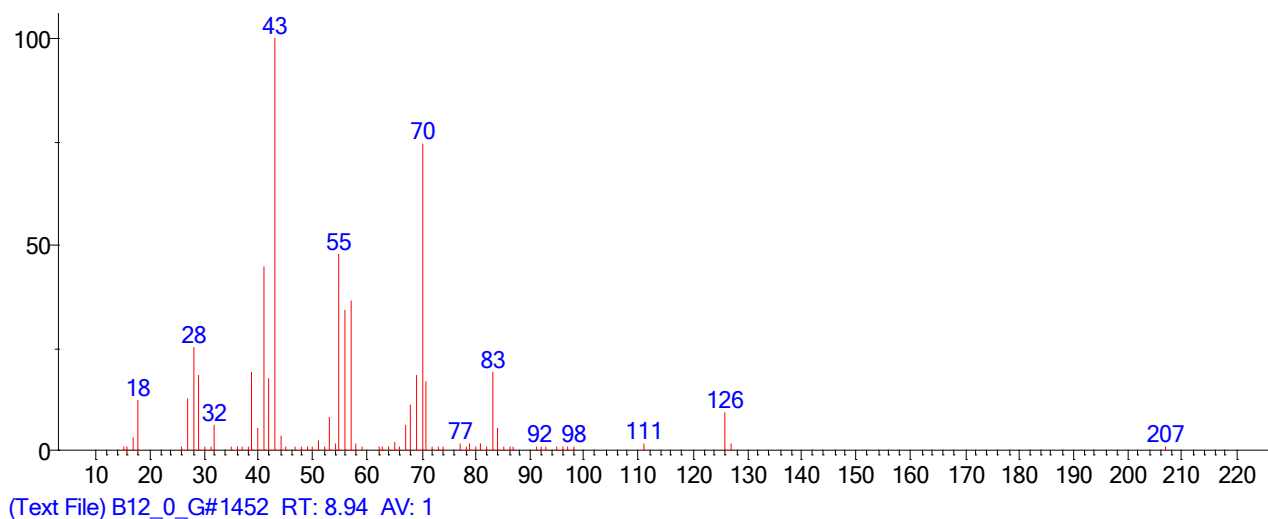
(Text File) B12_0_G#933 RT: 7.17 AV: 1



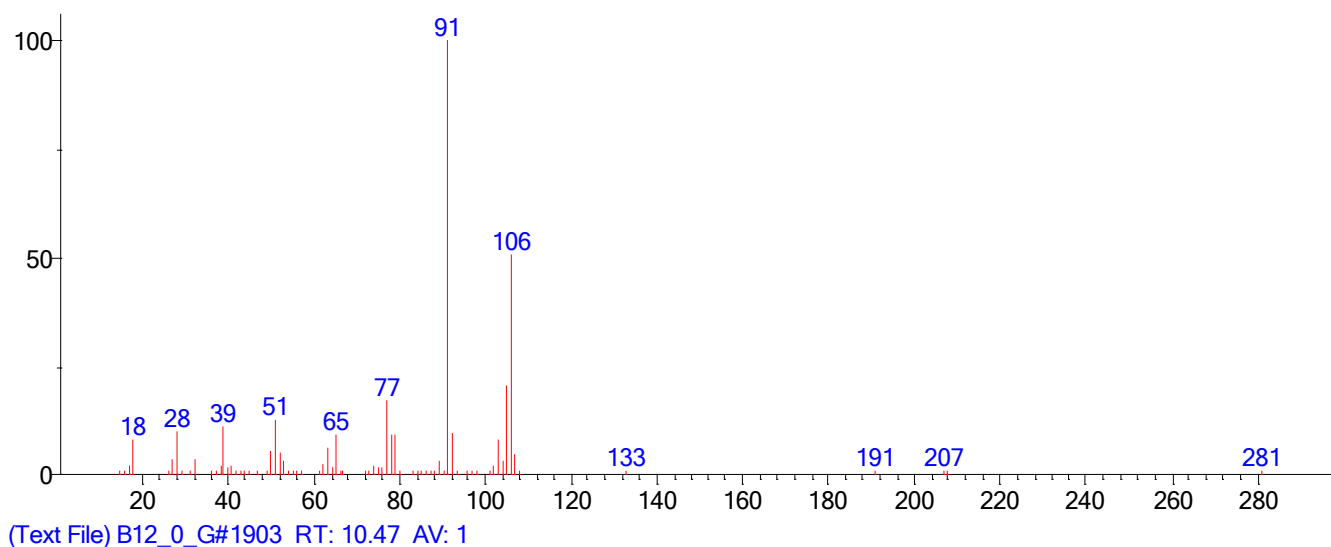
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.40

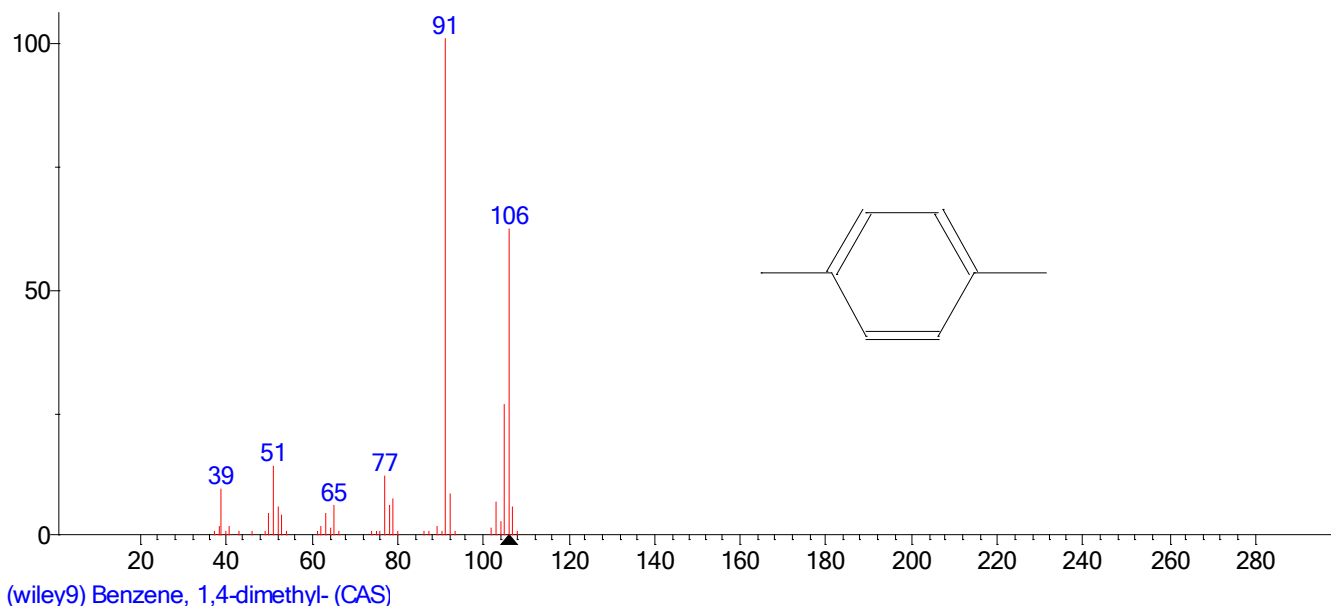


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.93

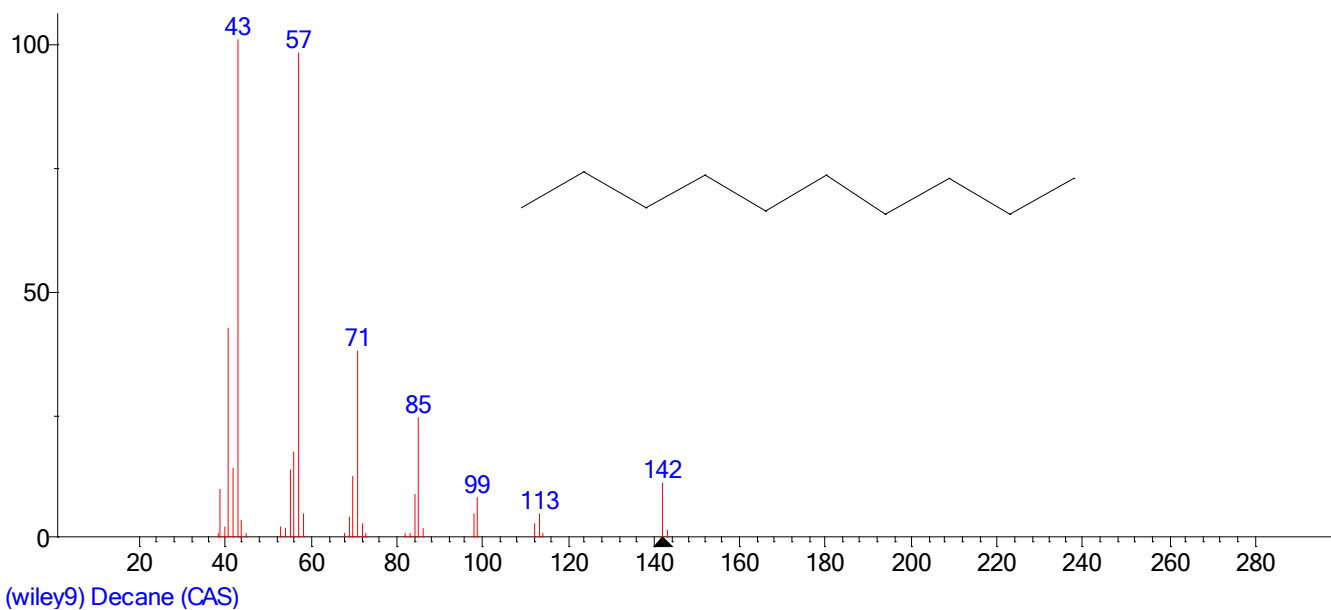
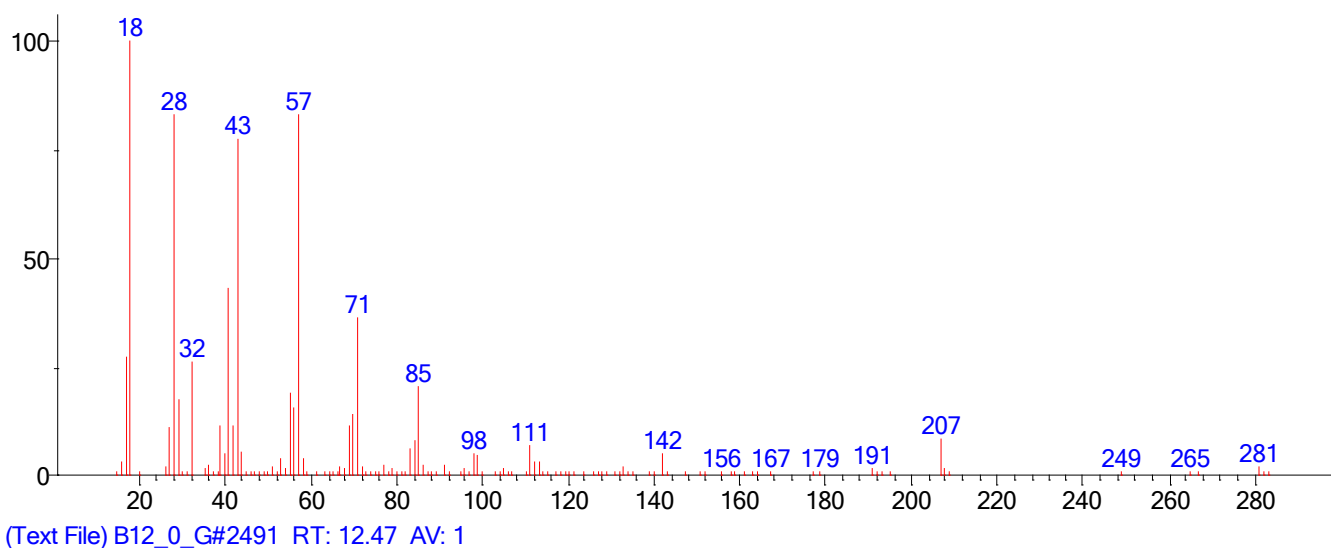


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.47

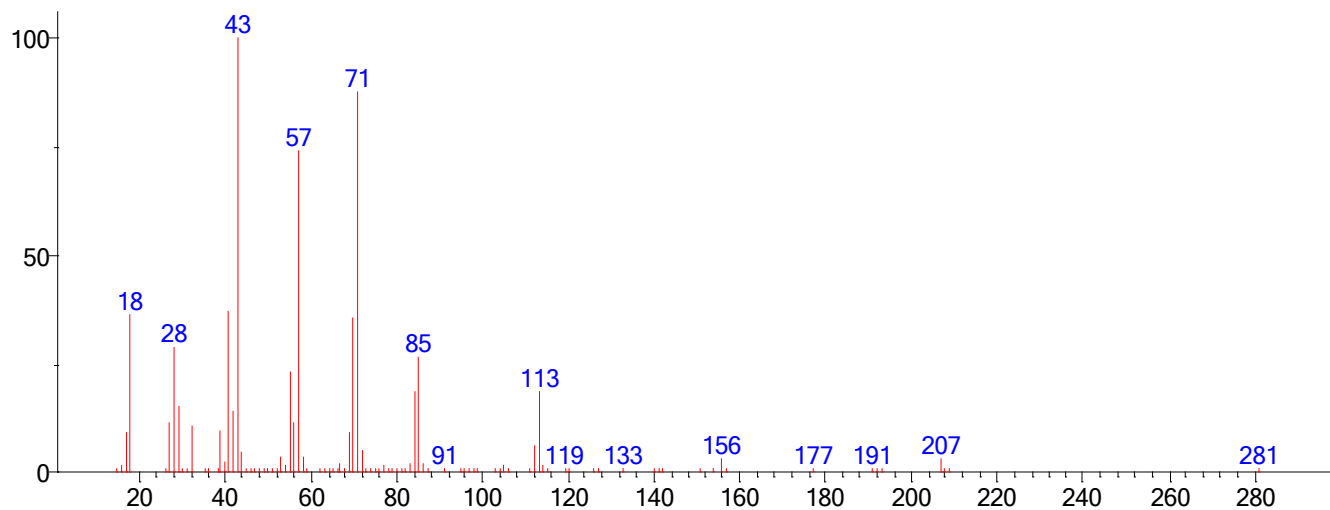




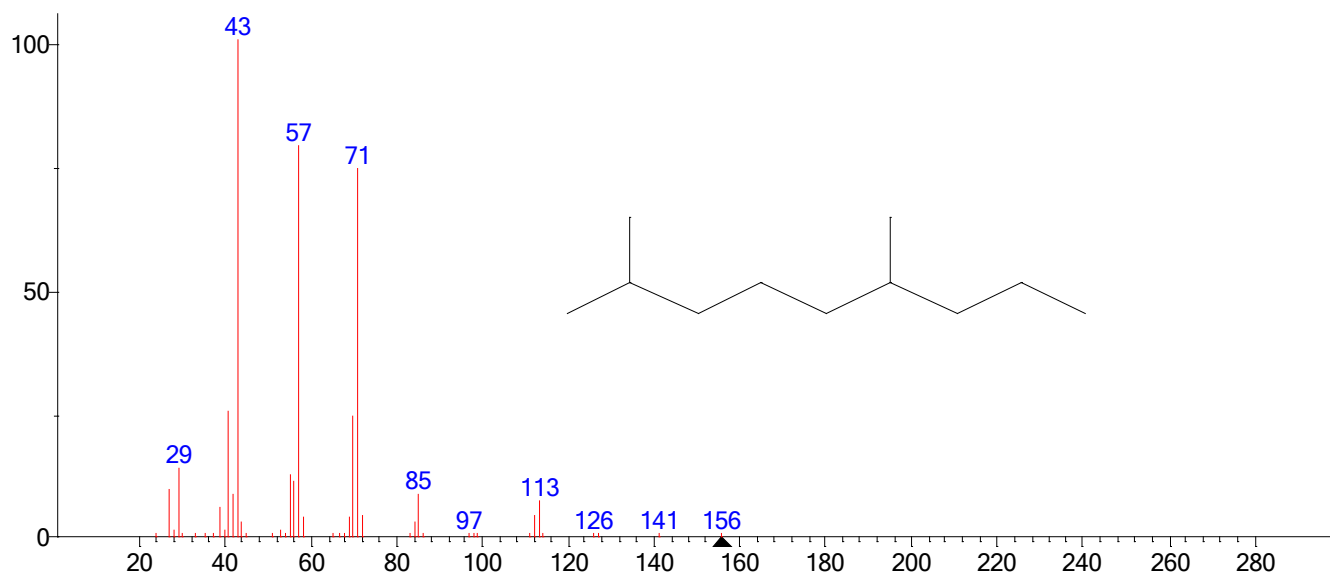
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 12.47



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 12.66

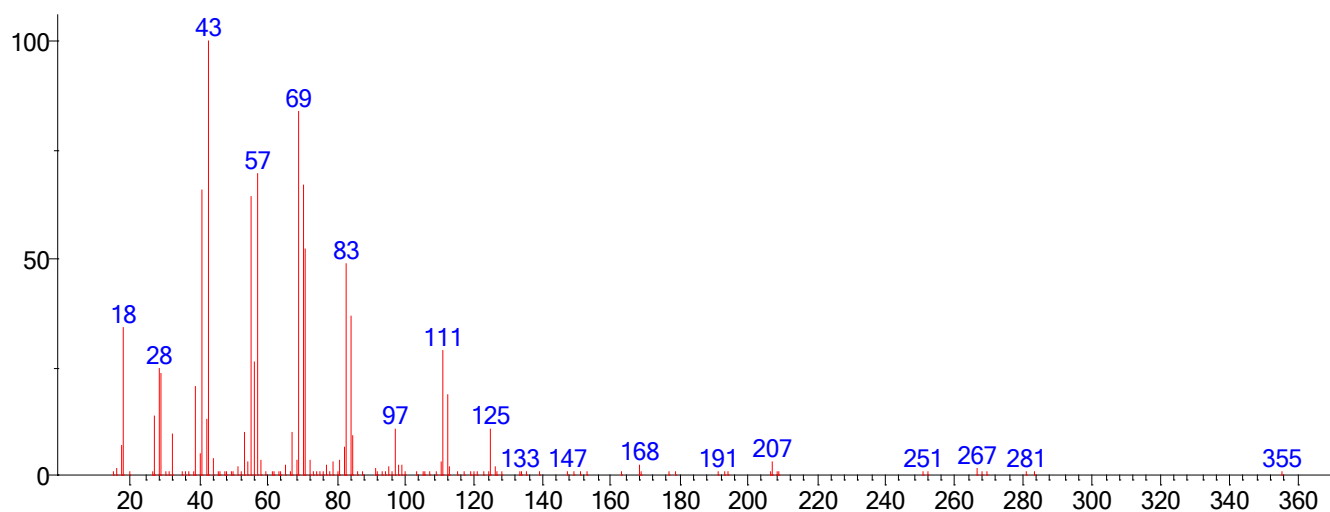


(Text File) B12_0_G#2545 RT: 12.65 AV: 1

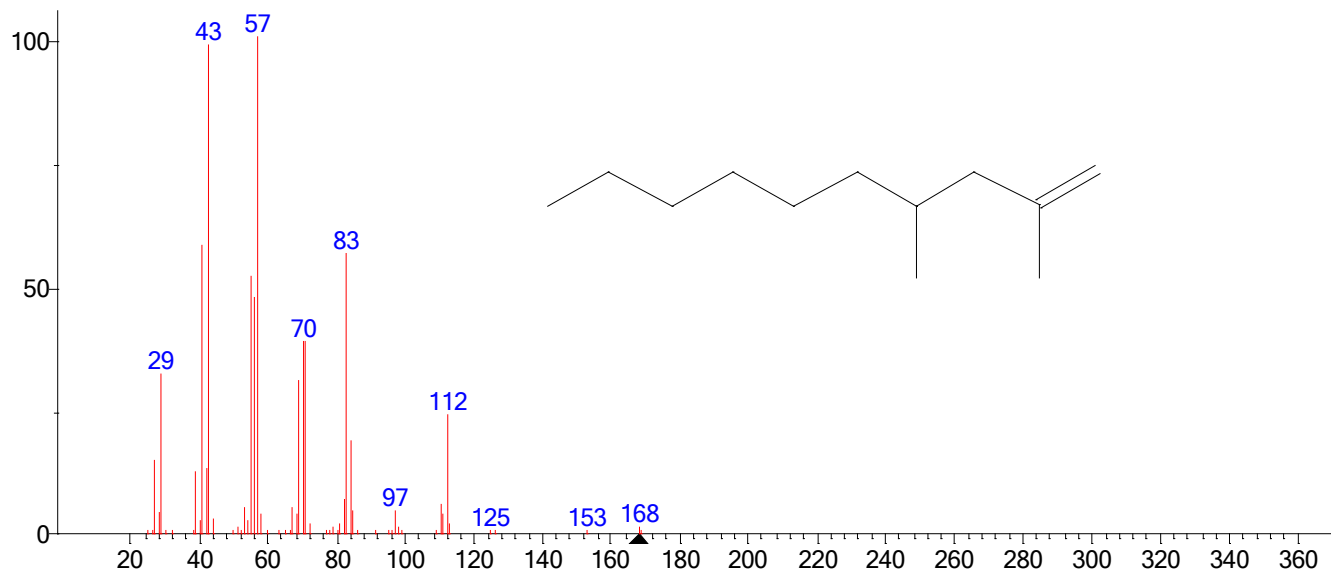


(wiley9) NONANE, 2,6-DIMETHYL-

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 13.87

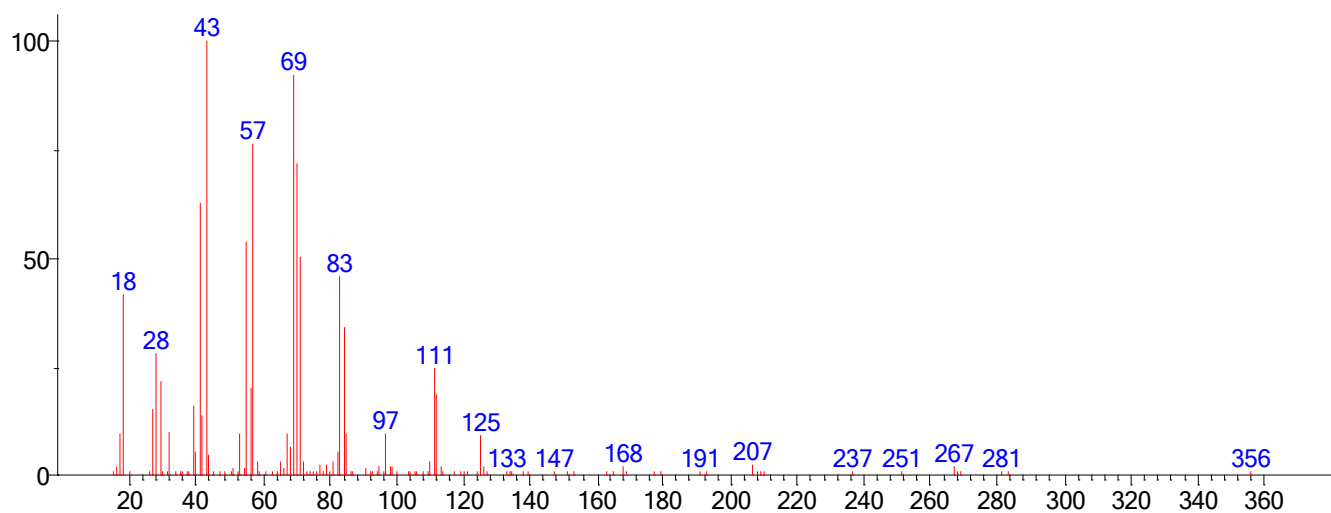


(Text File) B12_0_G#2902 RT: 13.87 AV: 1

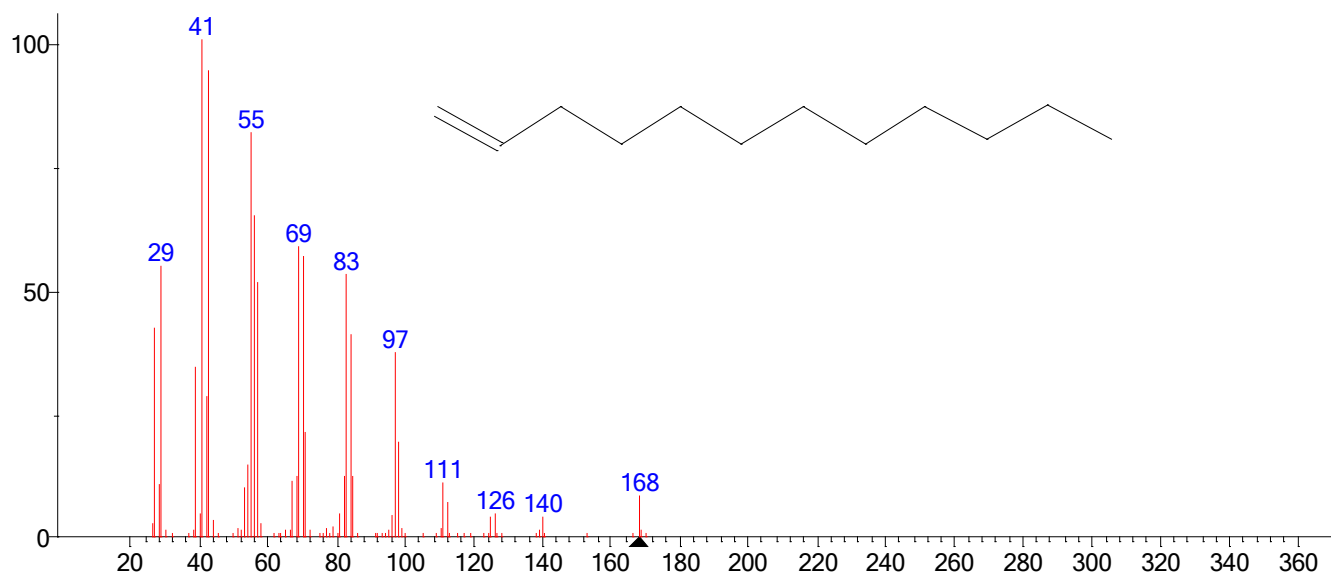


(mainlib) 1-Decene, 2,4-dimethyl

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 13.94

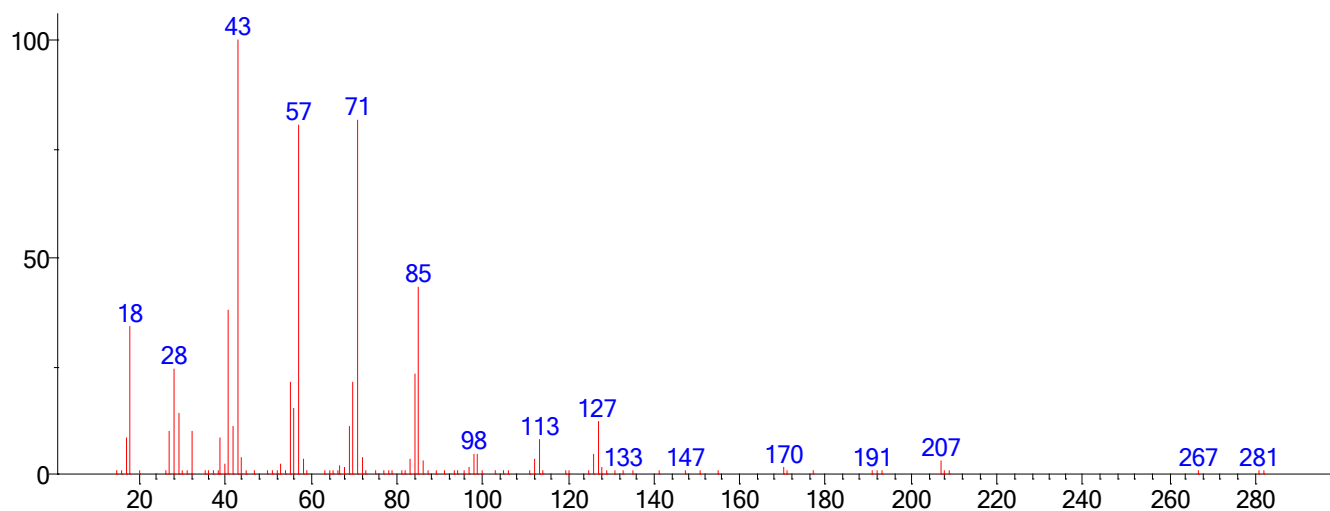


(Text File) B12_0_G#2925 RT: 13.94 AV: 1

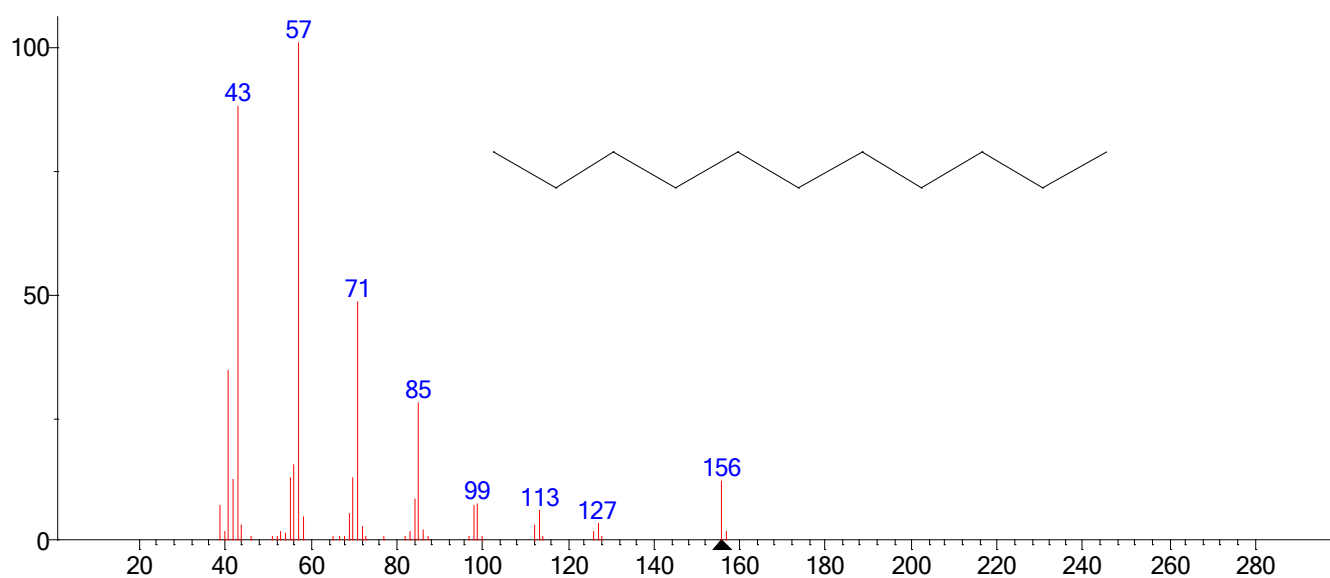


(mainlib) 1-Dodecene

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 14.25

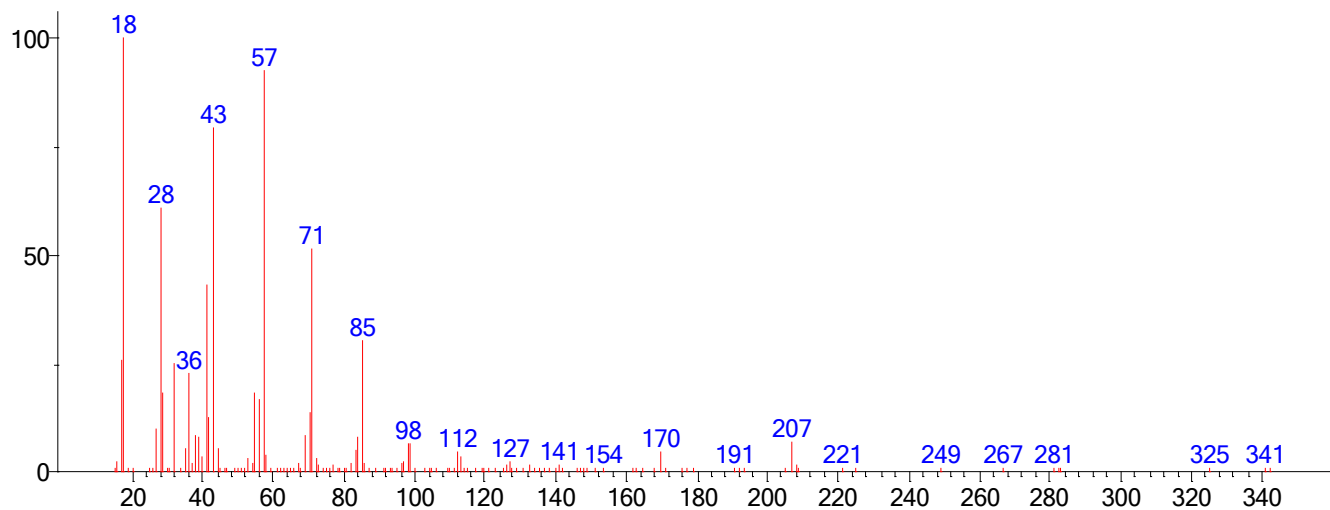


(Text File) B12_0_G#3013 RT: 14.24 AV: 1

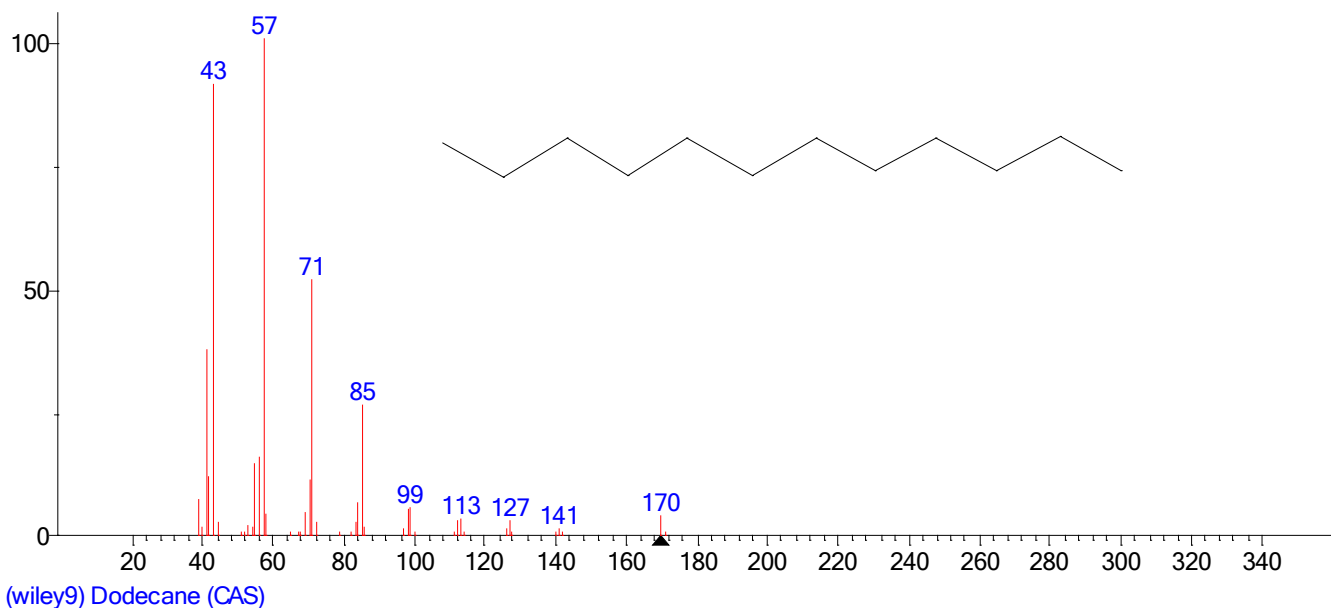


(wiley9) Undecane (CAS)

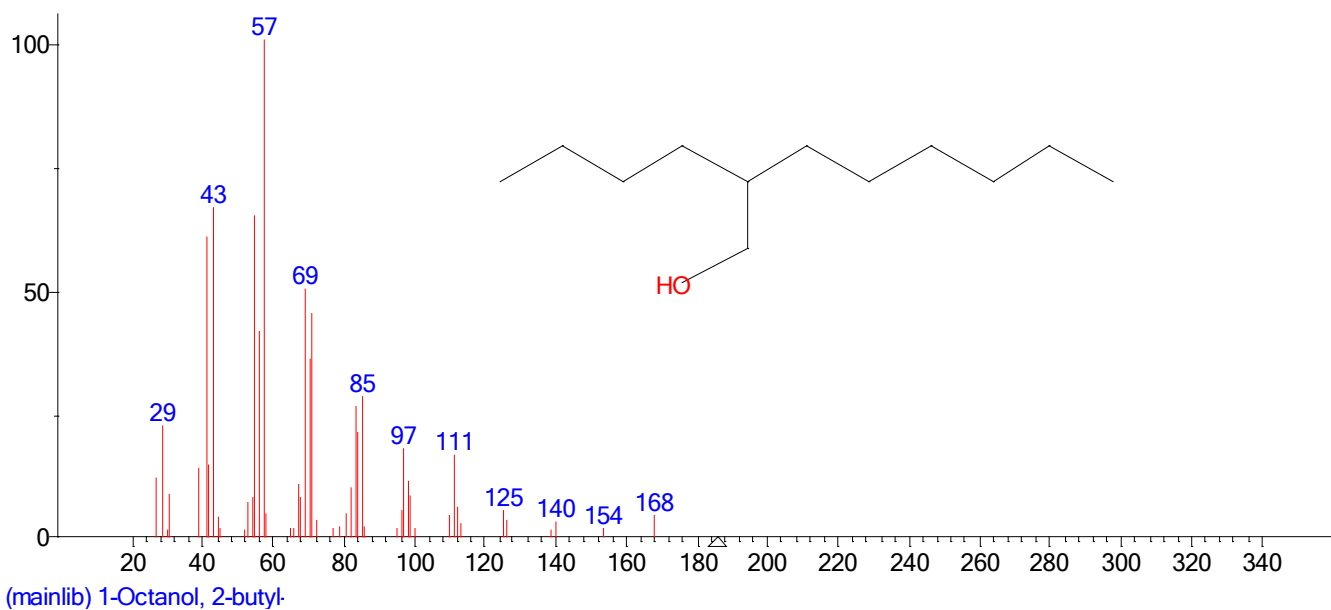
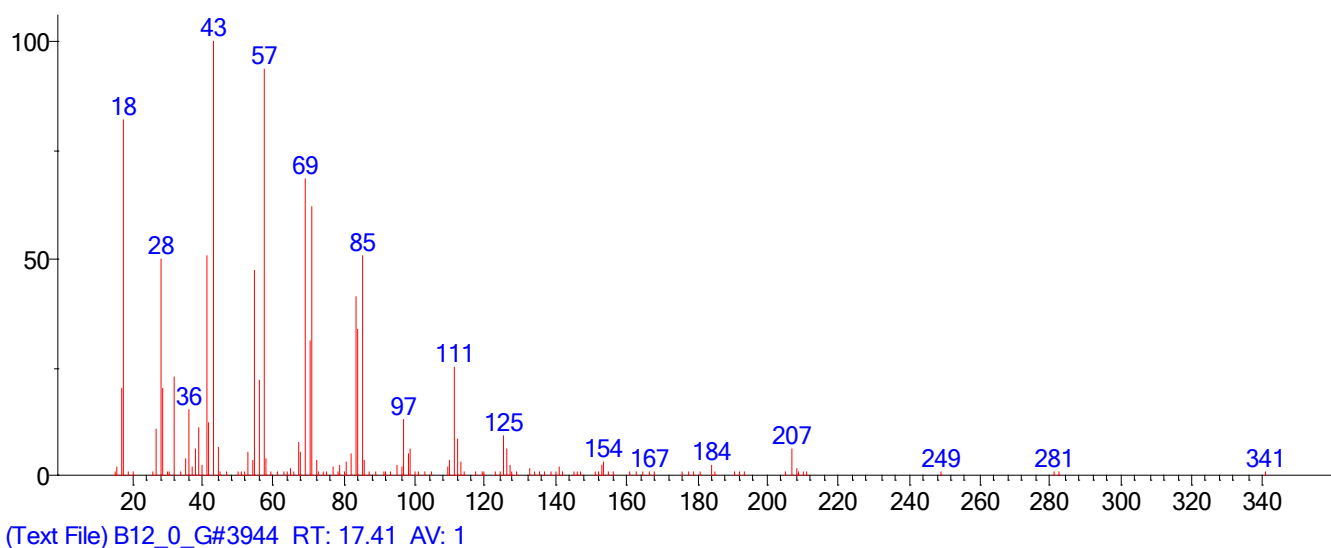
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 15.92



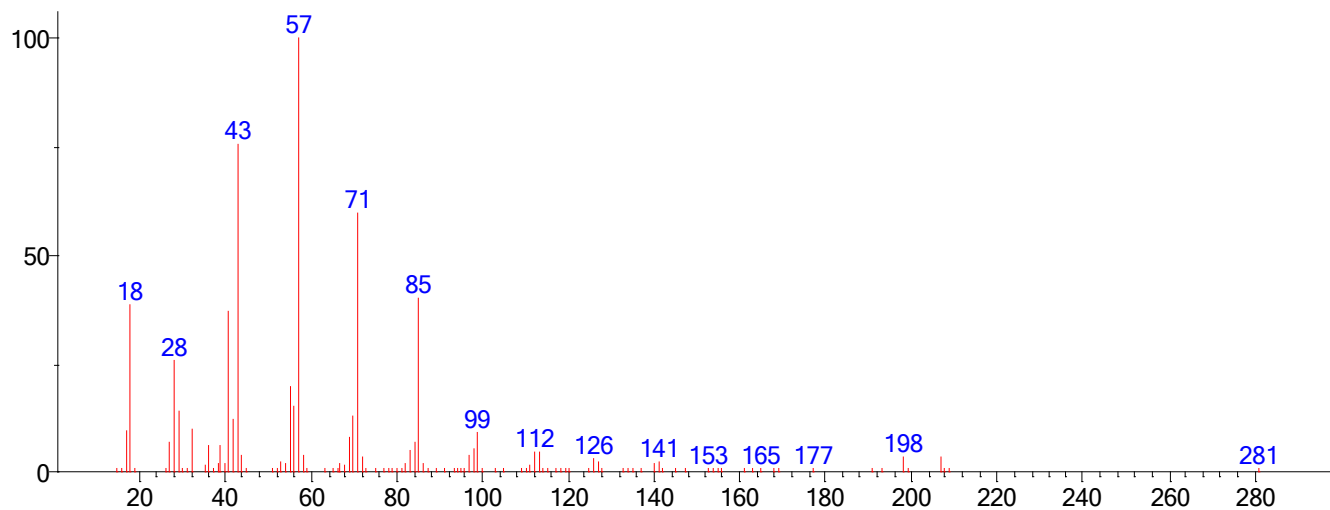
(Text File) B12_0_G#3505 RT: 15.92 AV: 1



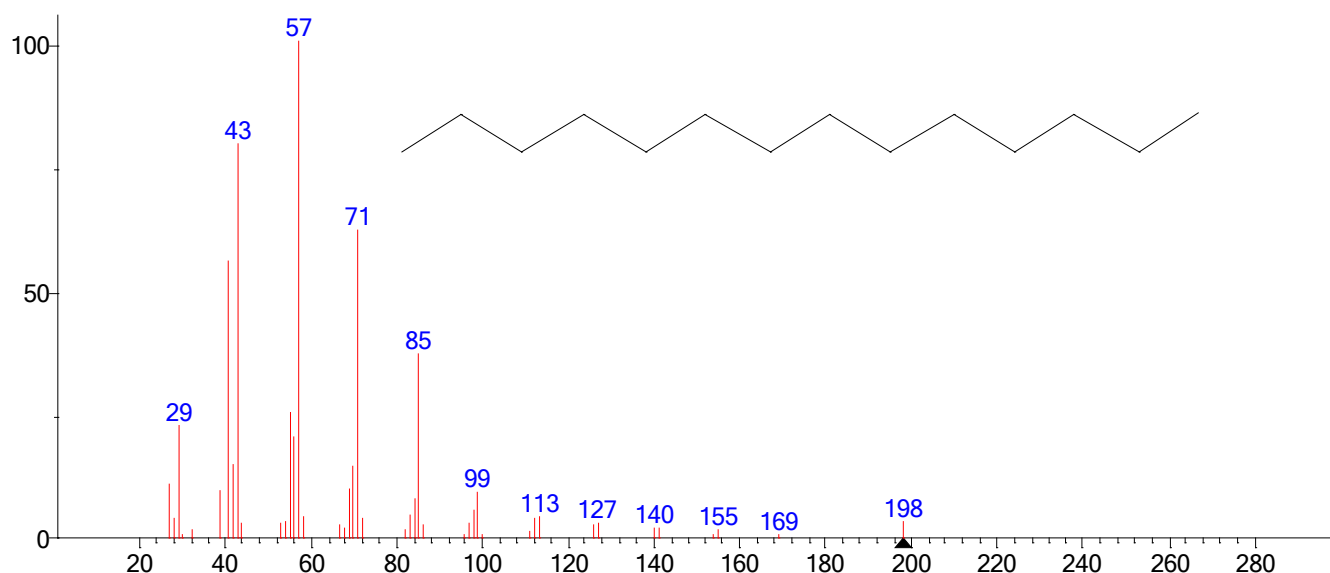
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.41



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.80

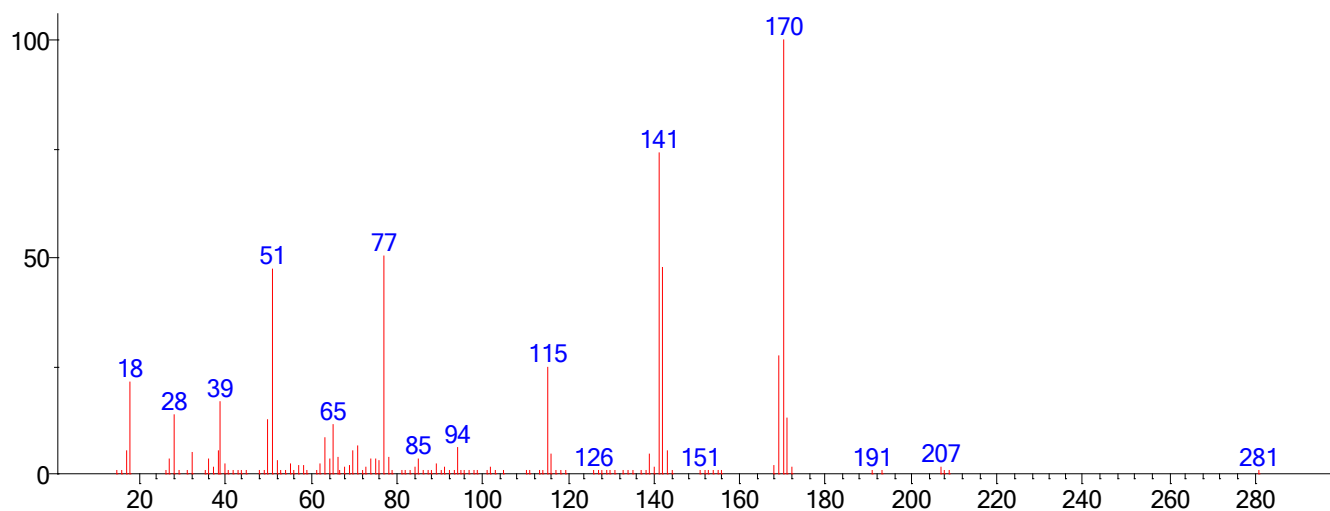


(Text File) B12_0_G#4353 RT: 18.80 AV: 1

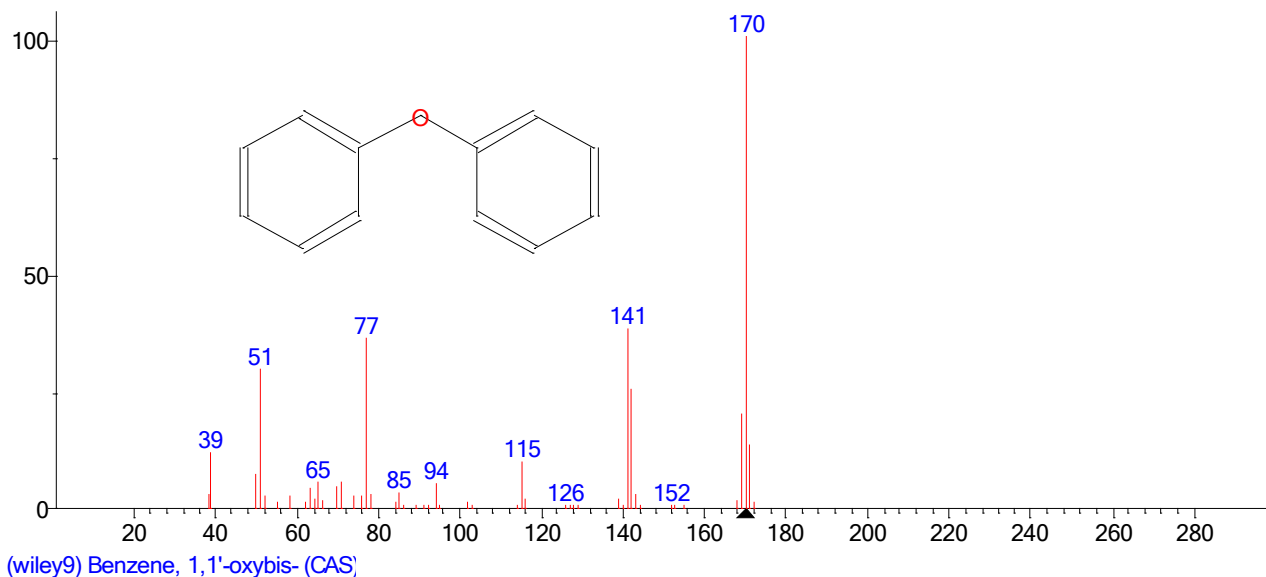


(replib) Tetradecane

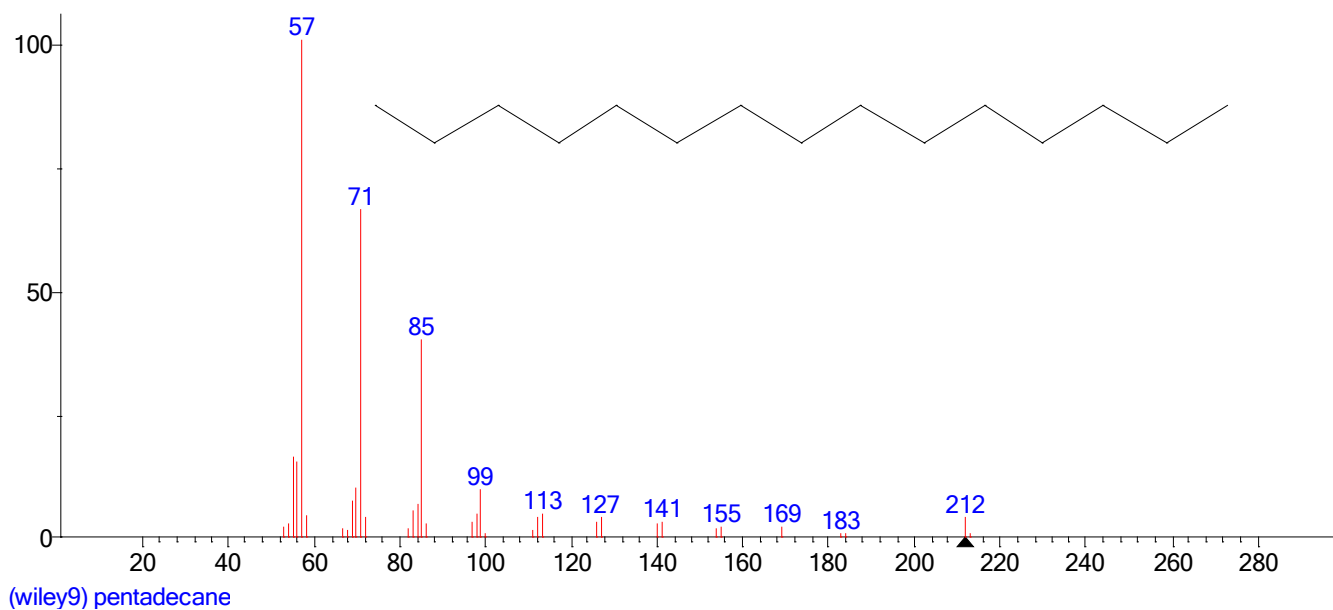
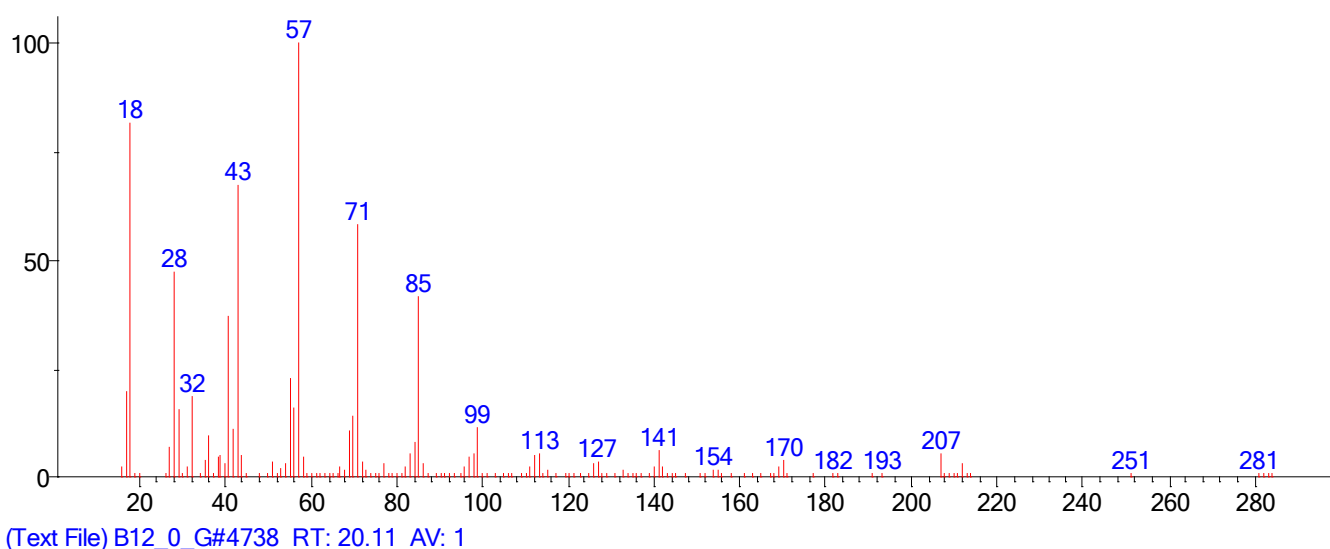
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 19.39



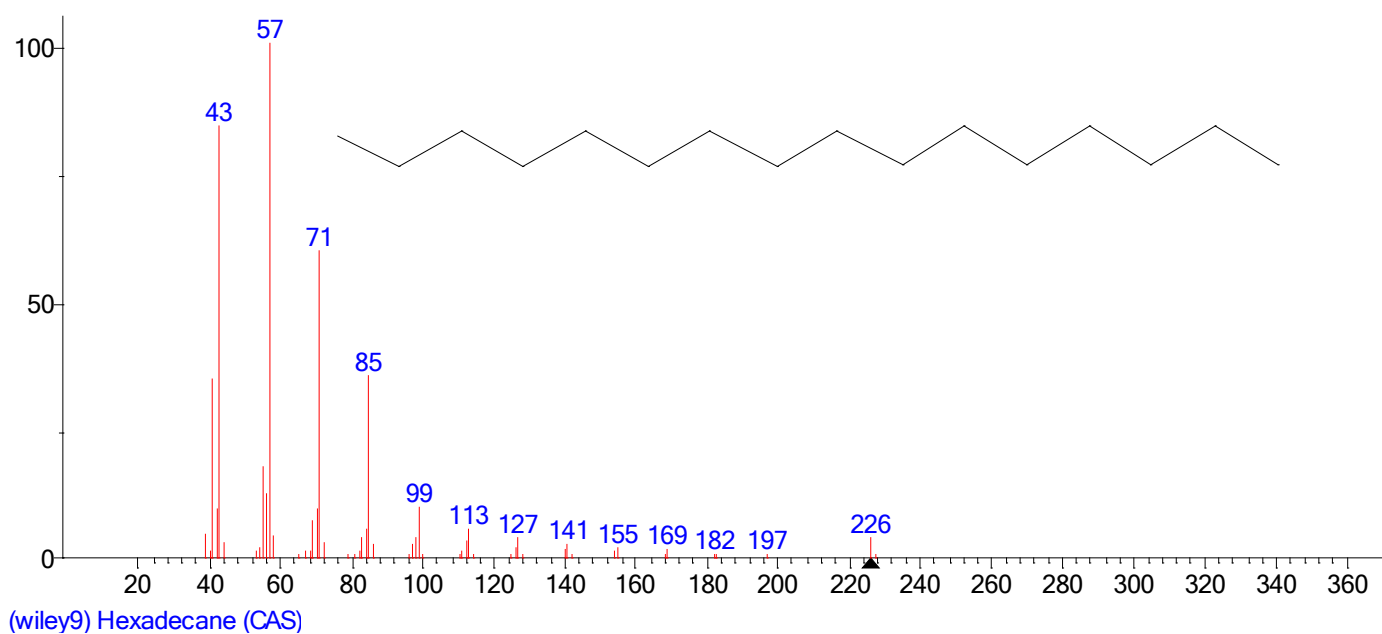
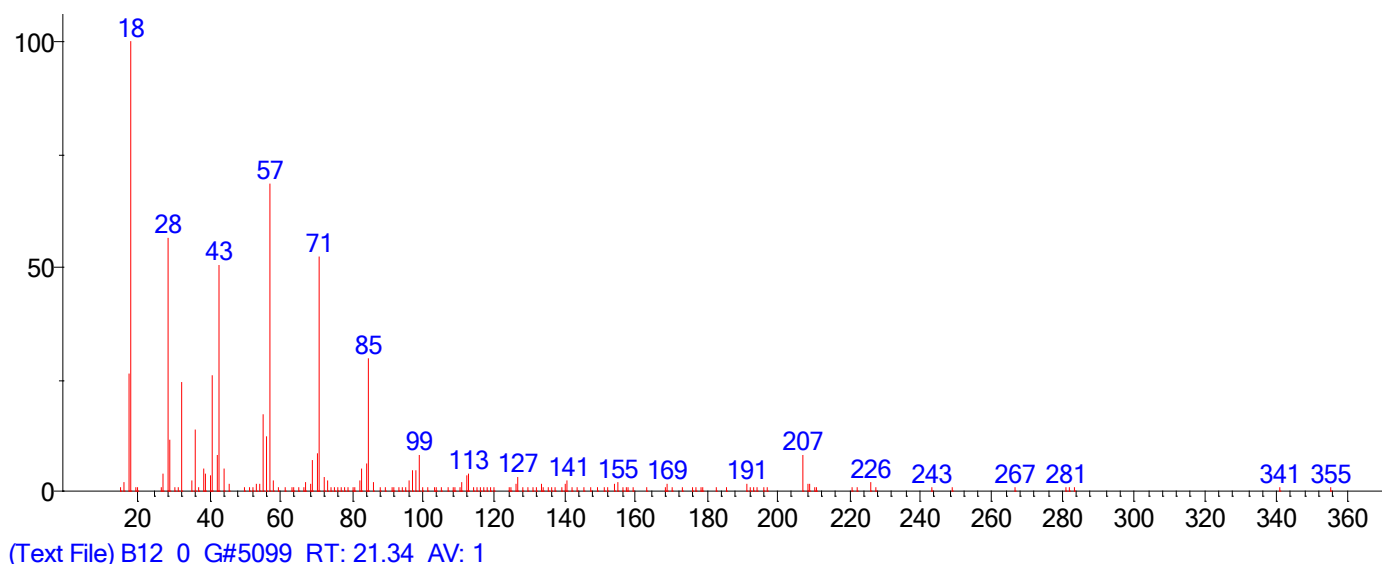
(Text File) B12_0_G#4525 RT: 19.39 AV: 1



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.11



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 21.34



Выводы:

В образце Э-31-9/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- углеводороды (парафины, олефины, ароматические);
- жирные спирты;
- кислородсодержащие соединения (эфир, гидроксикетон).