

## ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ образца Э-31-10/2020

### 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:** 1,00X10<sup>5</sup> (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.

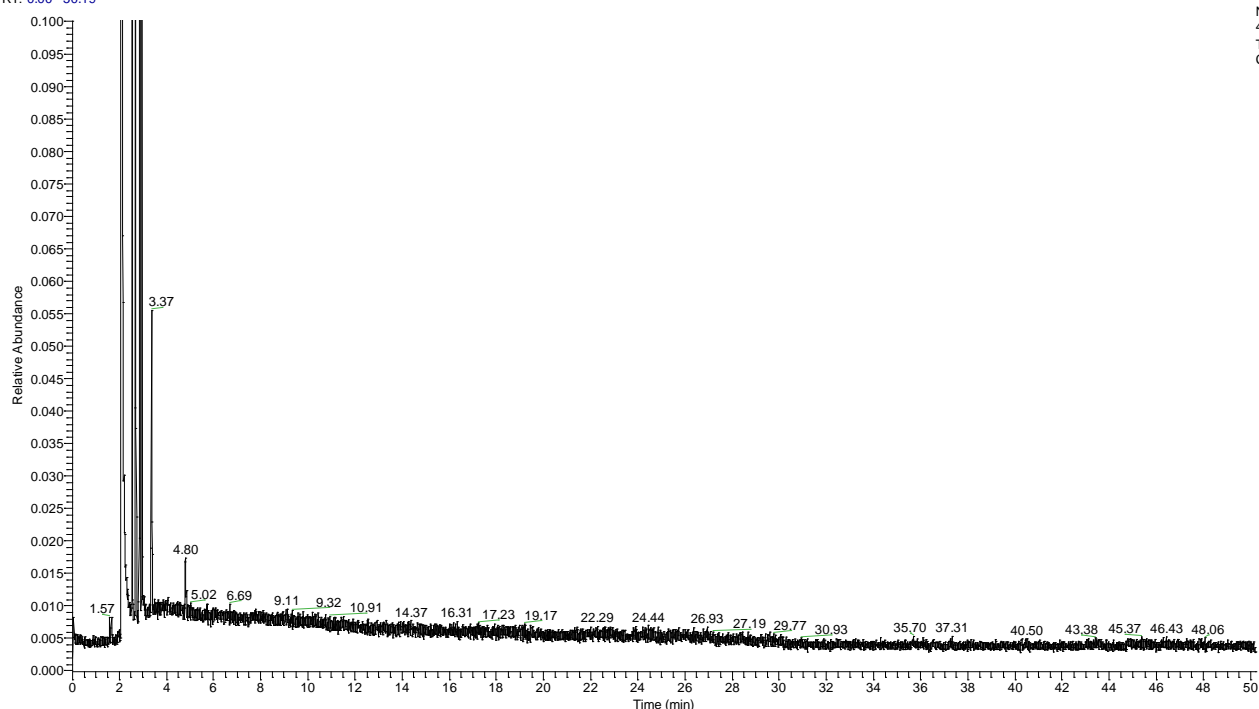
Время экстракции: 1 сутки.

Объем закола: 1 мкл.

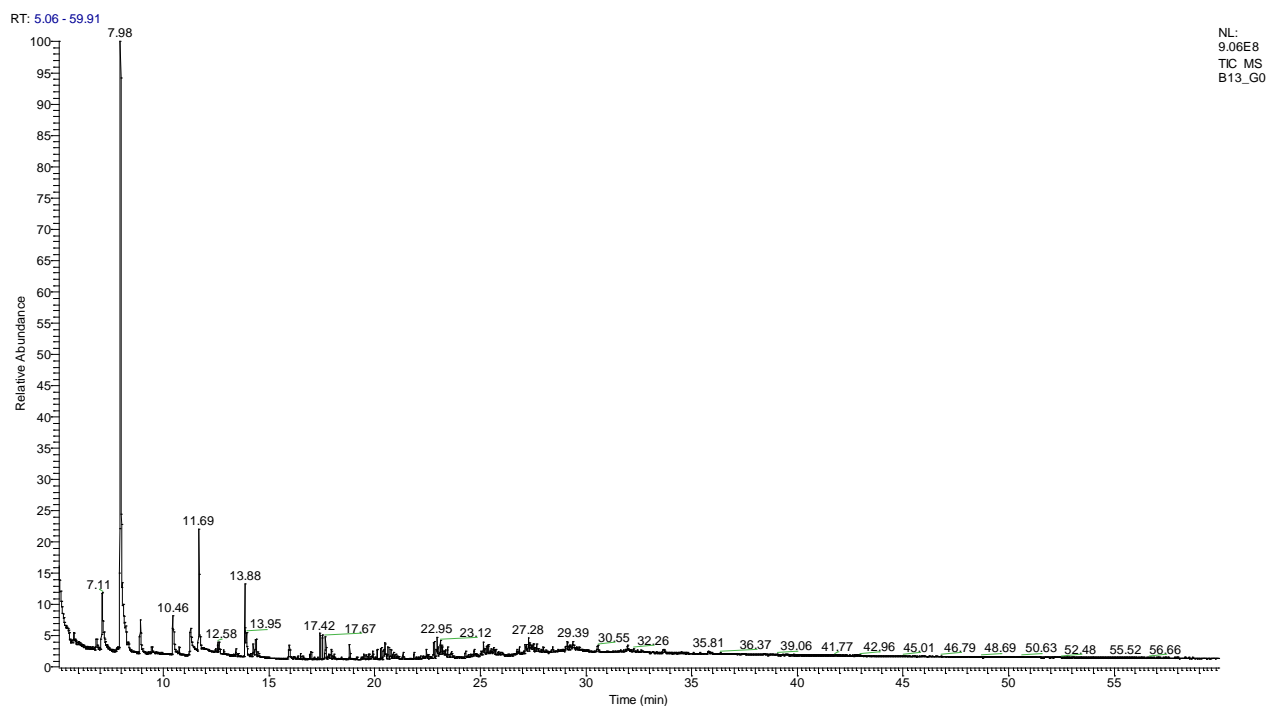
Задержка МС-детектирования: 5 мин.

### Хроматограмма экстрагента:

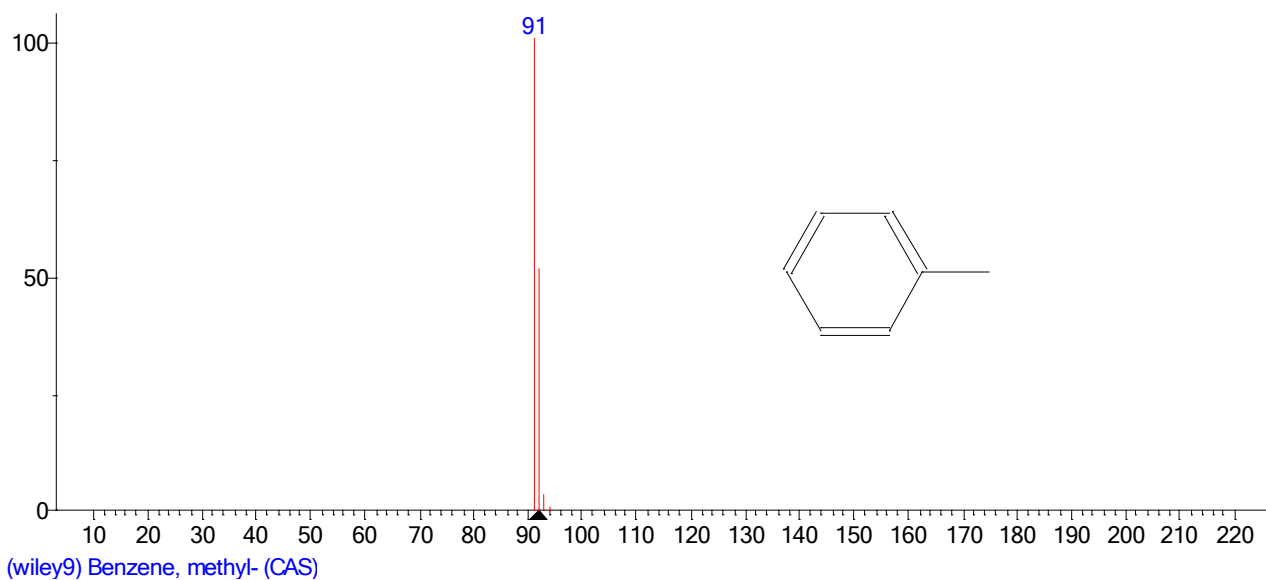
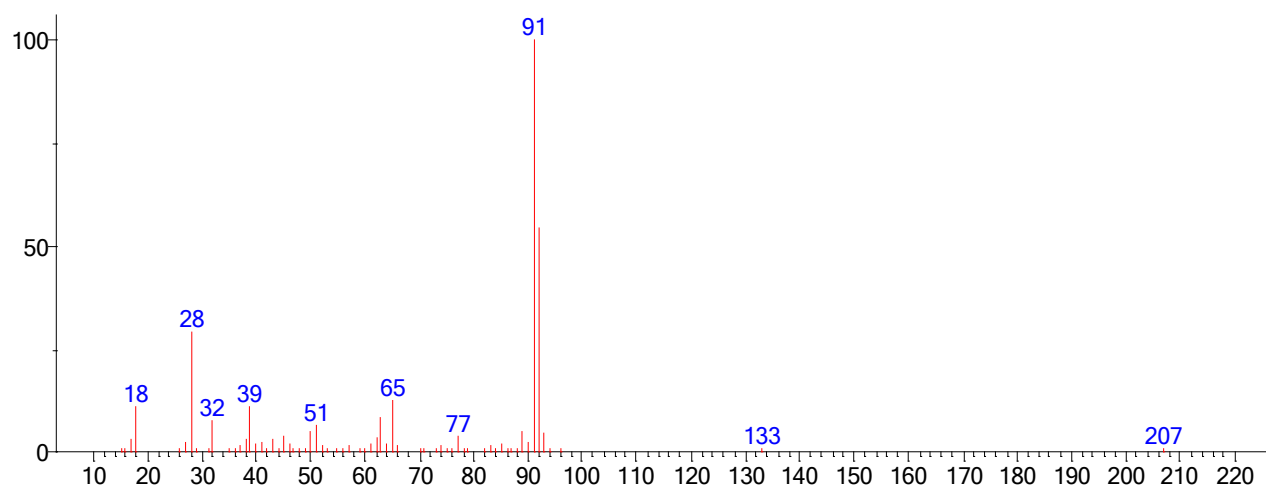
RT: 0.00 - 50.19



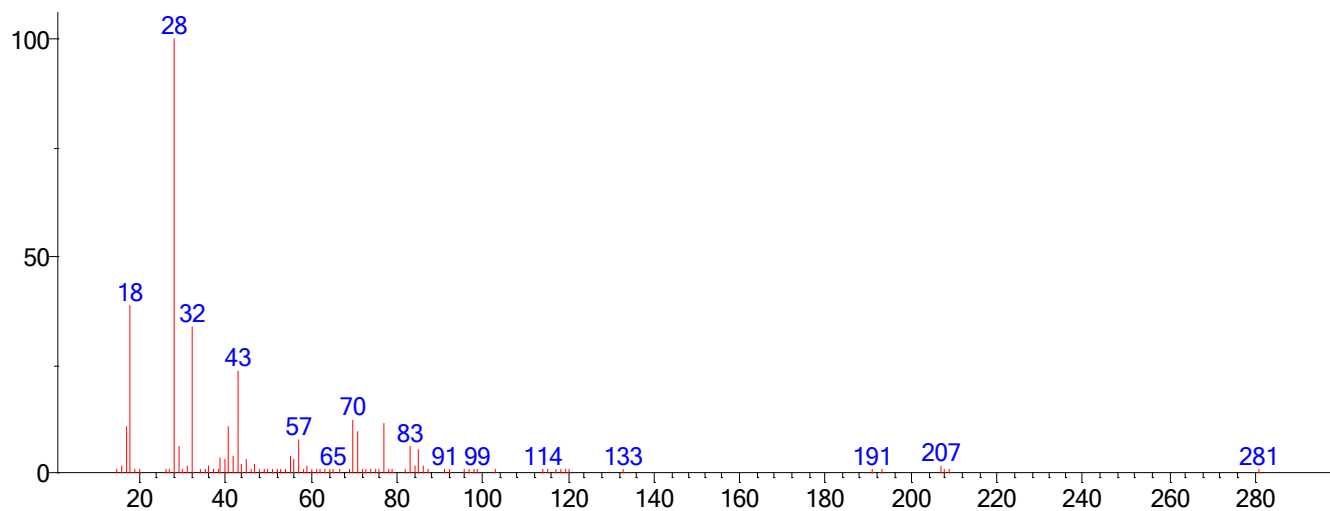
## Общая хроматограмма образца:



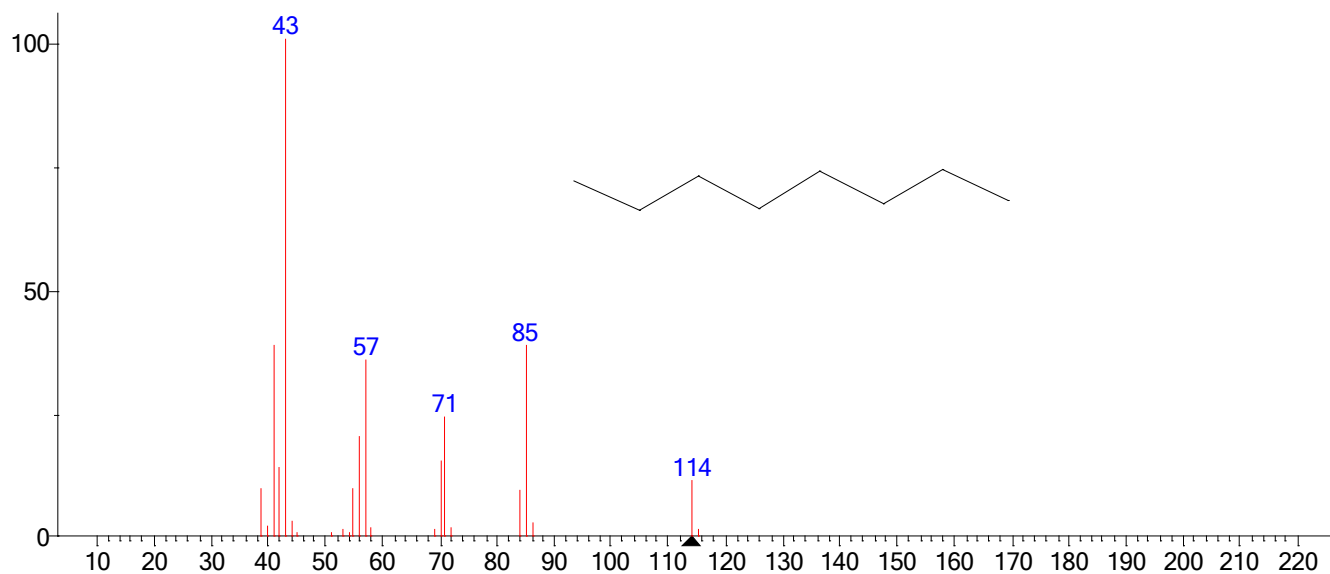
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.11



### Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.98

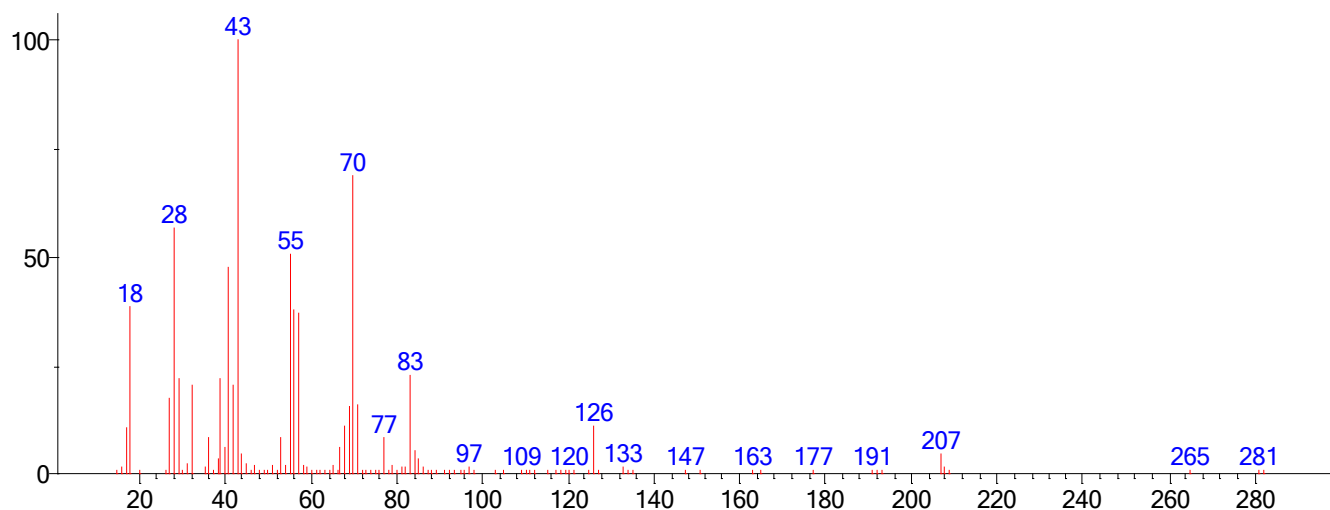


(Text File) B13\_G0#848 RT: 6.88 AV: 1

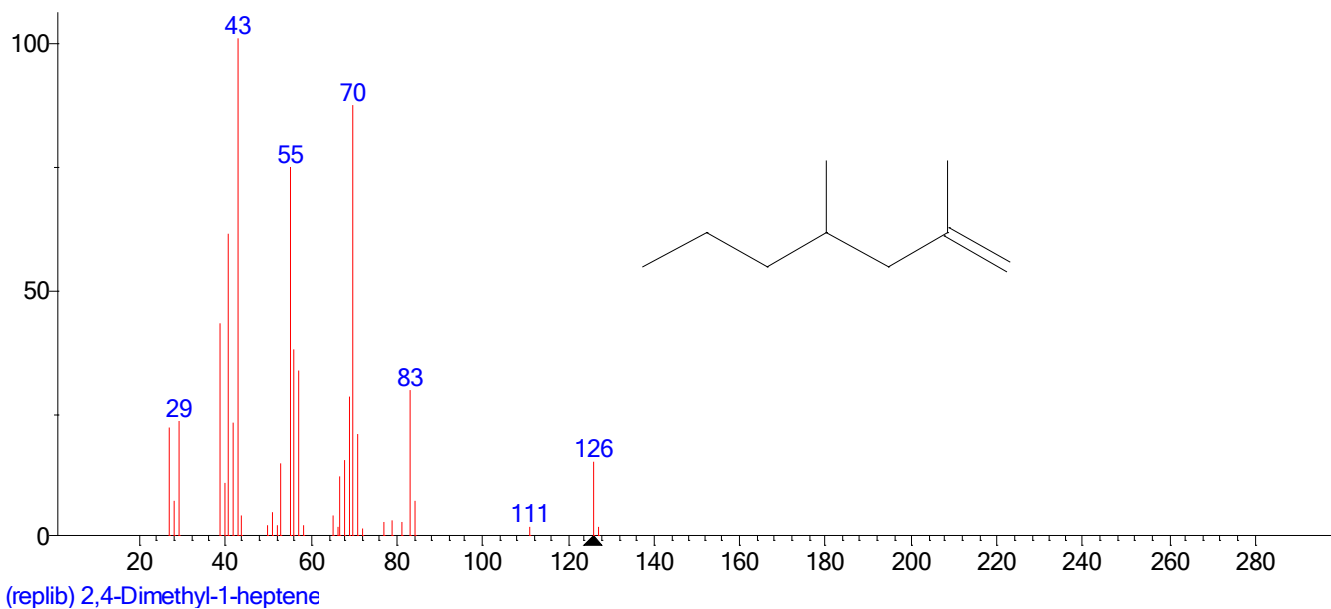


(wiley9) Octane (CAS)

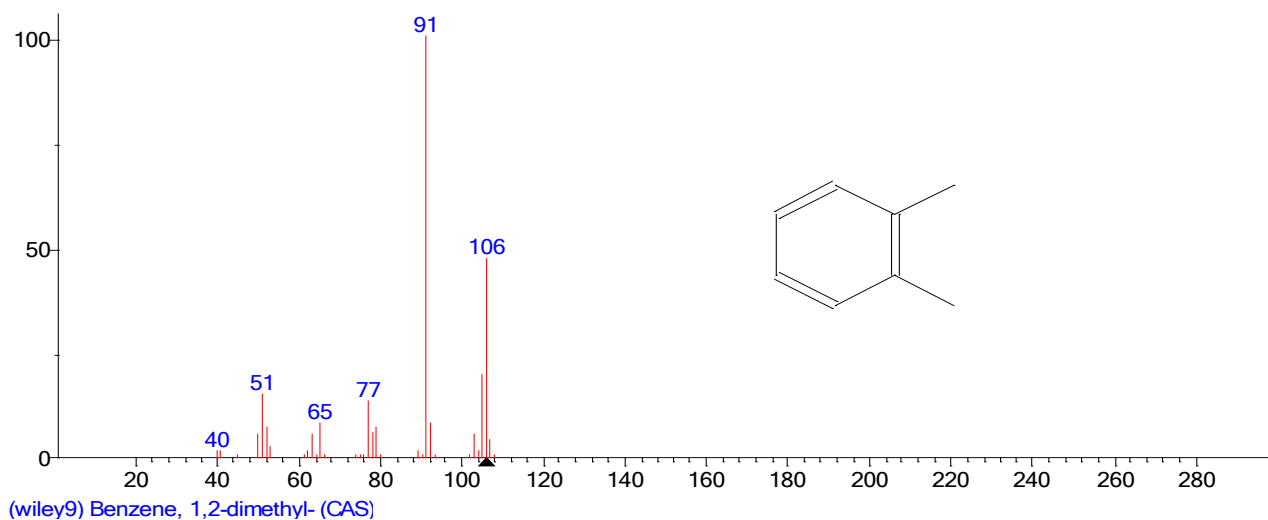
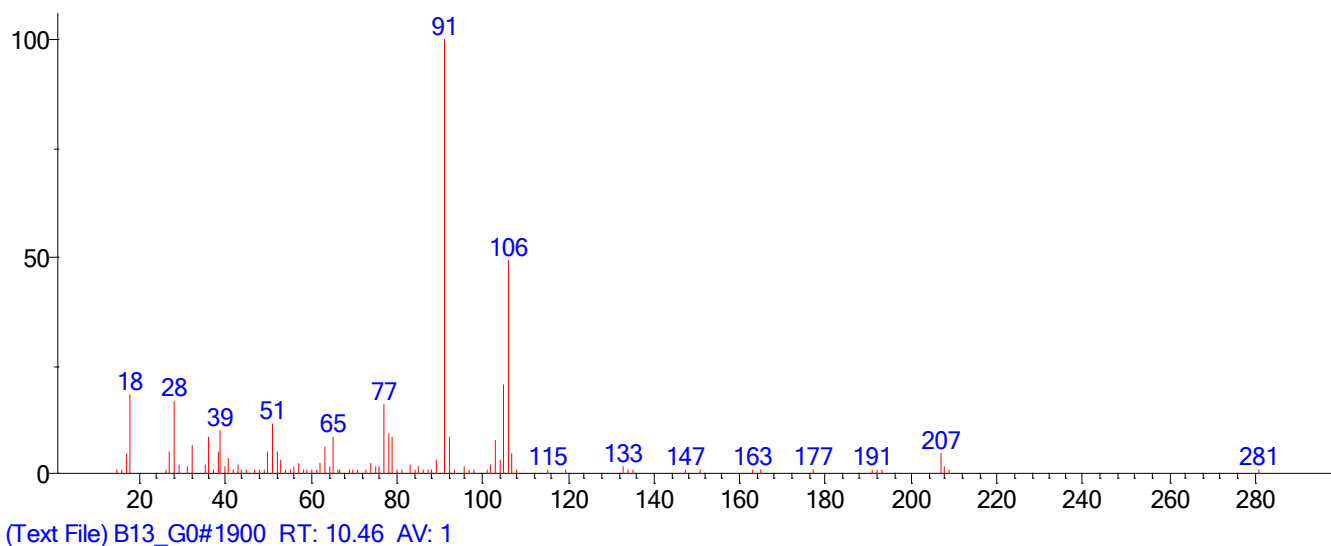
### Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.91



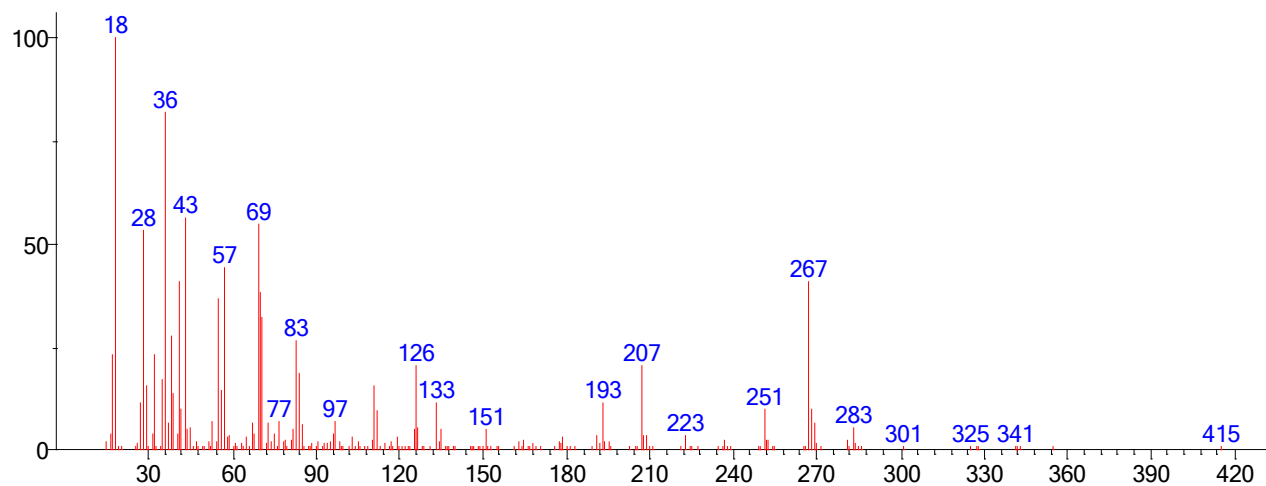
(Text File) B13\_G0#1445 RT: 8.91 AV: 1



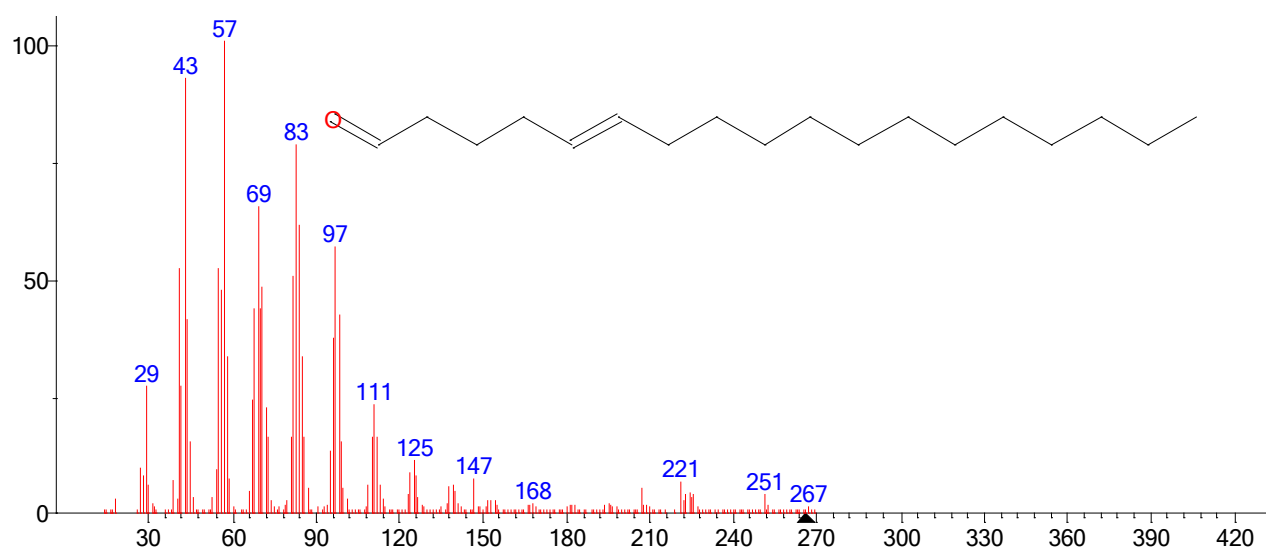
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.46



## Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 13.88

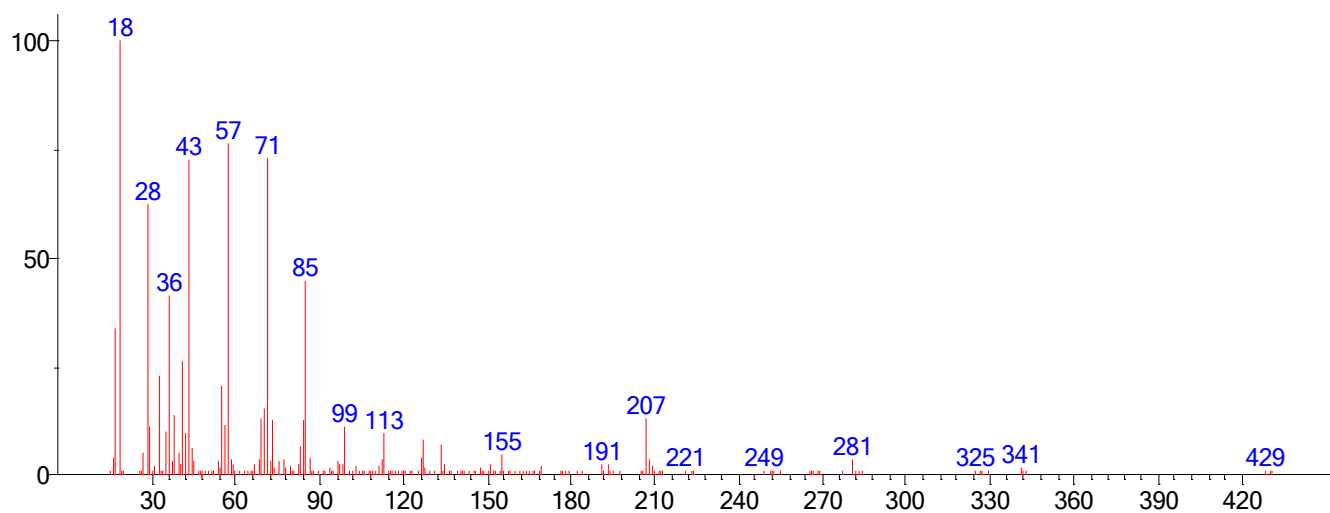


(Text File) B13\_G0#2932 RT: 13.97 AV: 1

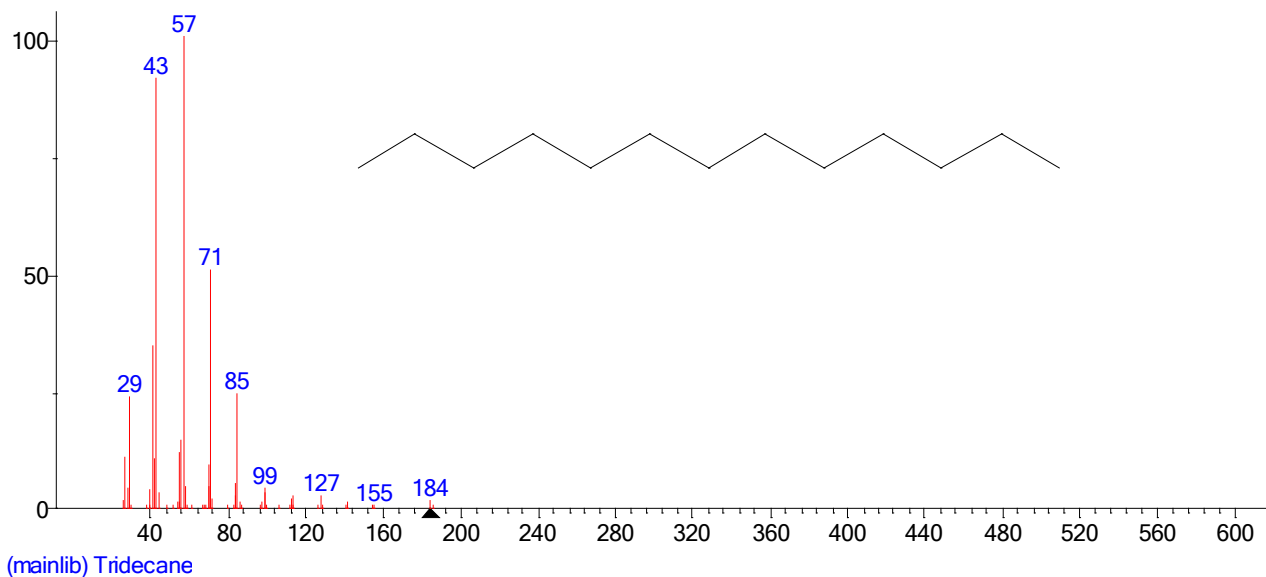


(wiley9) 5-Octadecenal (spectrum disagrees) (CAS)

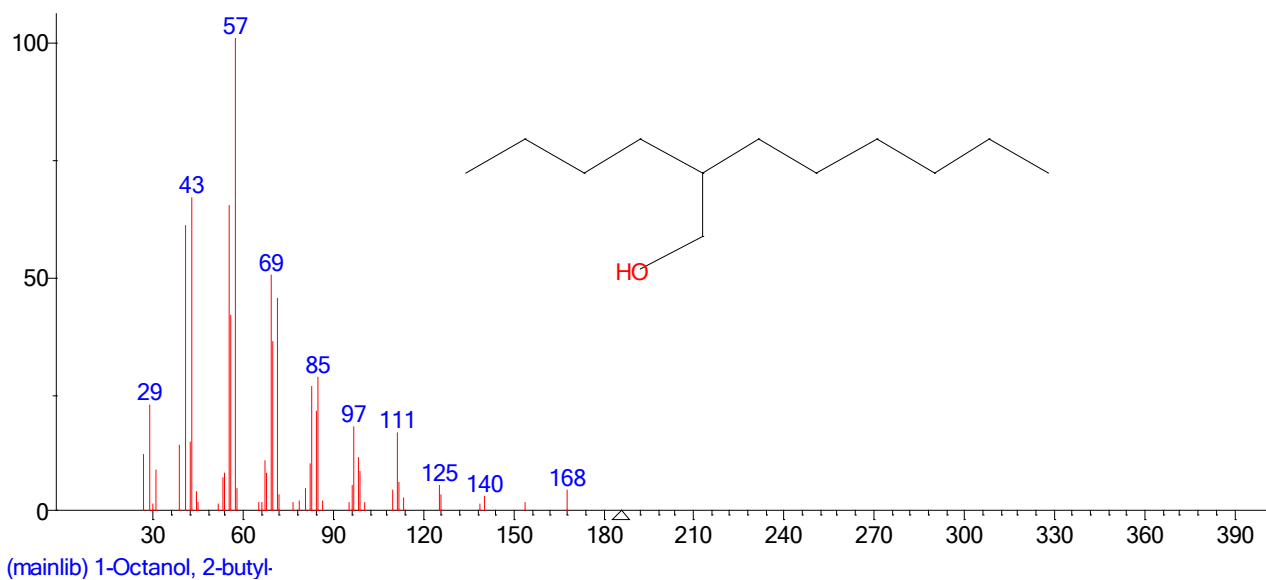
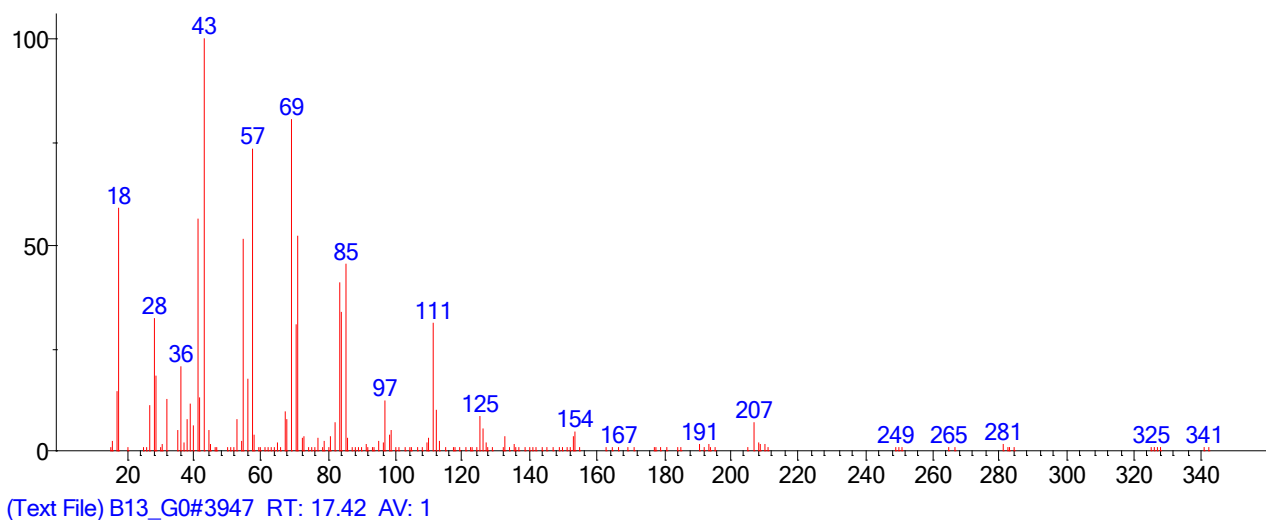
## Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.01



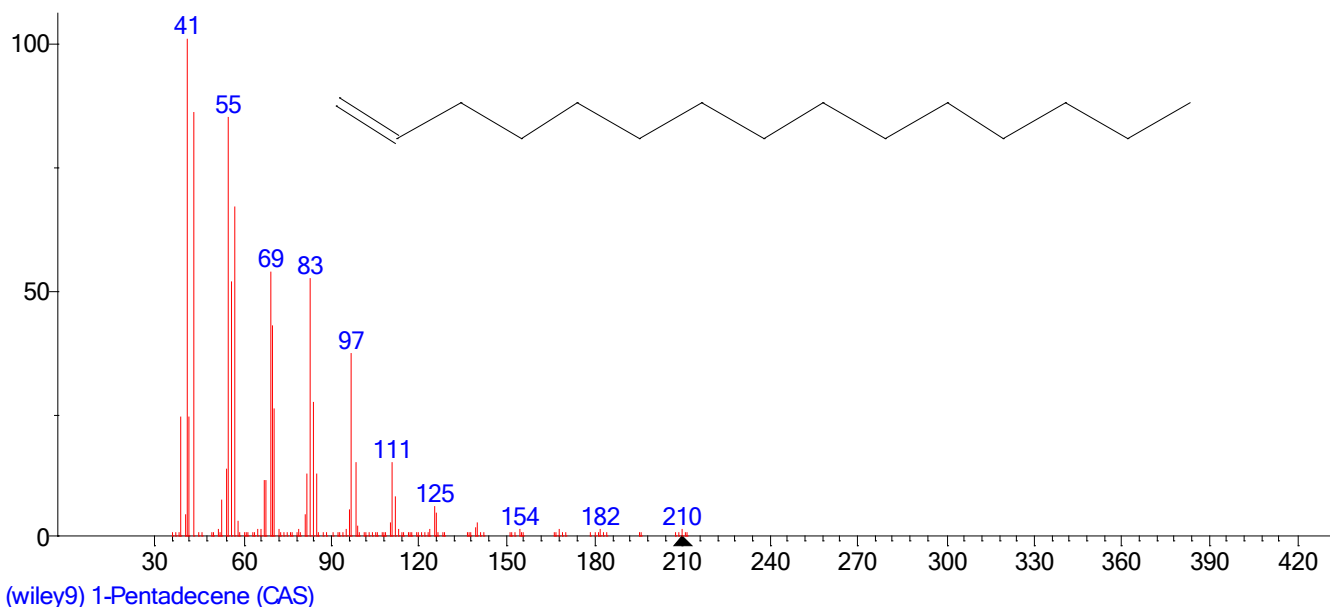
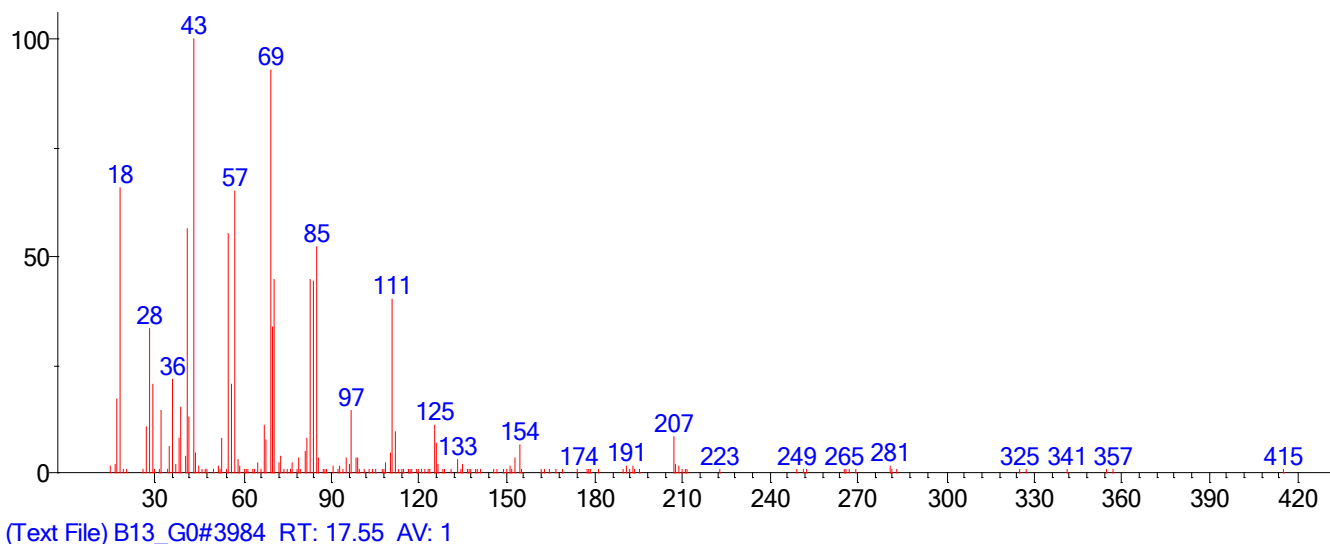
(Text File) B13\_G0#3826 RT: 17.01 AV: 1



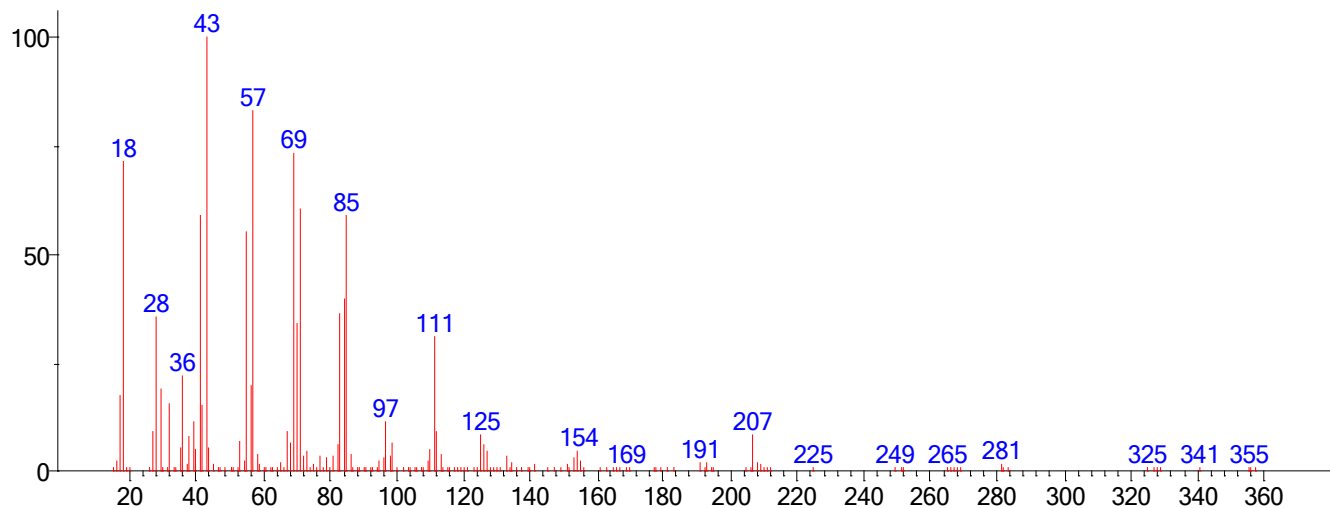
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.42



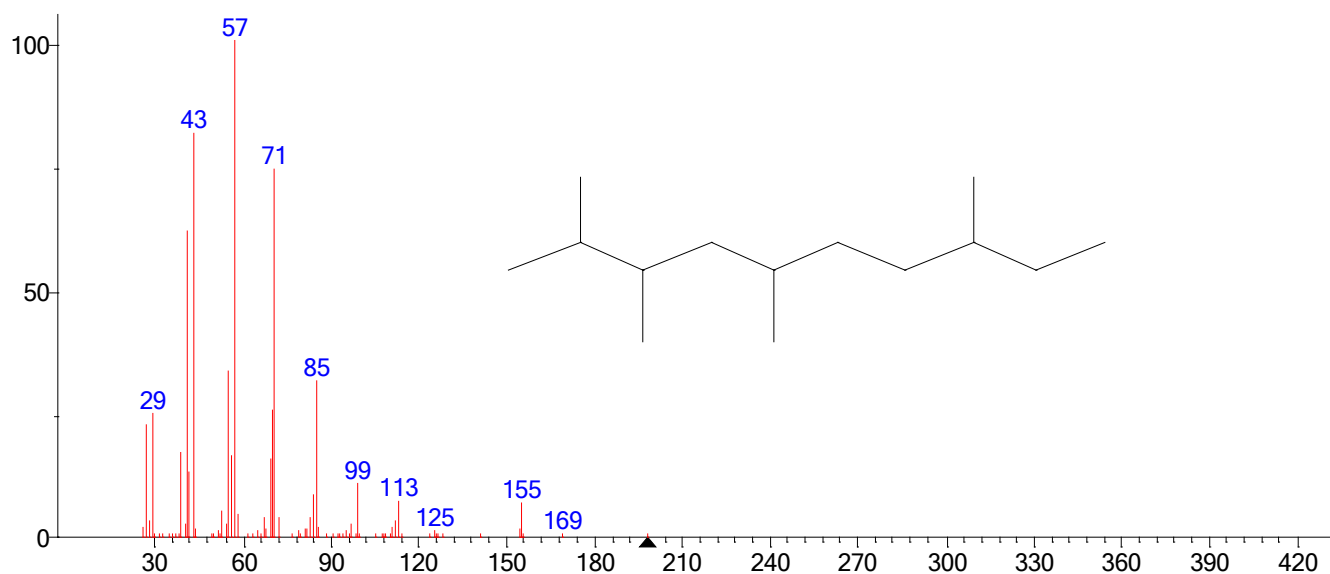
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.55



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.67

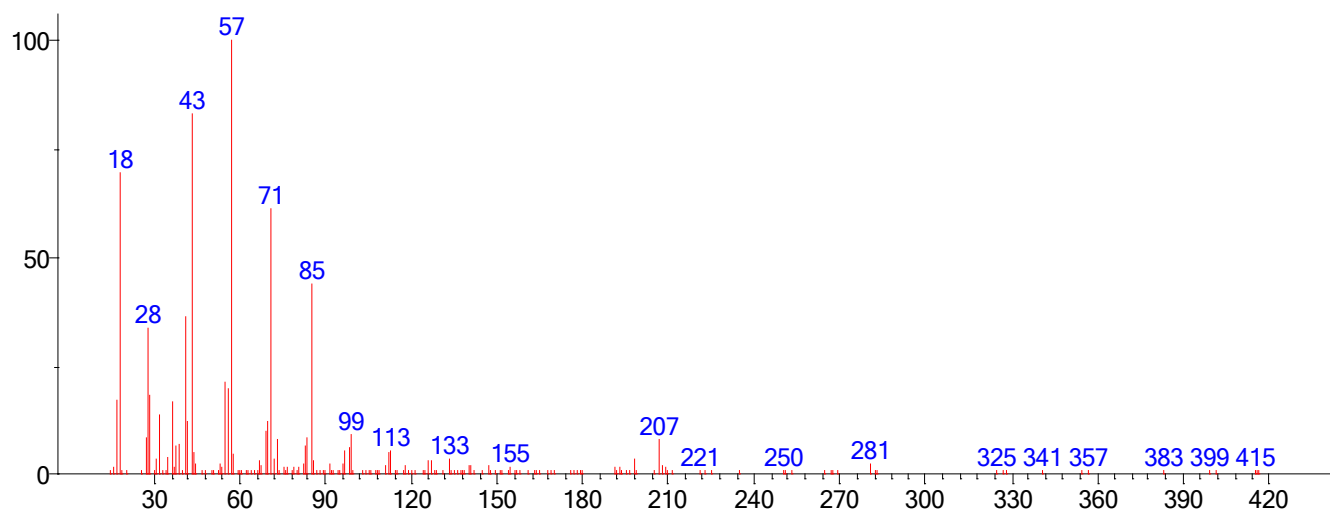


(Text File) B13\_G0#4021 RT: 17.67 AV: 1



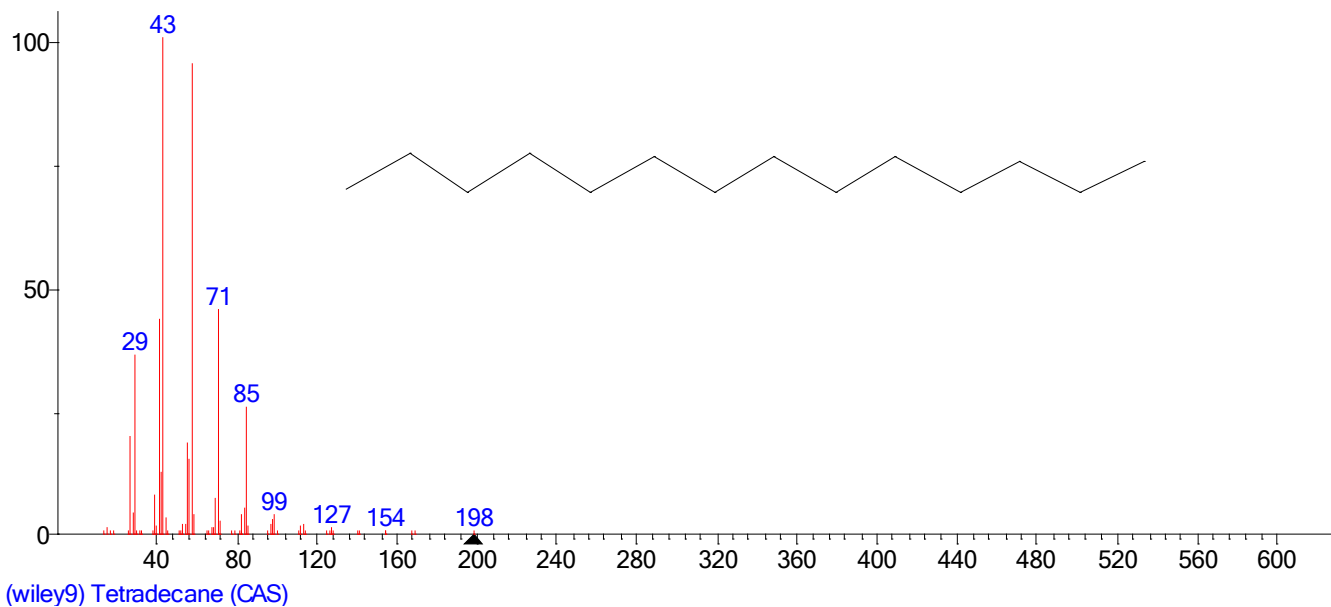
(mainlib) Decane, 2,3,5,8-tetramethyl-

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.82

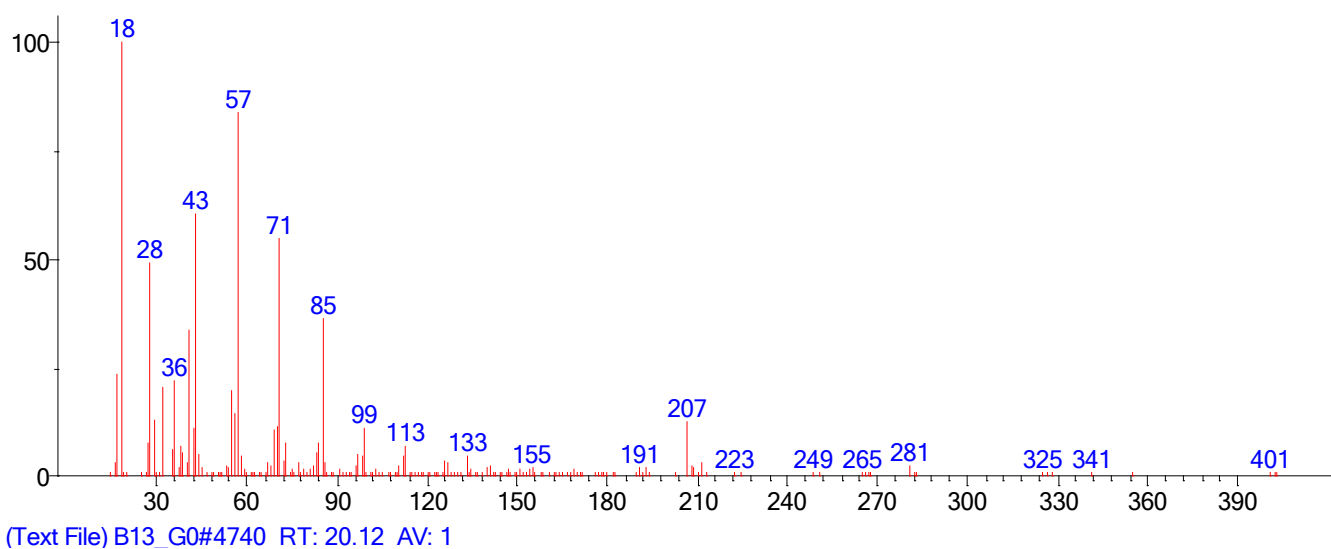


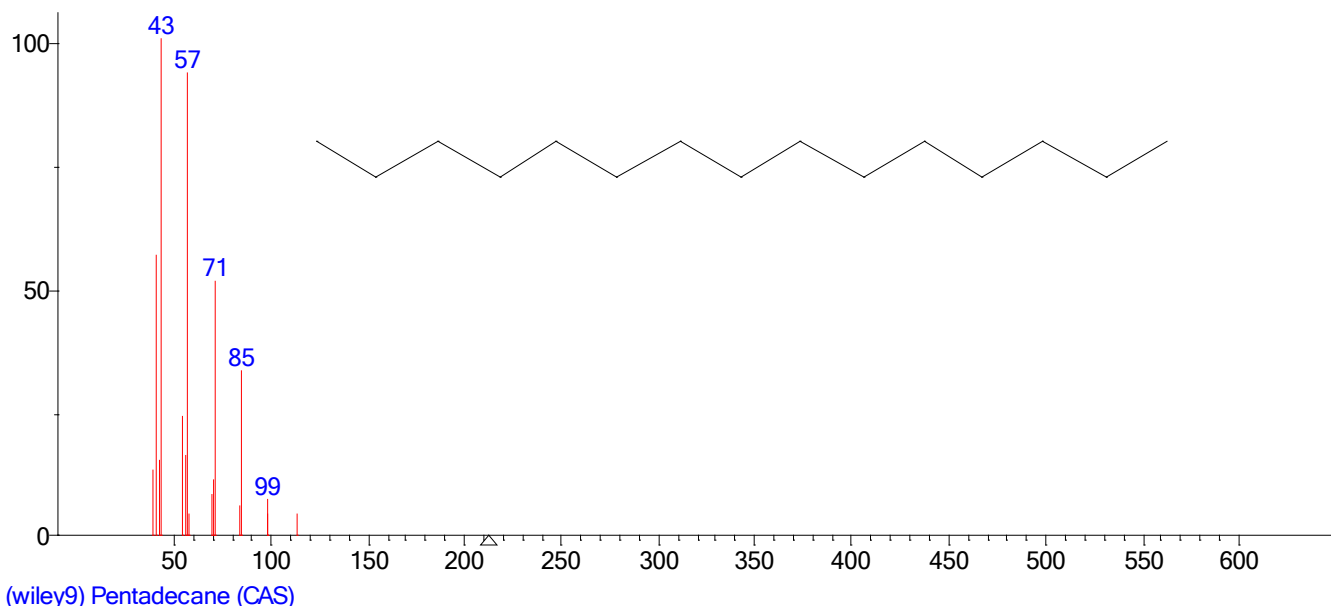
(Text File) B13\_G0#4358 RT: 18.82 AV: 1



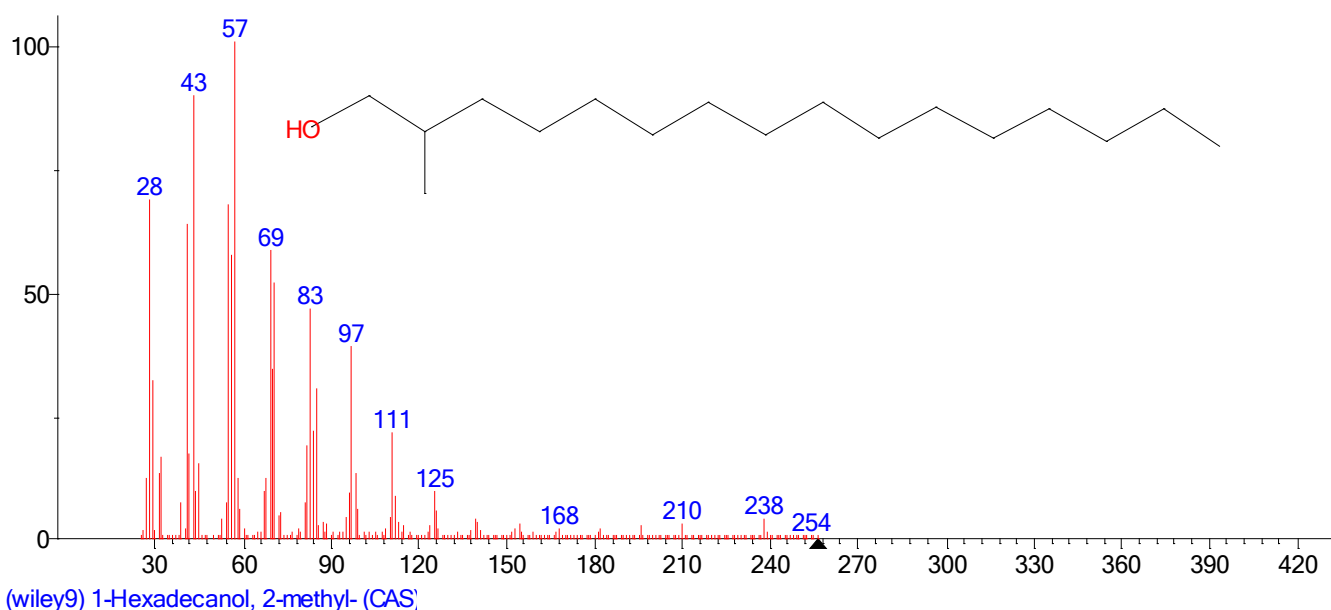
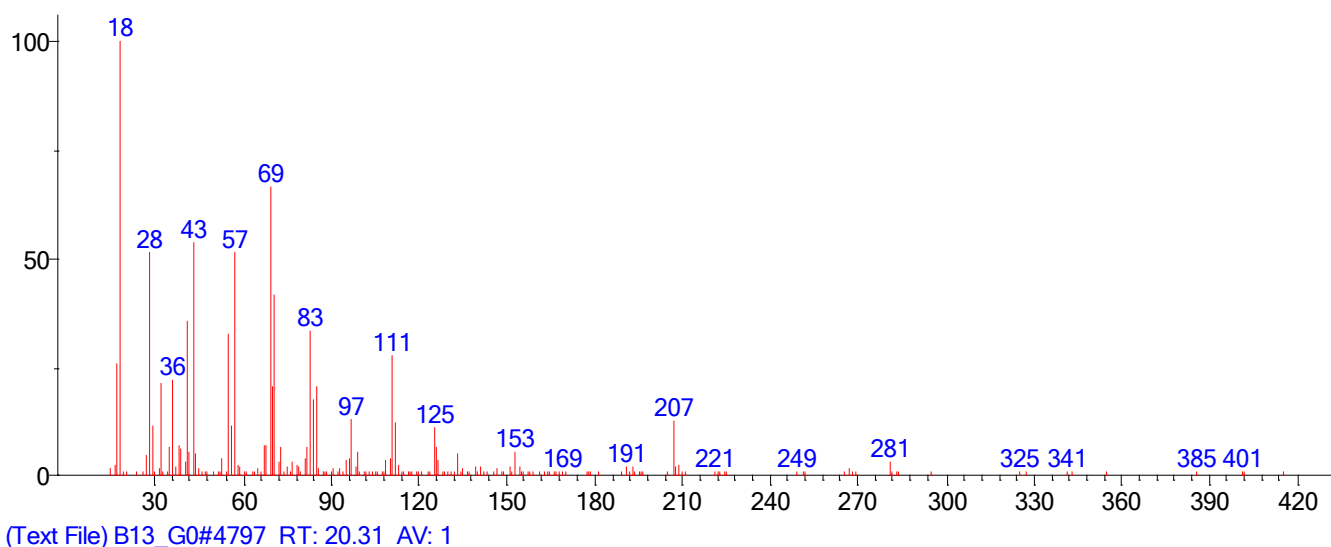


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.12

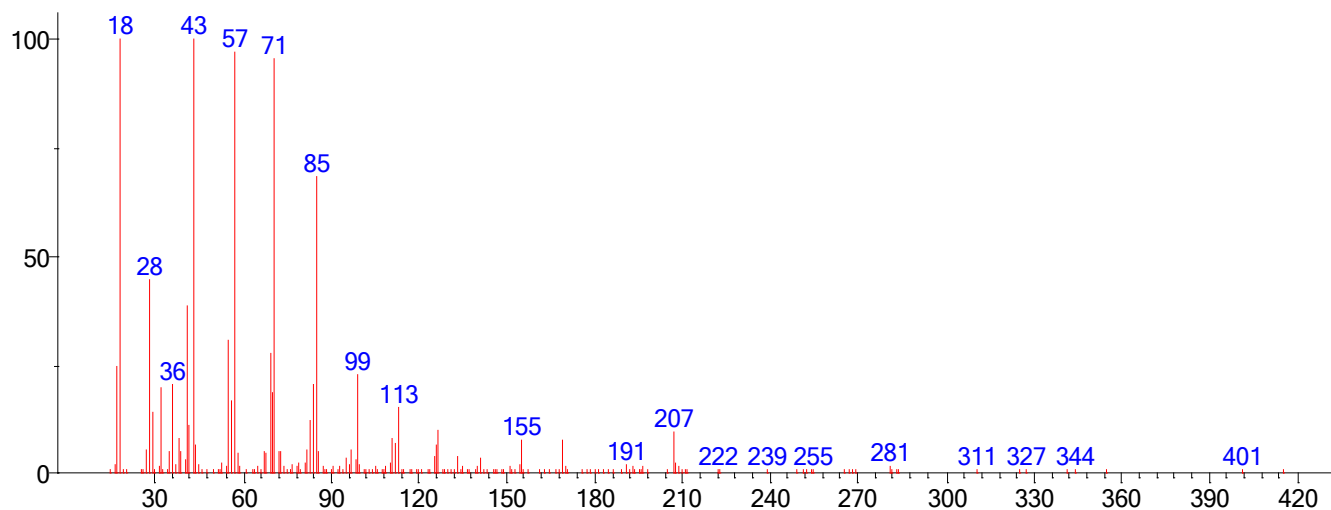




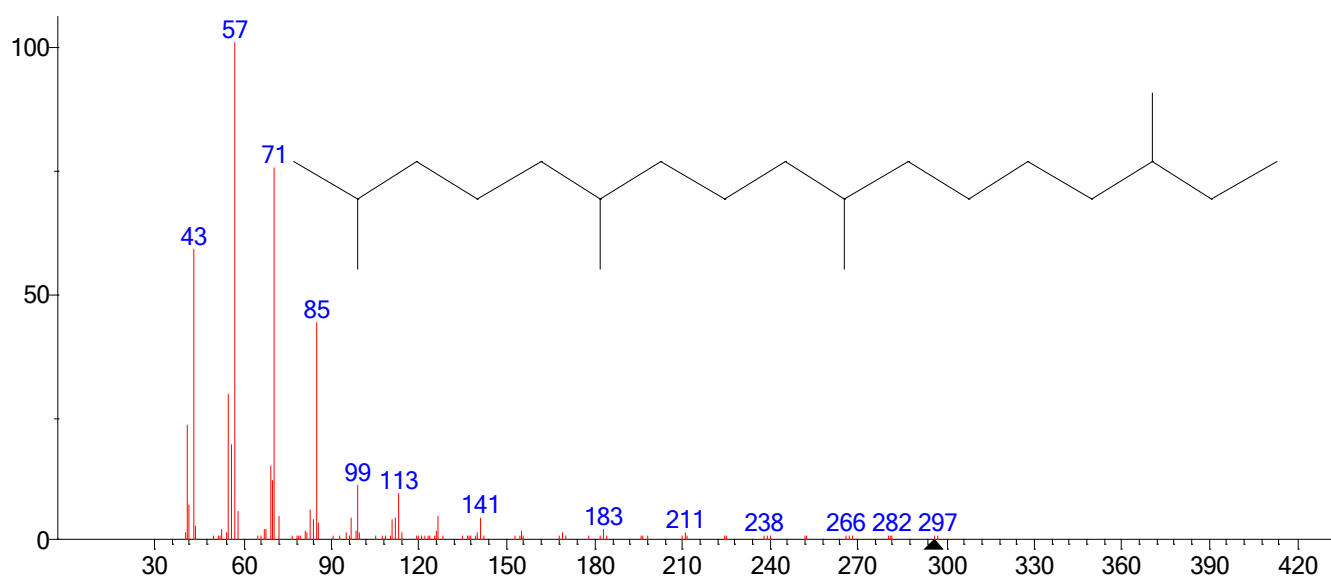
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.31



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.50

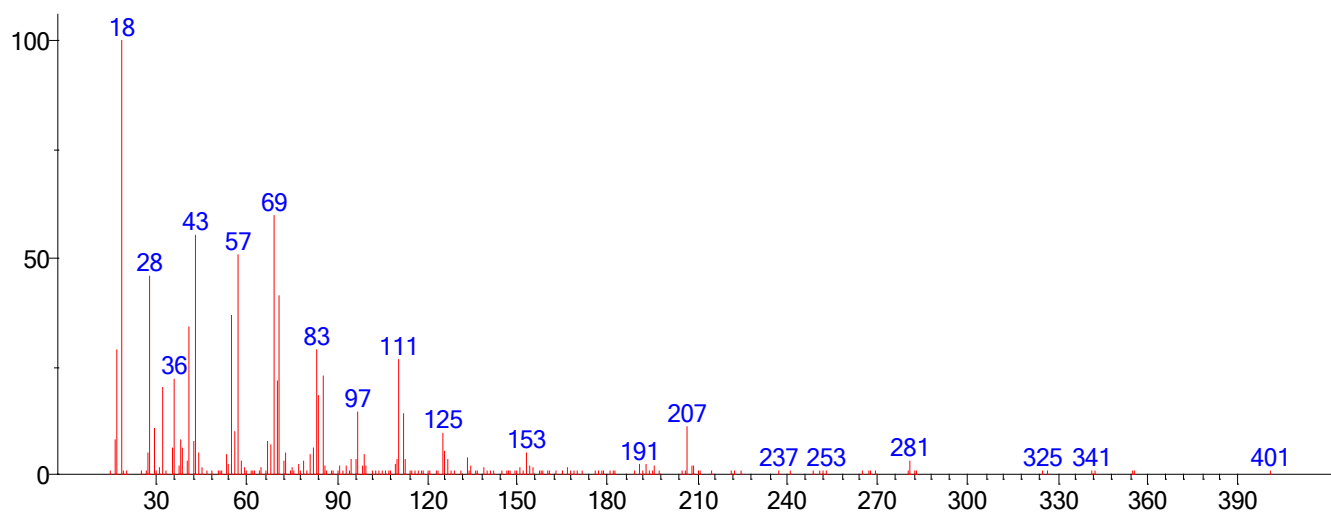


(Text File) B13\_G0#4852 RT: 20.50 AV: 1

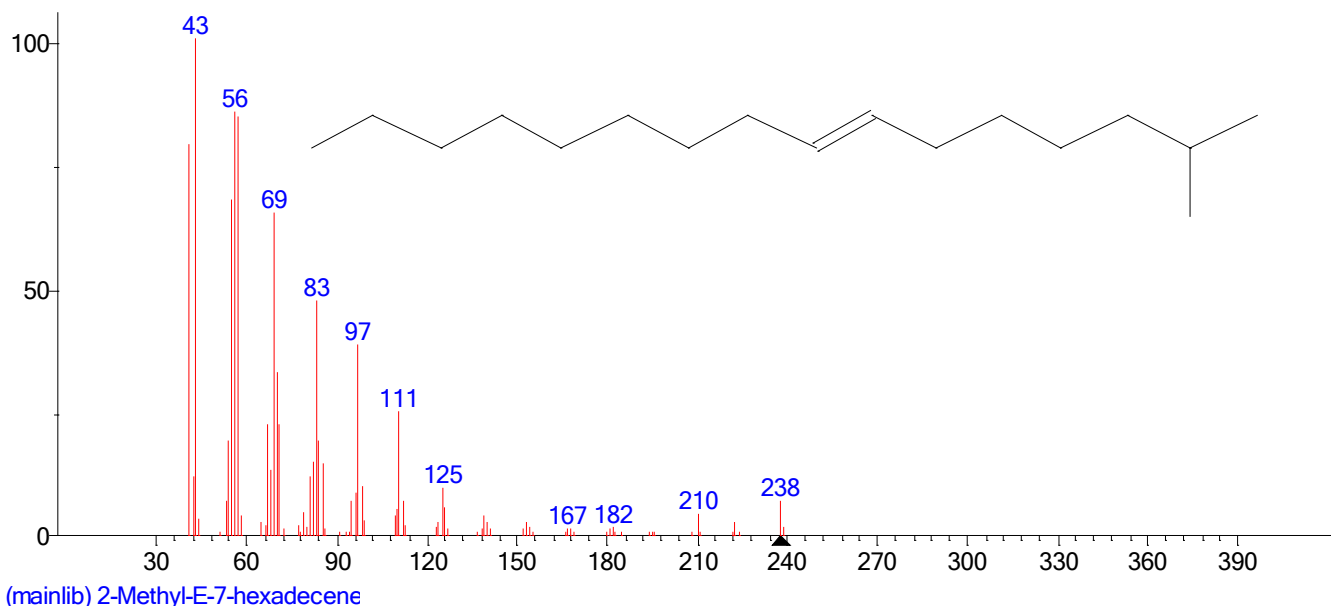


(mainlib) Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl

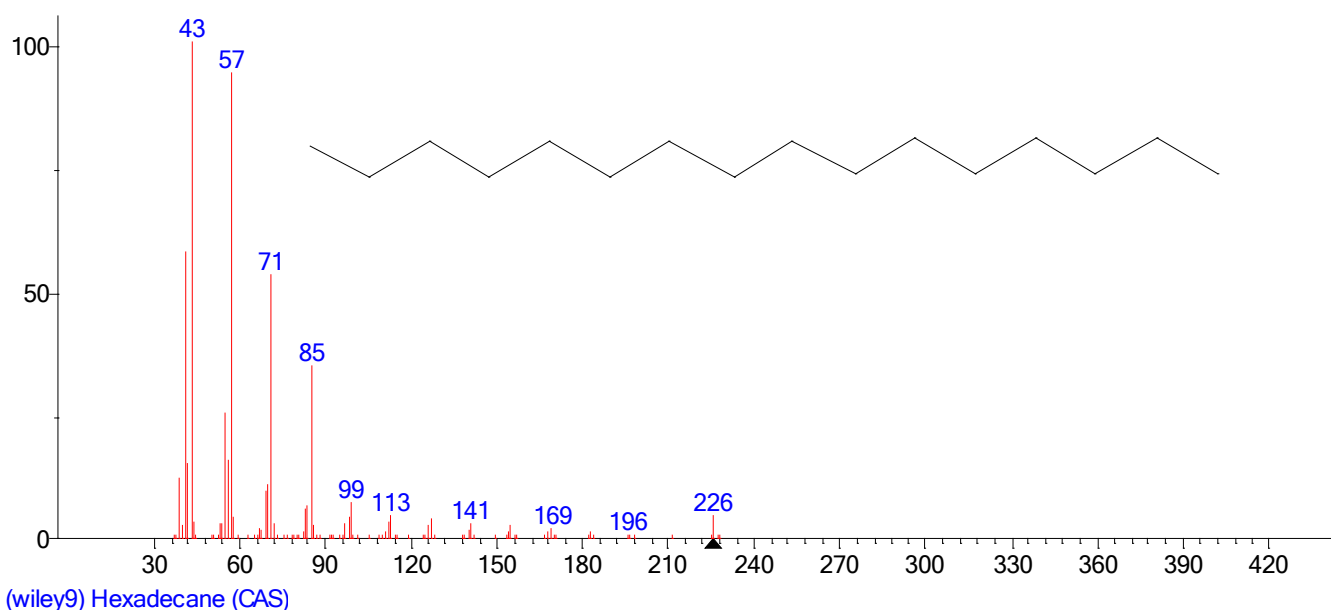
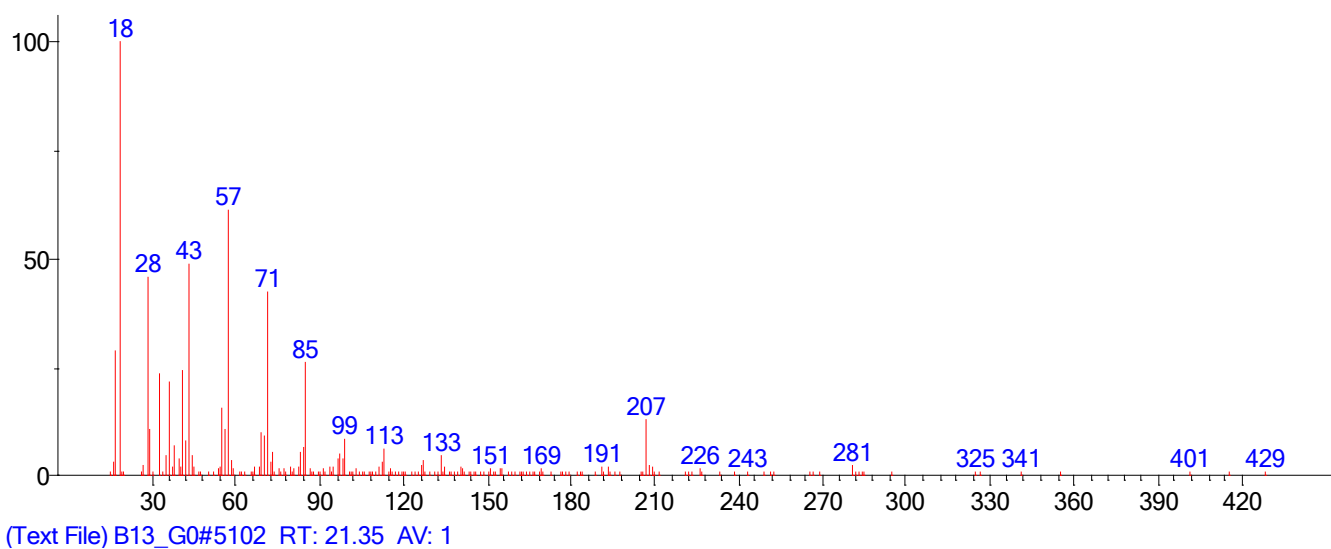
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.65



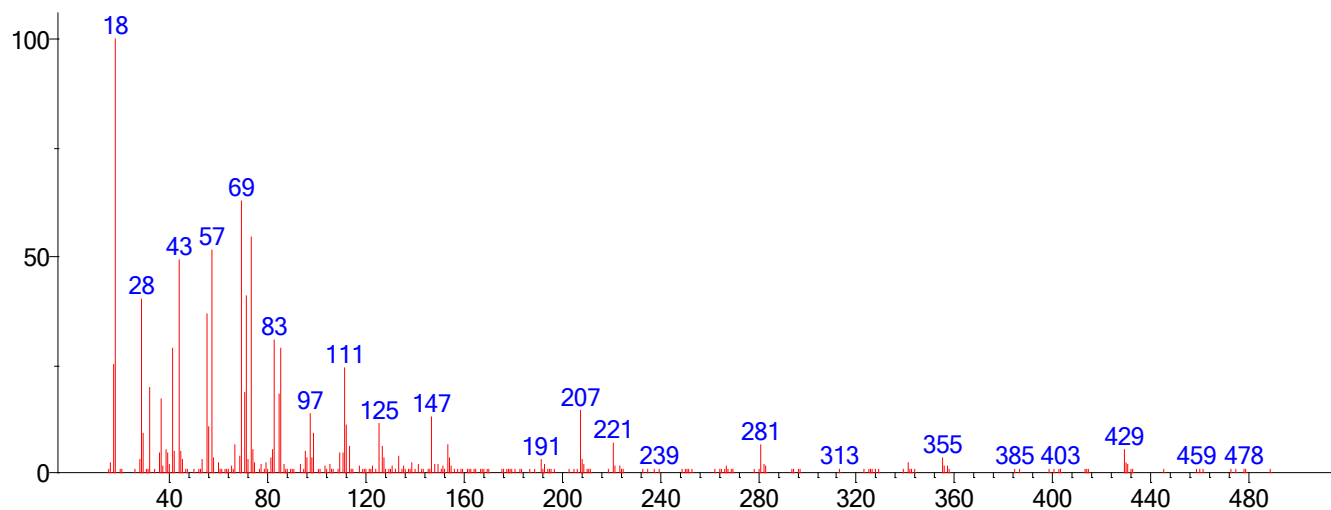
(Text File) B13\_G0#4897 RT: 20.65 AV: 1



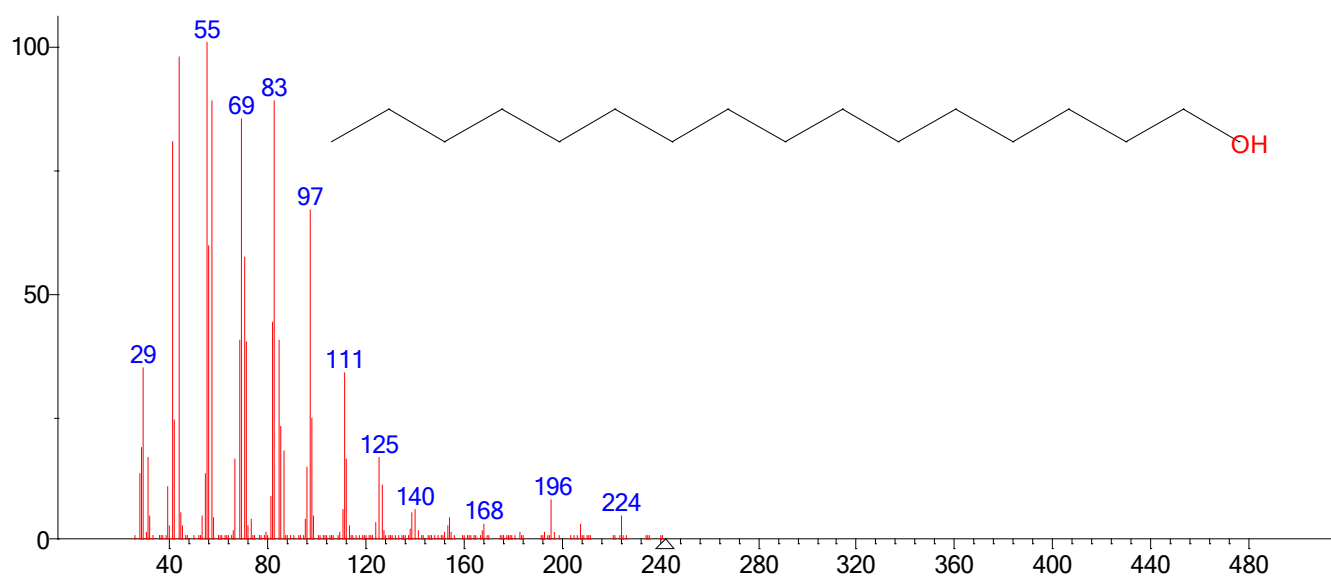
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 21.35



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 22.82

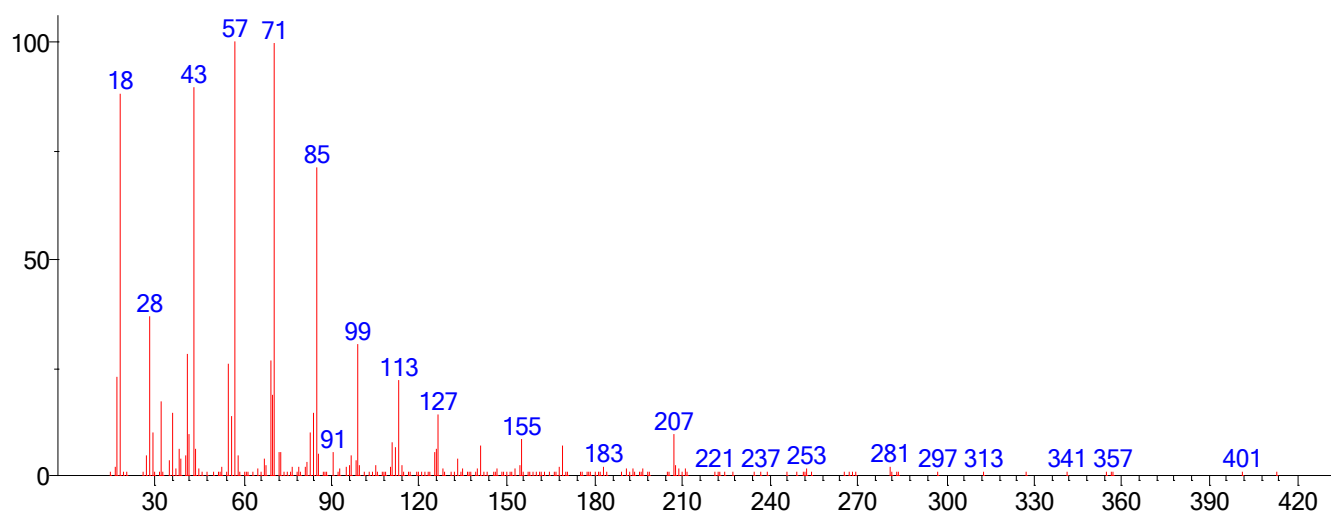


(Text File) B13\_G0#5534 RT: 22.82 AV: 1

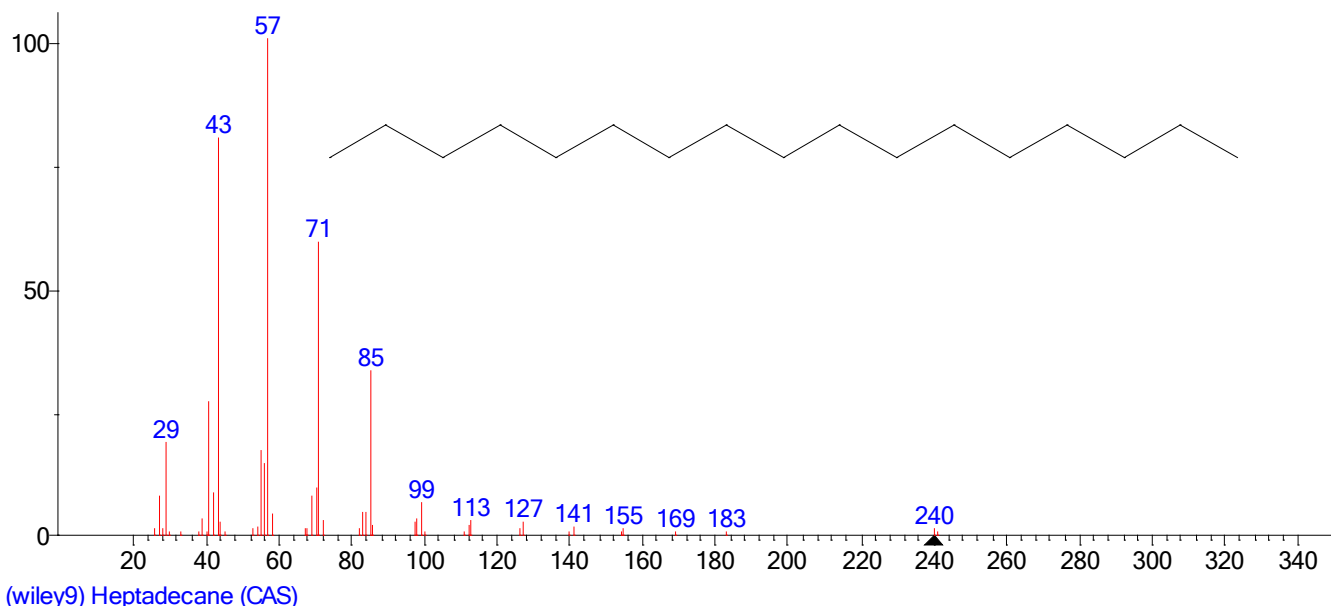


(wiley9) 1-Hexadecanol (CAS)

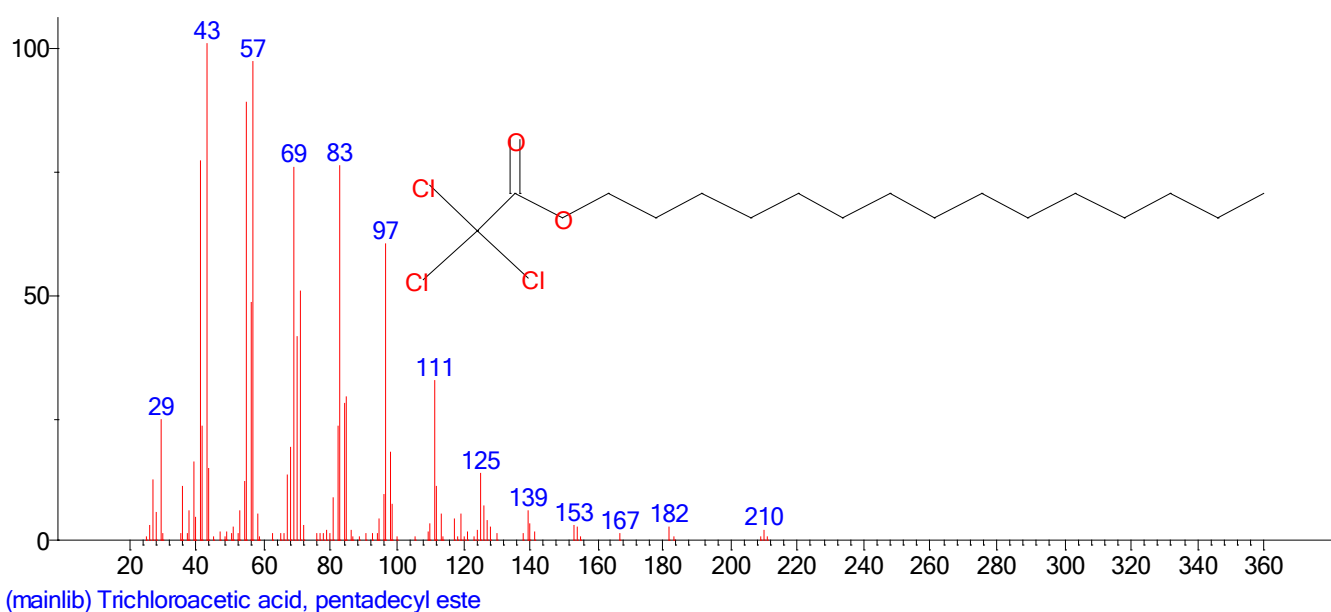
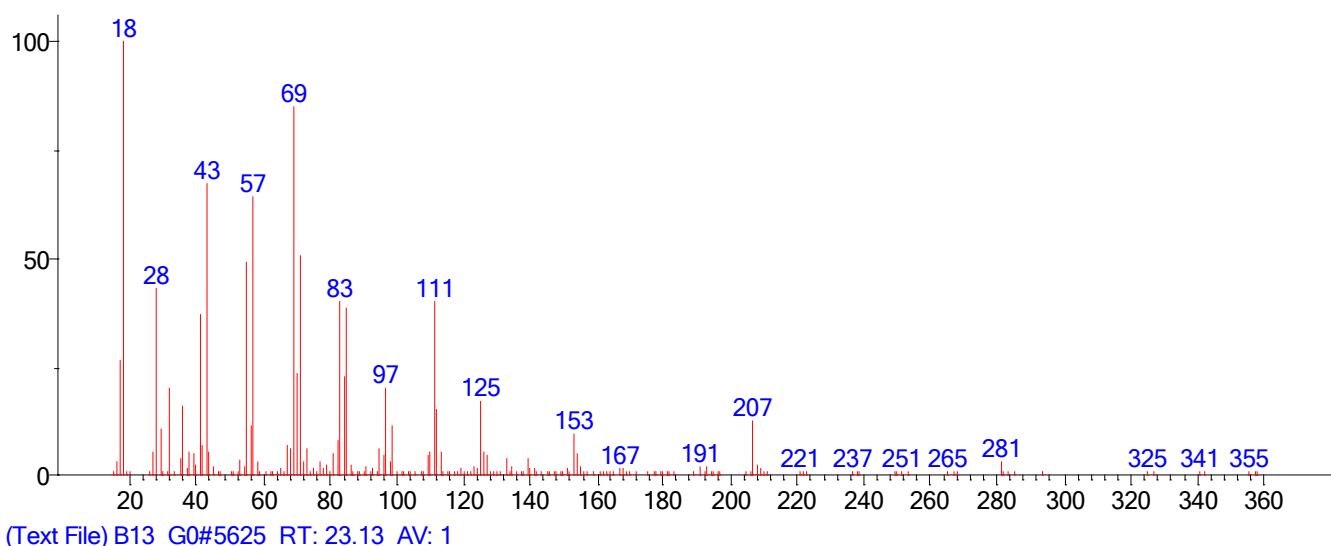
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 22.95



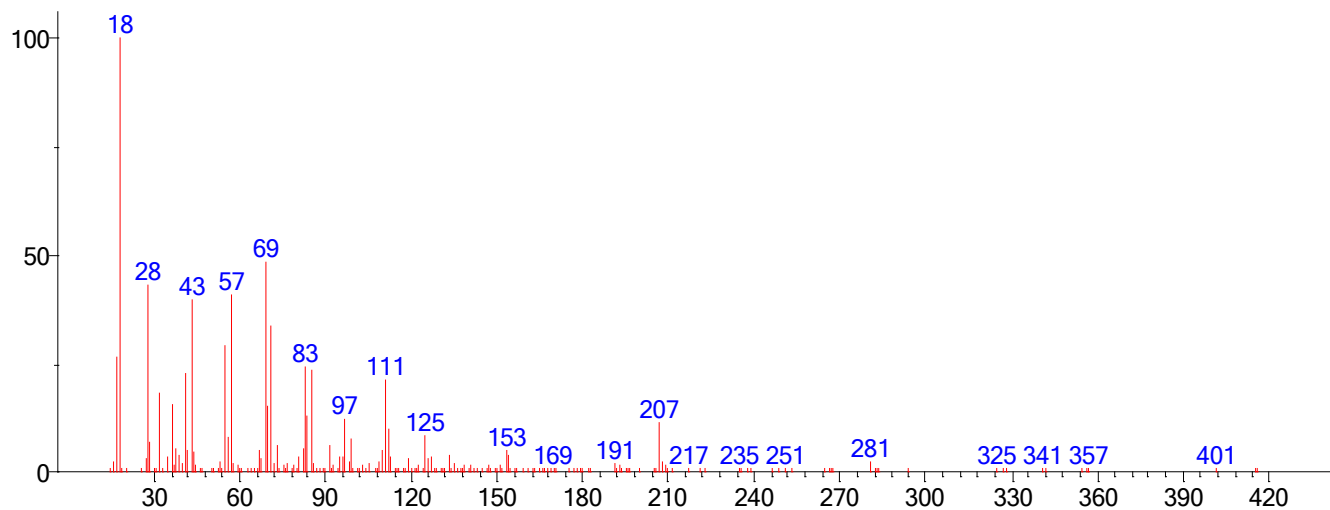
(Text File) B13\_G0#5574 RT: 22.95 AV: 1



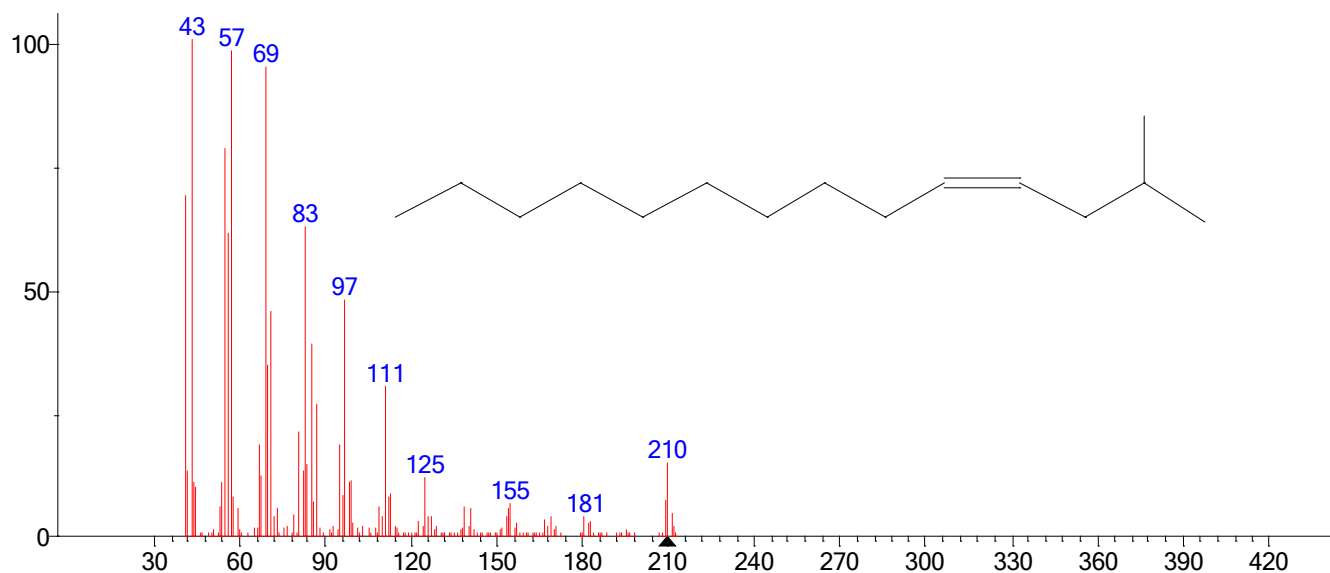
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 23.12



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 23.47

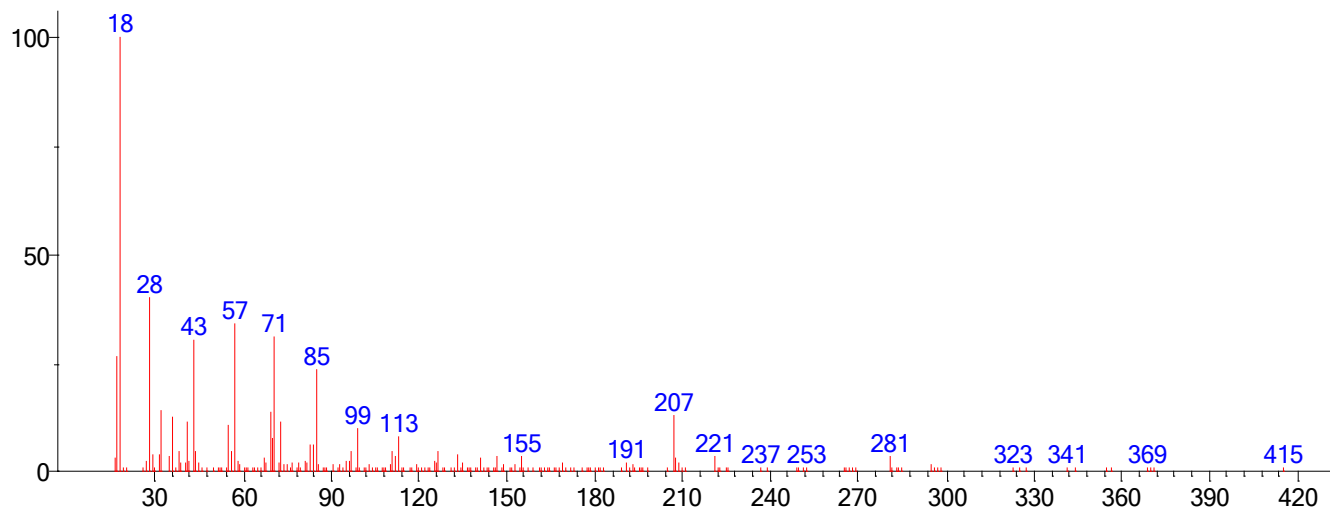


(Text File) B13\_G0#5725 RT: 23.47 AV: 1

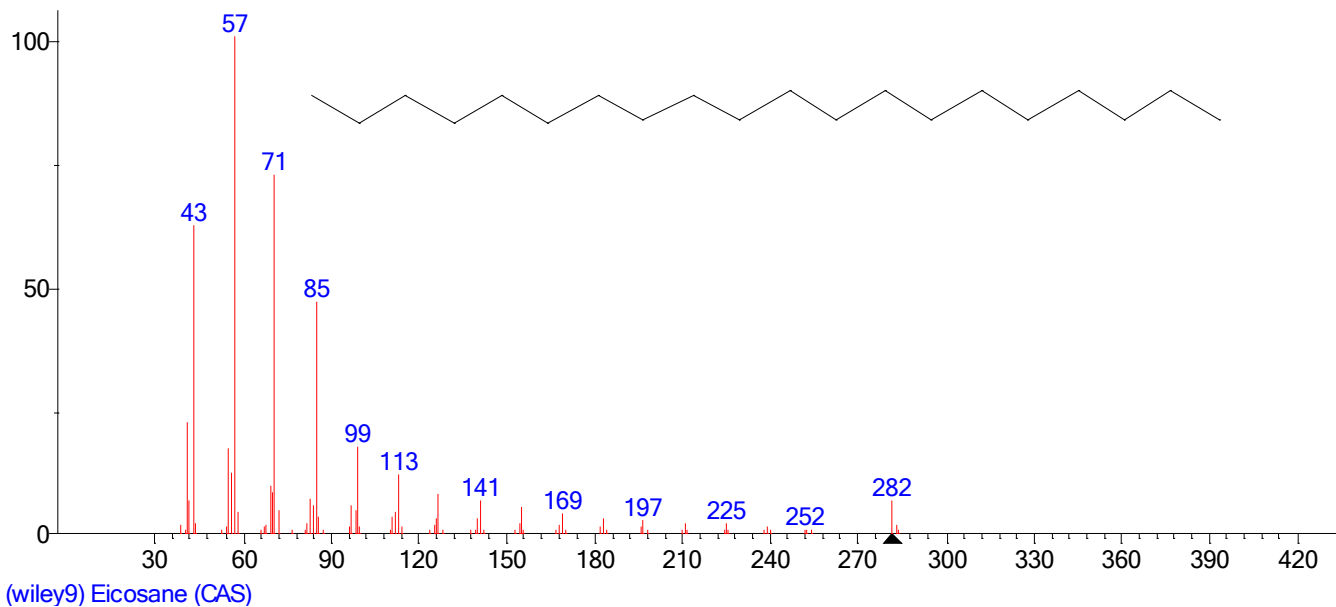


(mainlib) 2-Methyl-Z-4-tetradecene

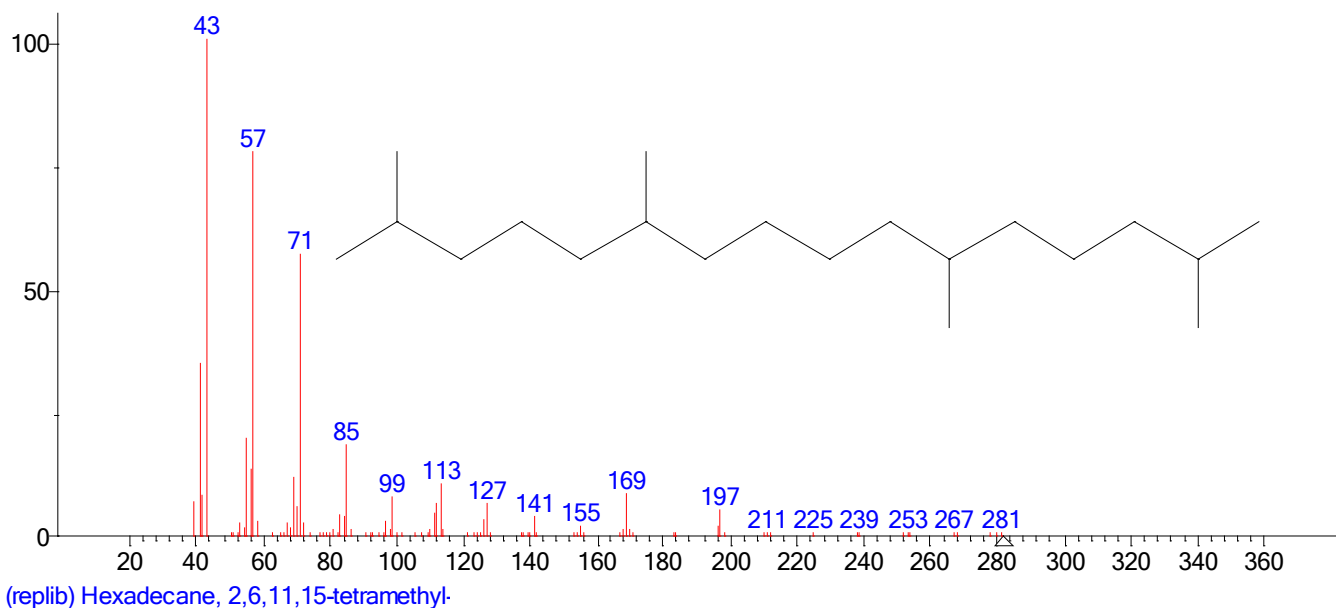
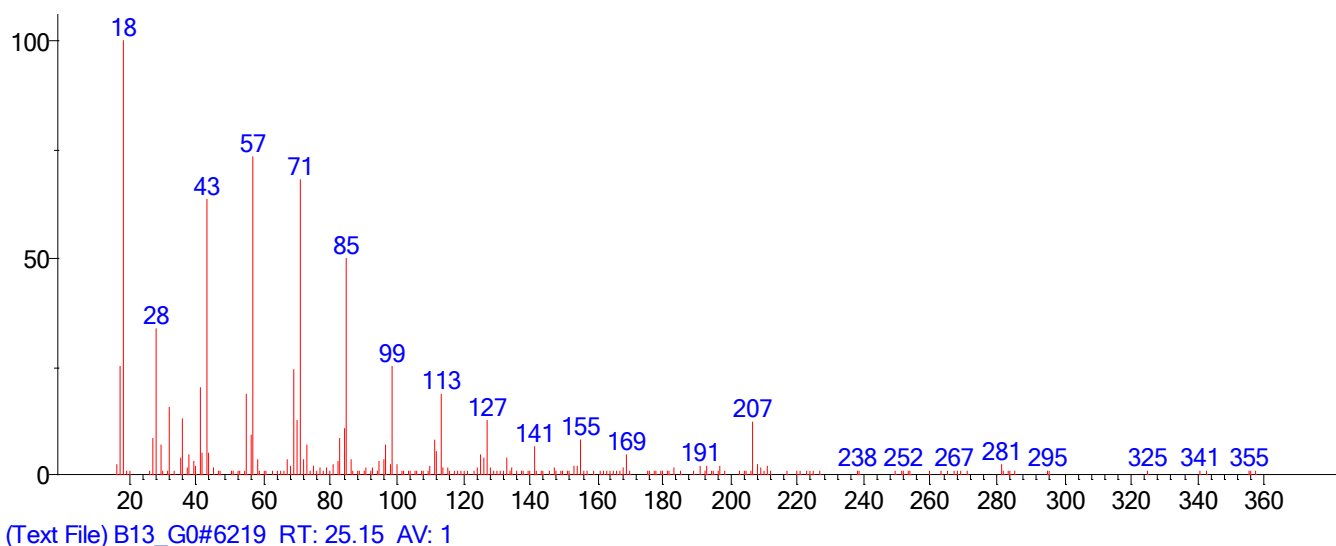
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 24.72



(Text File) B13\_G0#6091 RT: 24.71 AV: 1

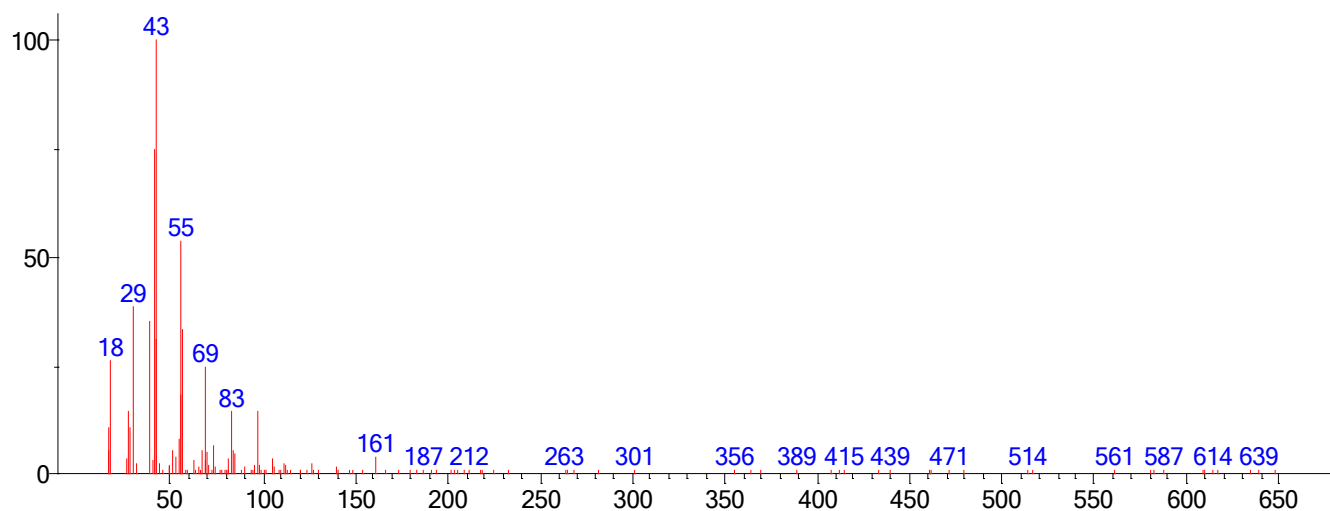


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.15

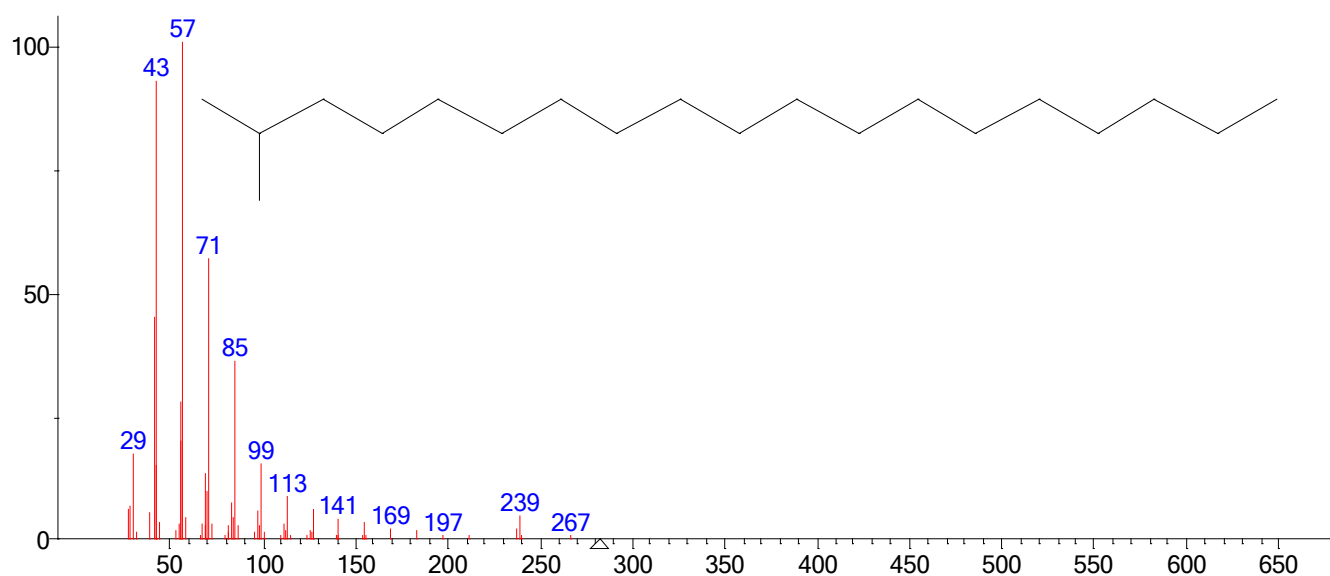


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.76



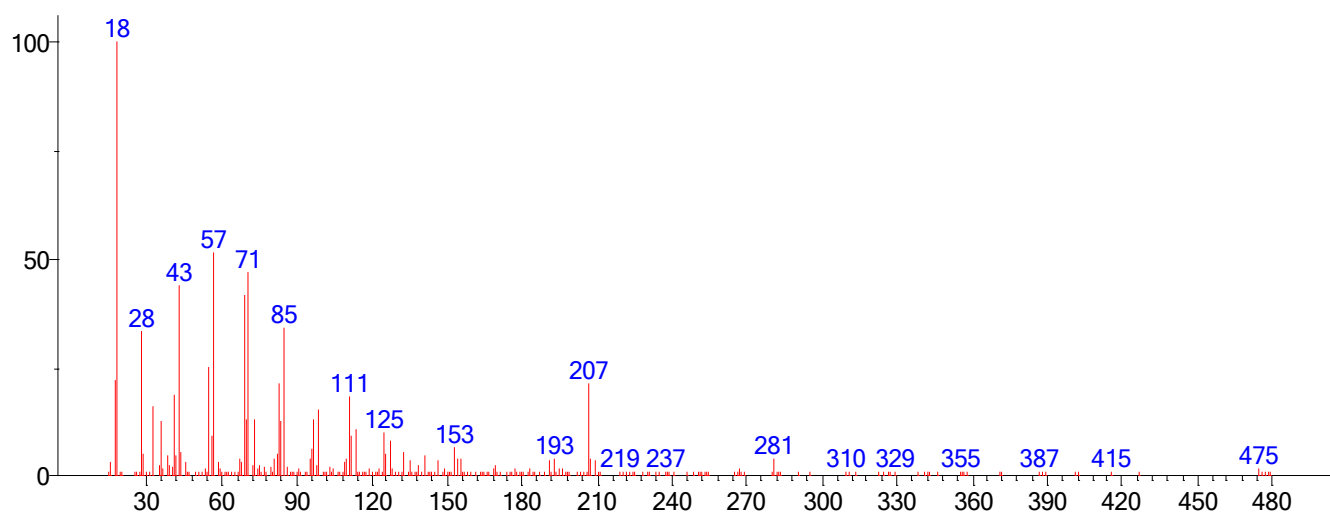


(Text File) B13\_G\_P#6386 RT: 25.71 AV: 1

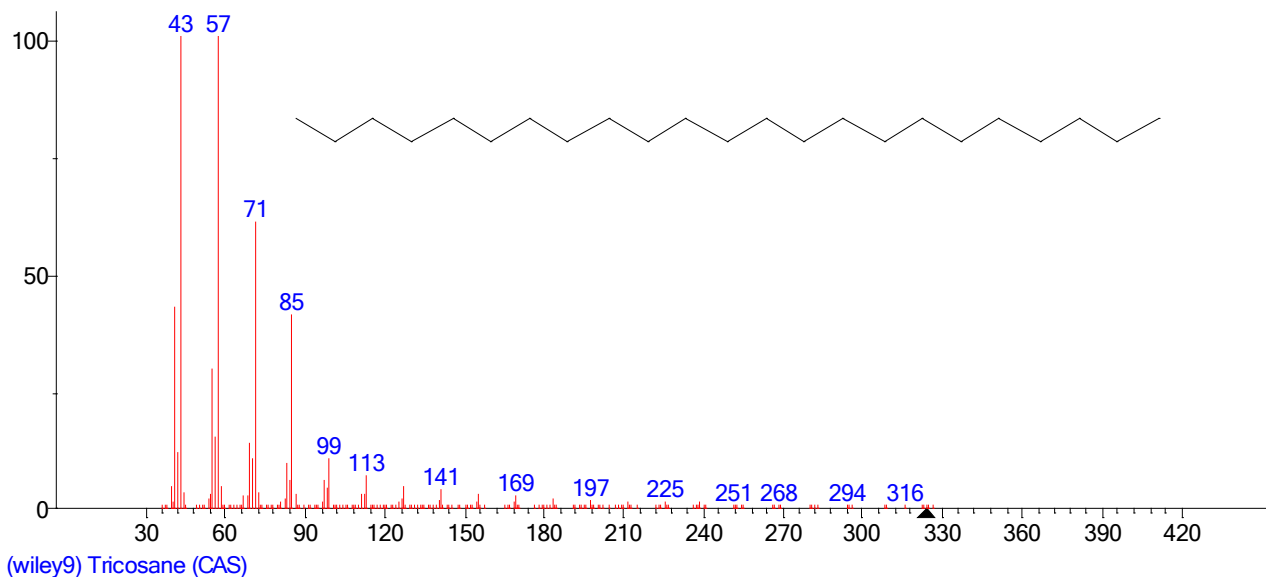


(mainlib) Nonadecane, 2-methyl-

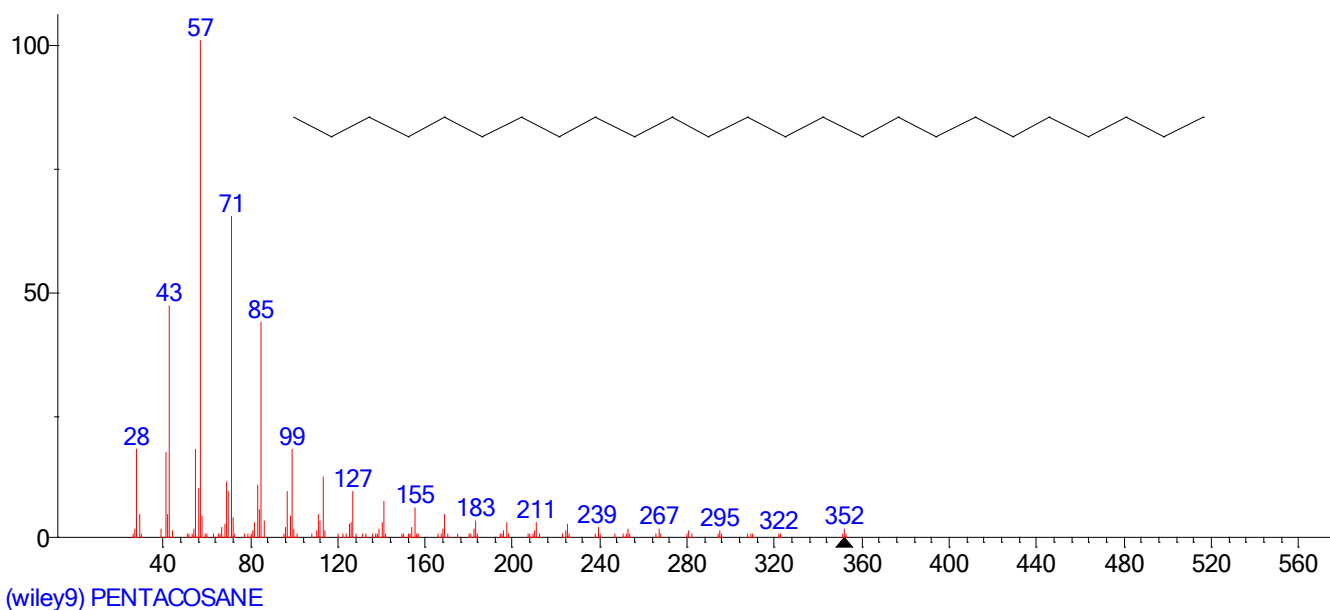
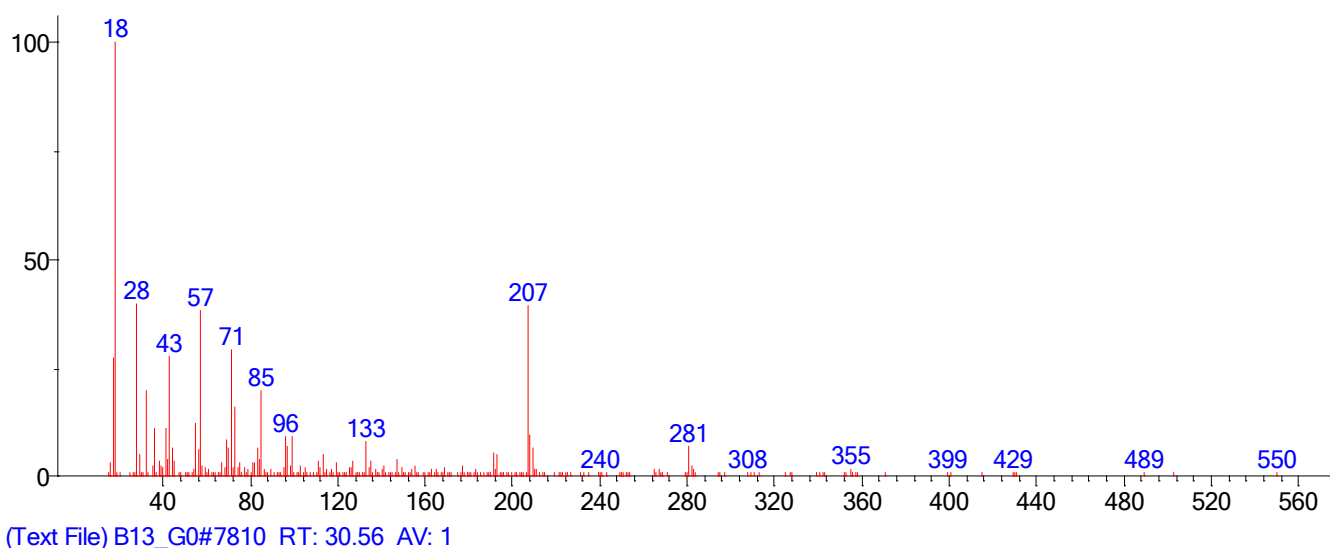
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 27.27



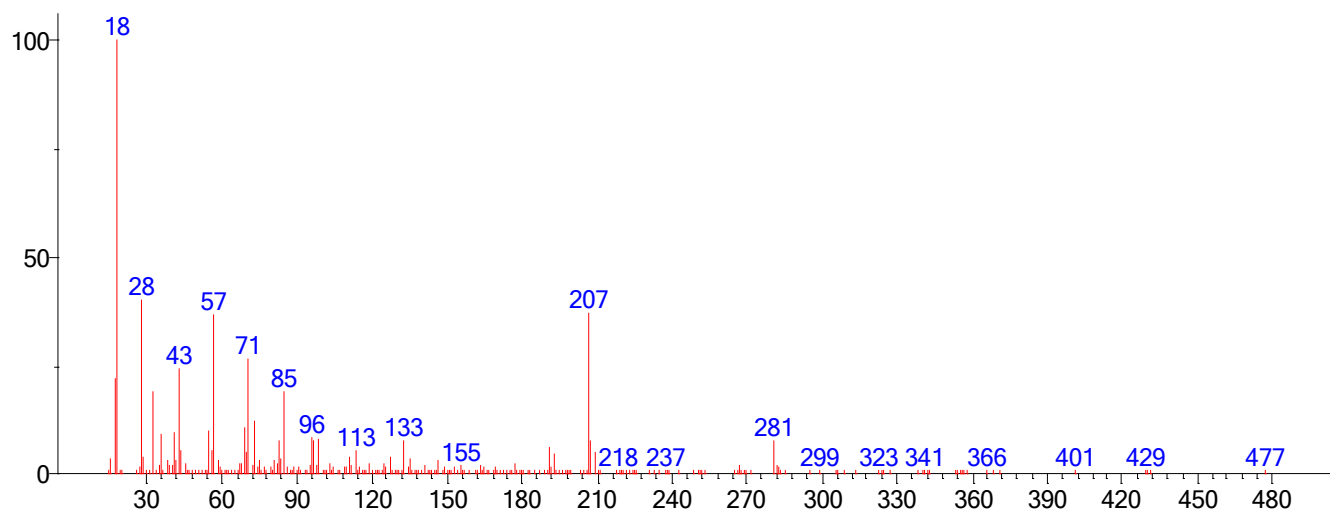
(Text File) B13\_G0#6843 RT: 27.27 AV: 1



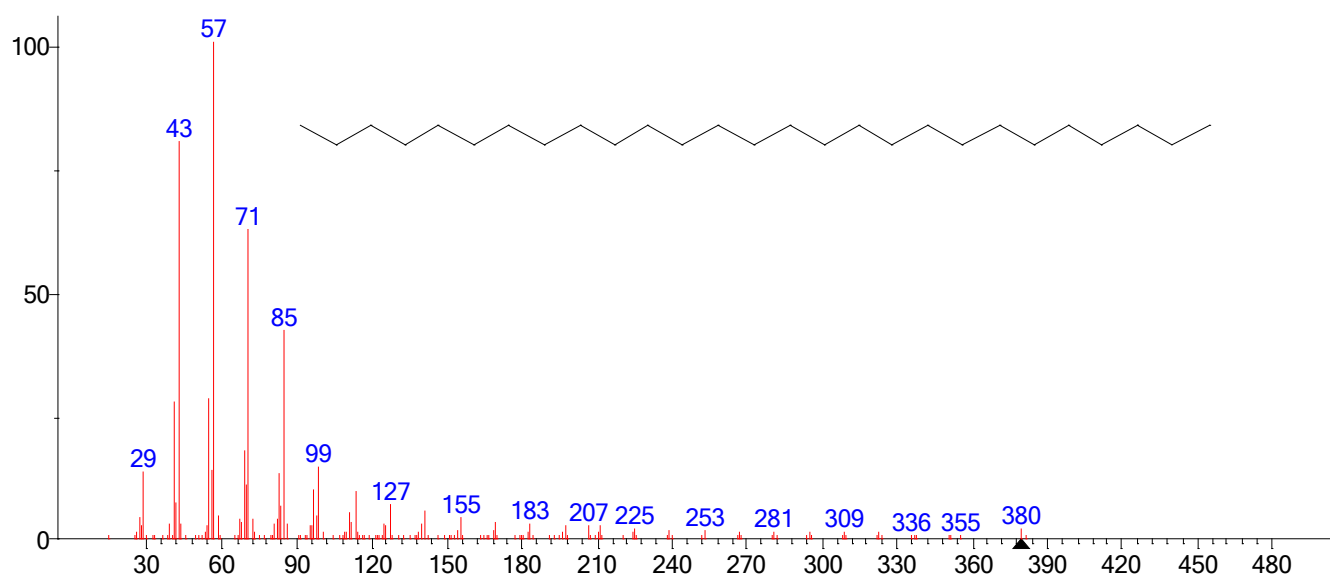
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 30.56



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 31.96



(Text File) B13\_G0#8221 RT: 31.96 AV: 1



(wiley9) Heptacosane (CAS)

### Выводы:

В образце Э-31-10/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- кислородсодержащие соединения (спирты);
- углеводороды (ароматические, парафины, олефины)
- трихлорацетат.