

ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ образца Э-31-11/2020

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, °C [50 °C, 5 мин, 10 °C/мин, 280 °C]
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, °C [250 °C, 1 мин; 10 °C/мин, 280 °C]
МСД: Температура, °C [250 °C, 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.

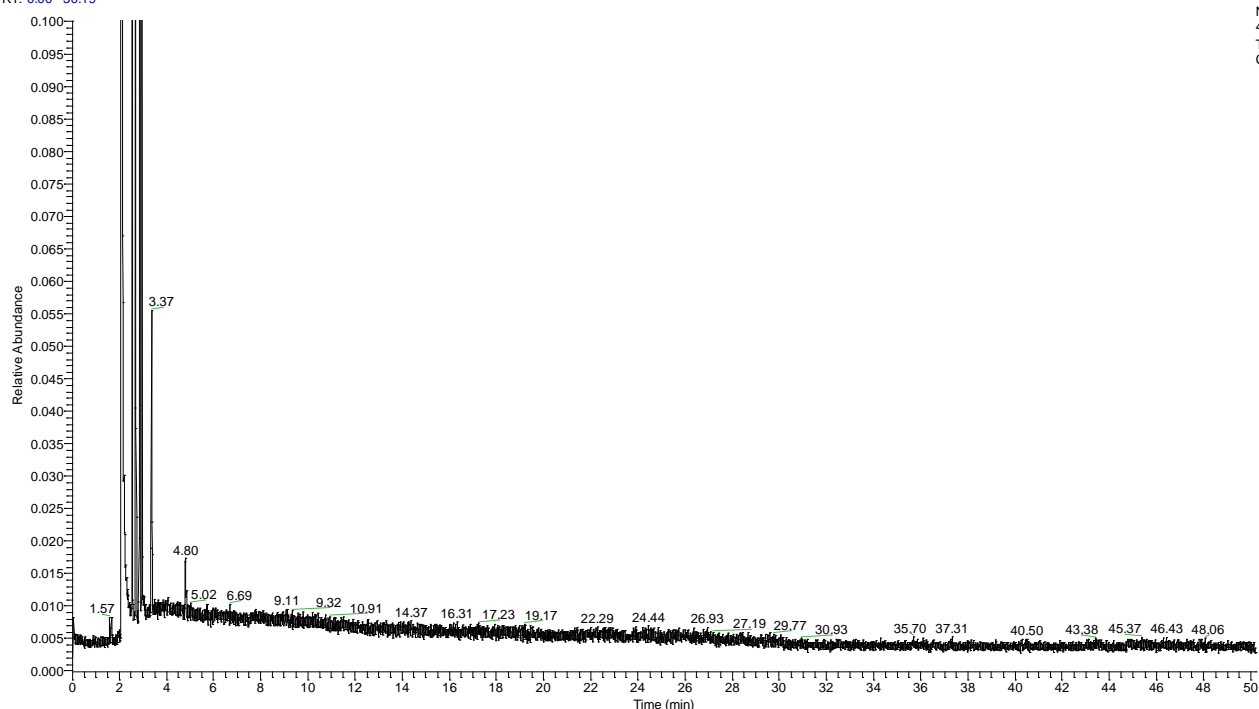
Время экстракции: 1 сутки.

Объем закола: 1 мкл.

Задержка МС-детектирования: 5 мин.

Хроматограмма экстрагента:

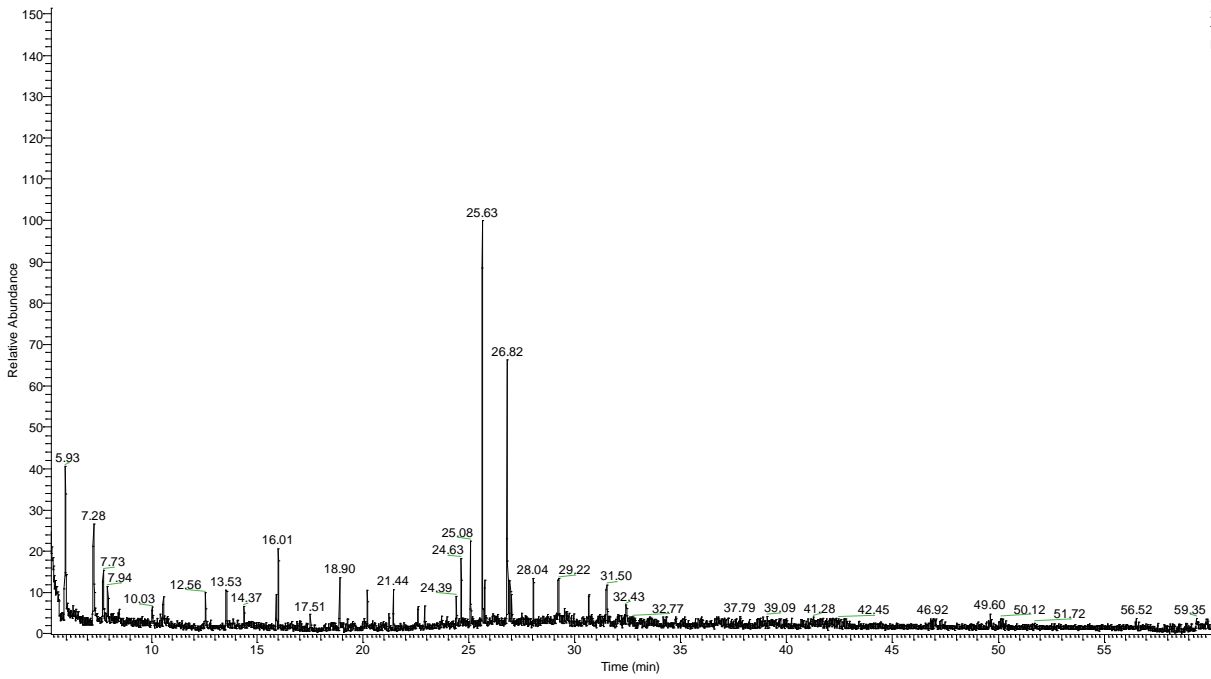
RT: 0.00 - 50.19



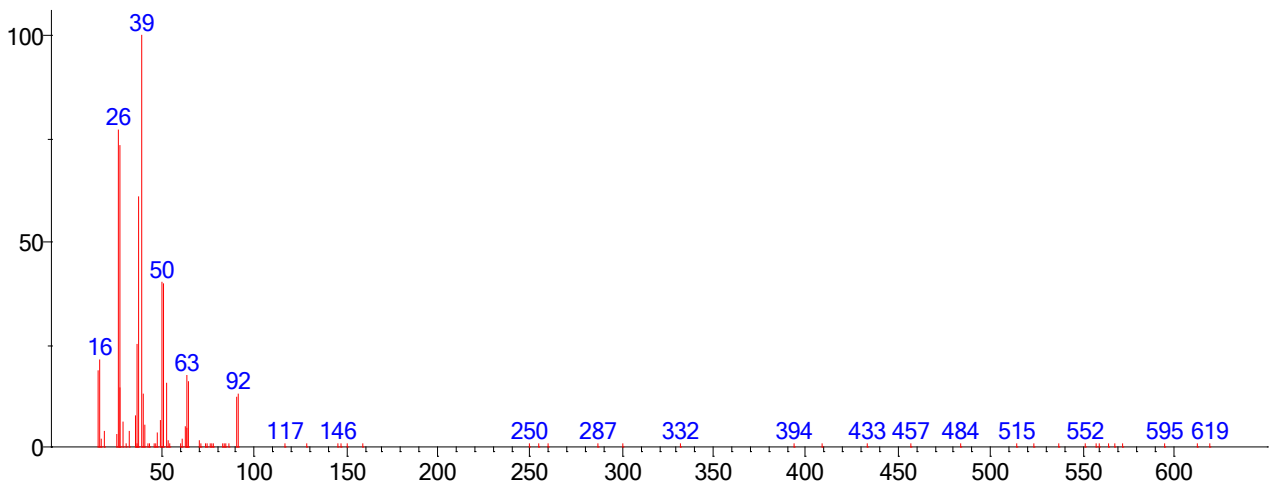
Общая хроматограмма образца:

RT: 5.26 - 59.99

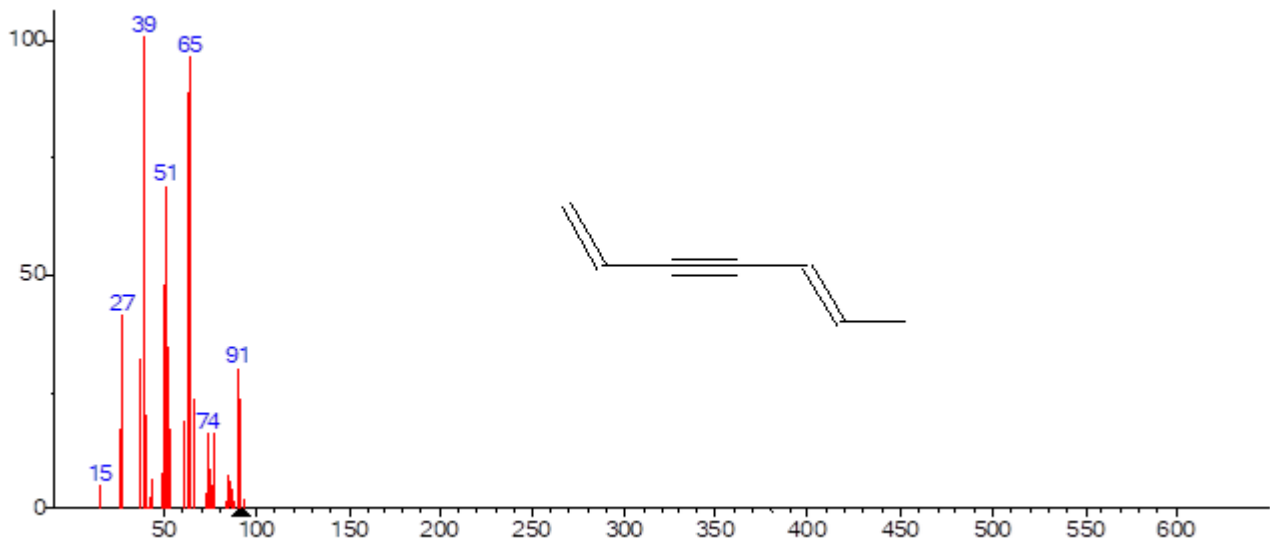
NL:
2.61E6
TIC MS
B14_2



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.28

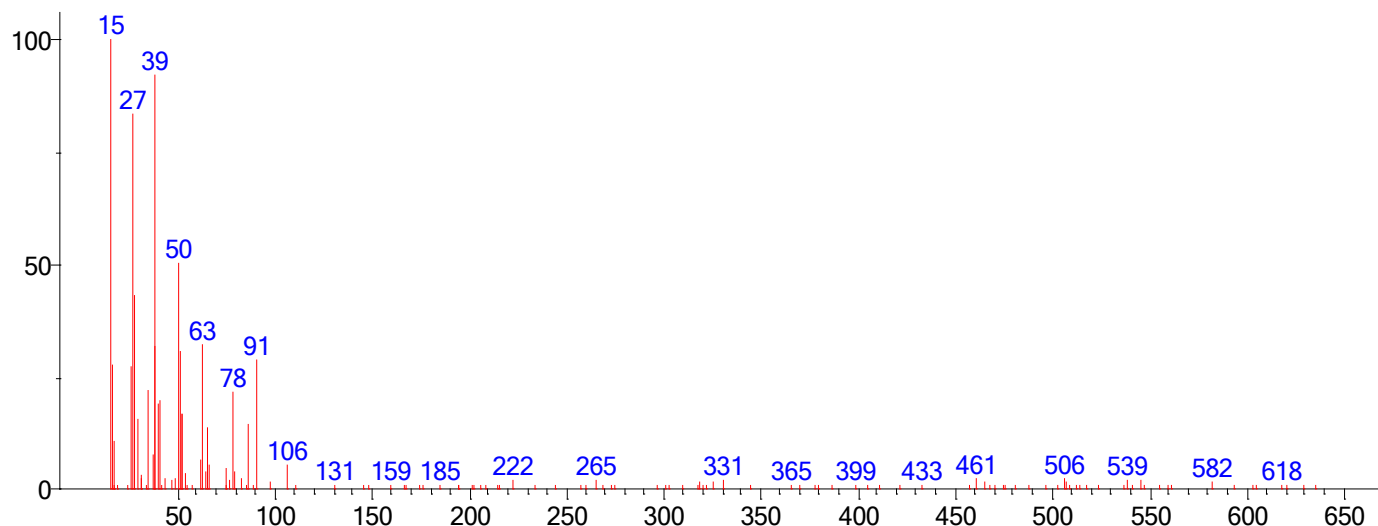


(Text File) B14_2#667 RT: 7.27 AV: 1

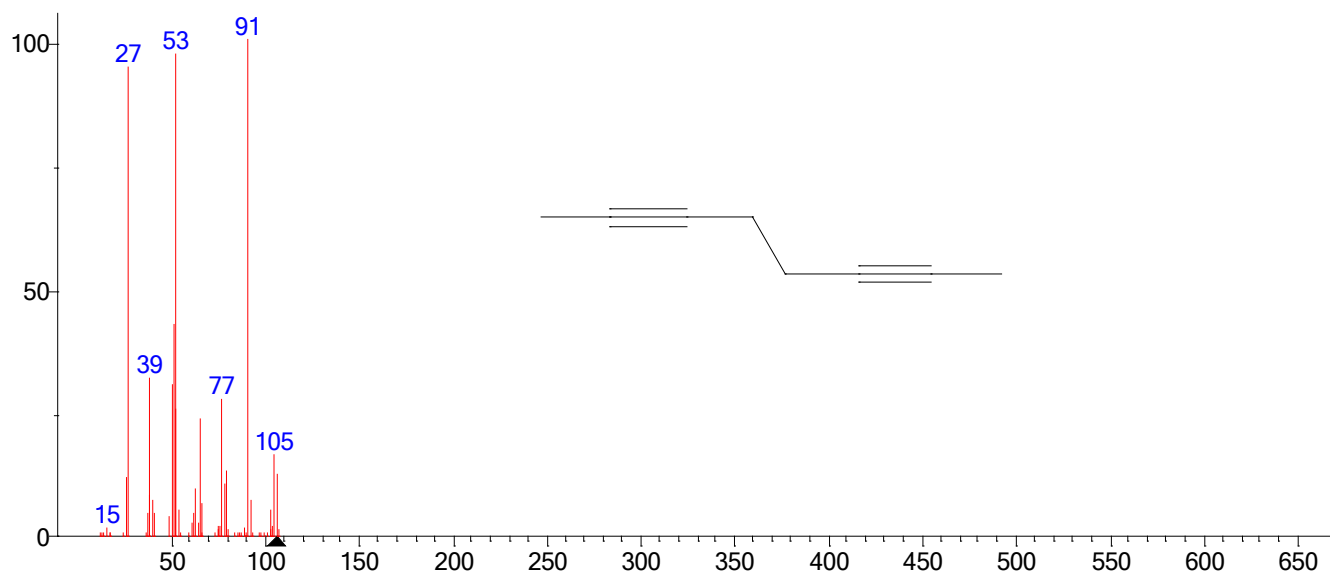


(replib) 1,5-Heptadien-3-yne

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.57

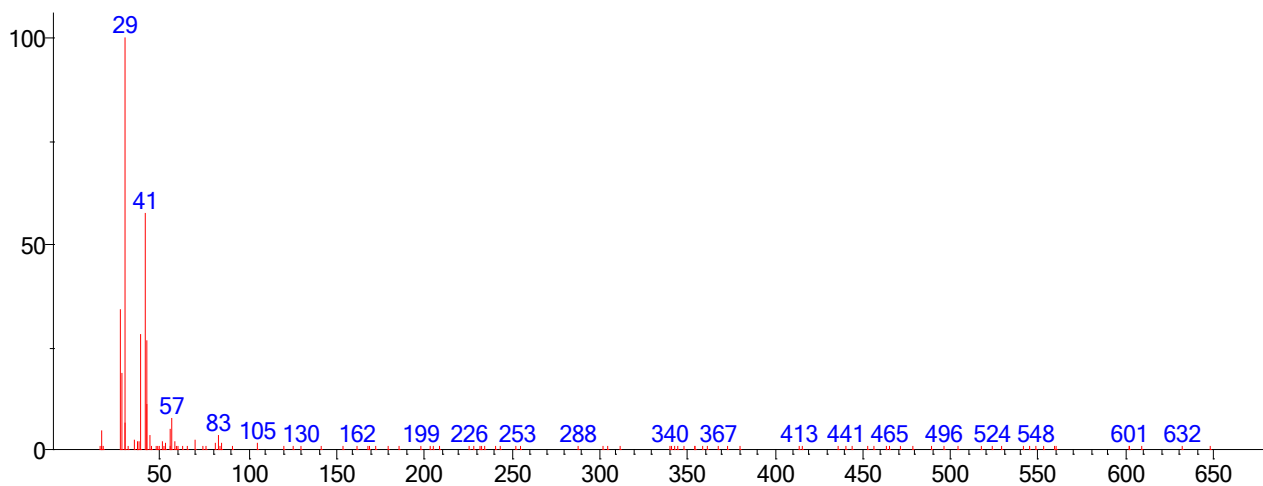


(Text File) B14_2#1637 RT: 10.56 AV: 1

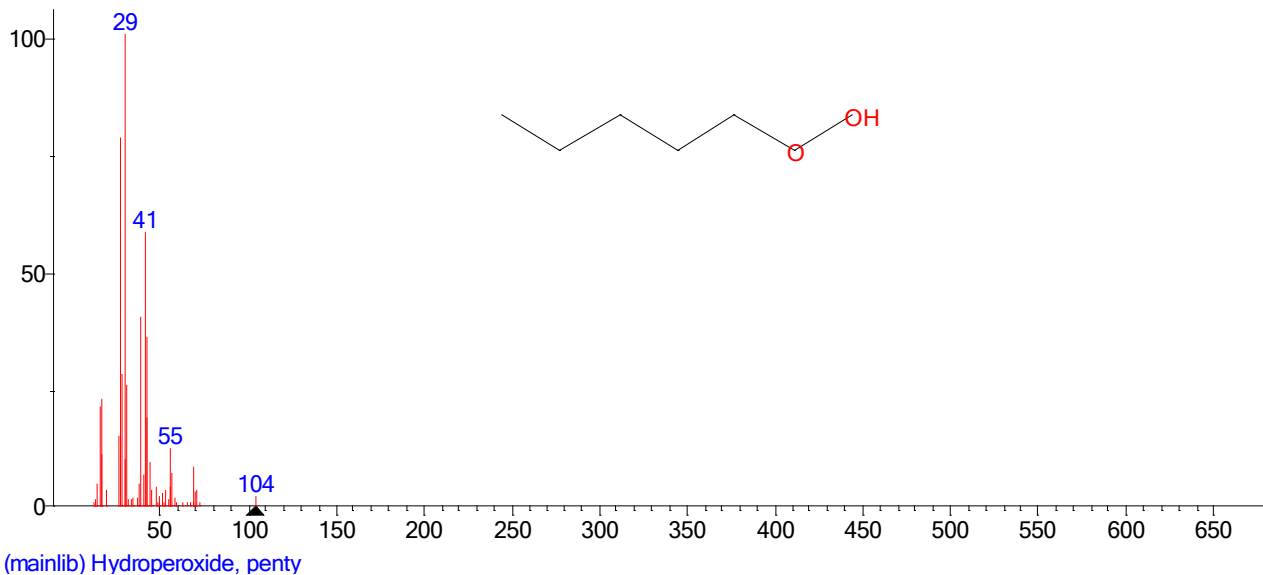


(mainlib) 2,6-Octadiyne

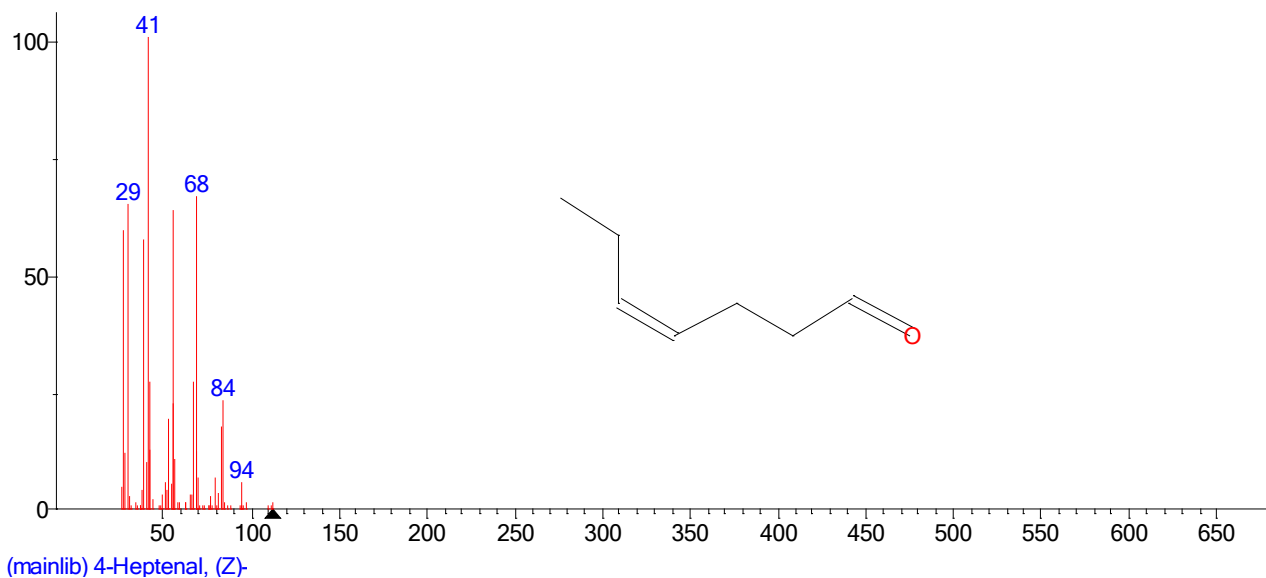
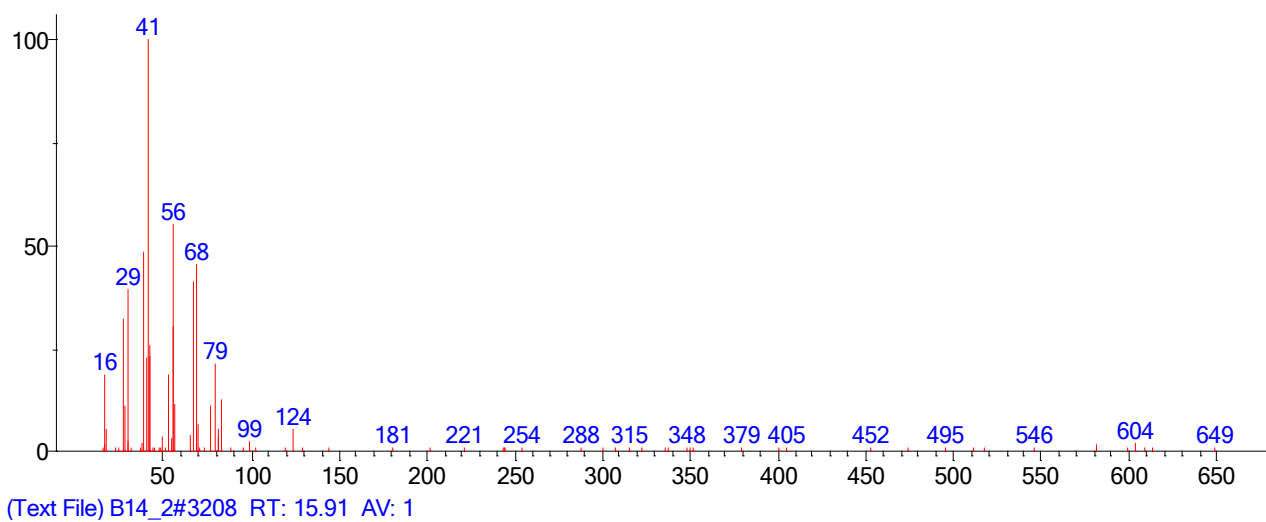
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 12.56



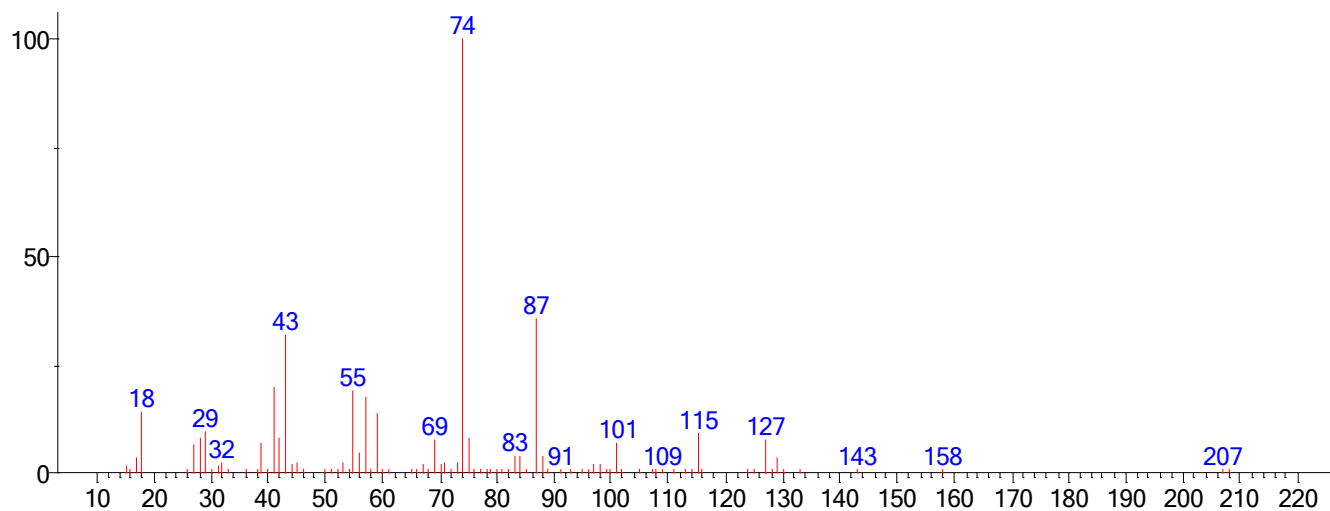
(Text File) B14_2#2221 RT: 12.55 AV: 1



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 15.91



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 16.01

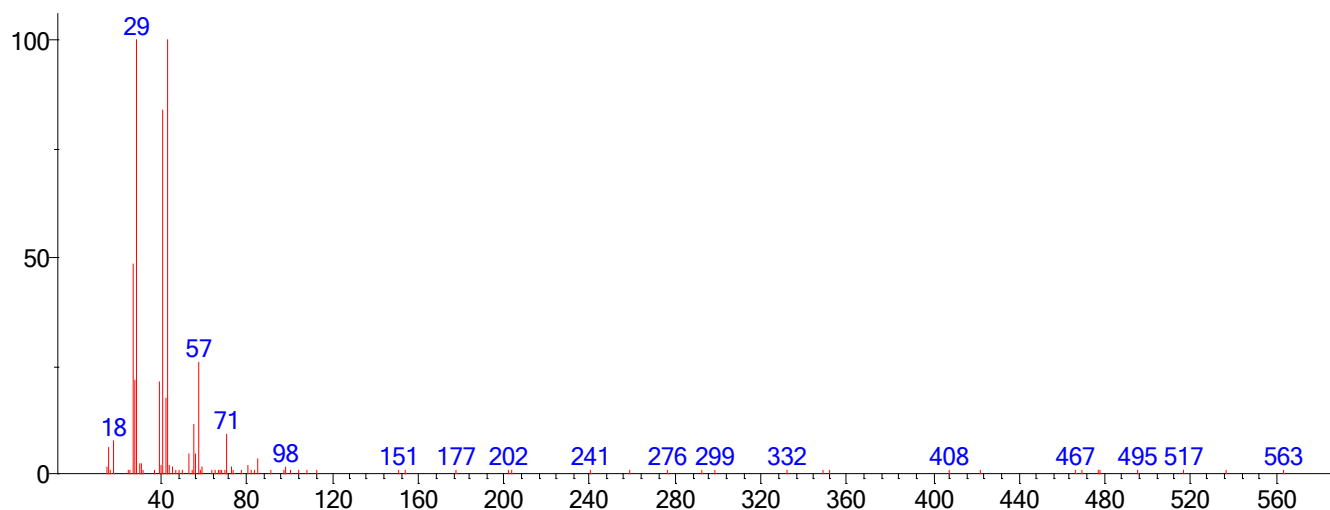


(Text File) B15_G#3170 RT: 14.78 AV: 1

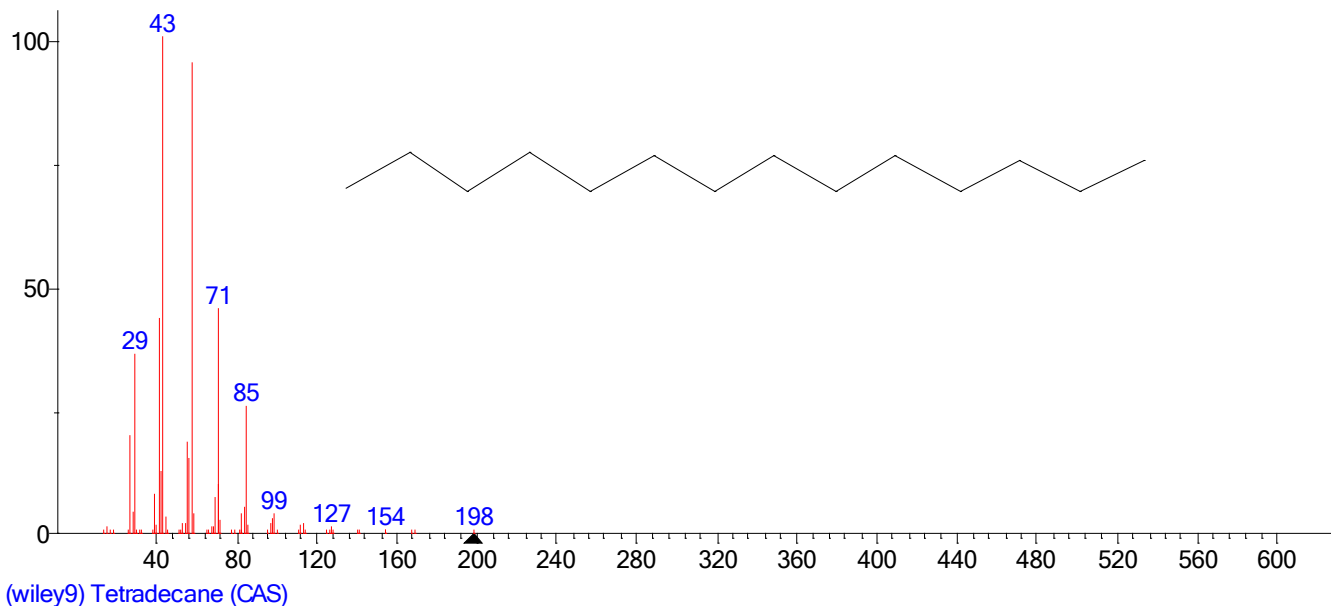


(mainlib) 2,4,6-Trimethyl-1-nonene

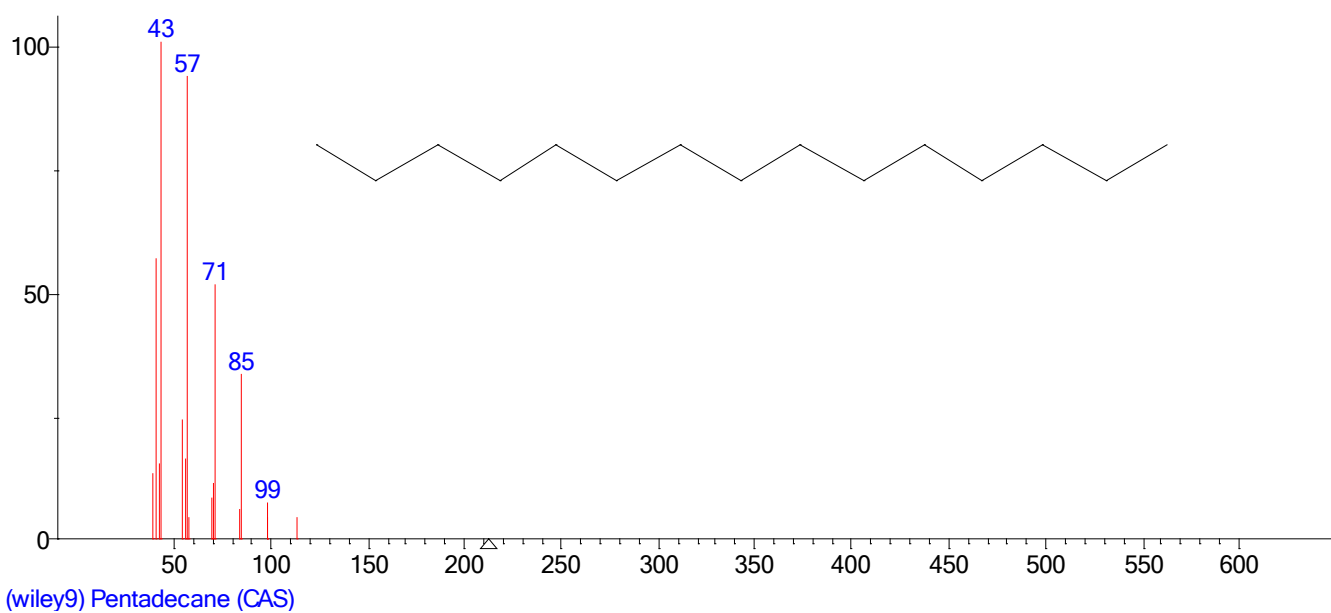
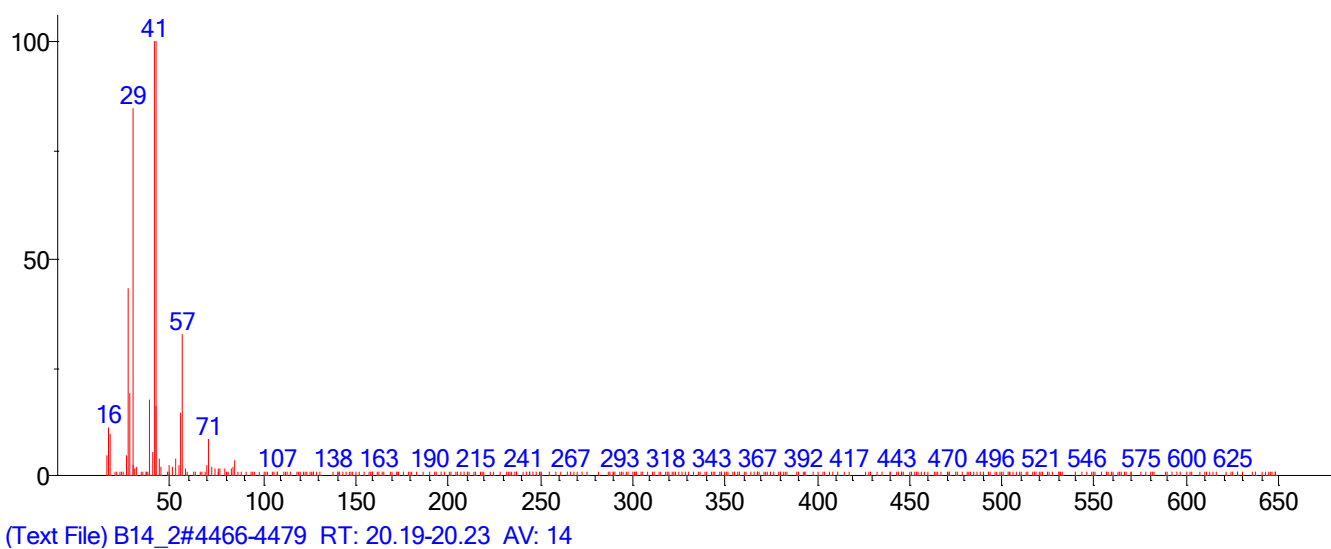
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.90



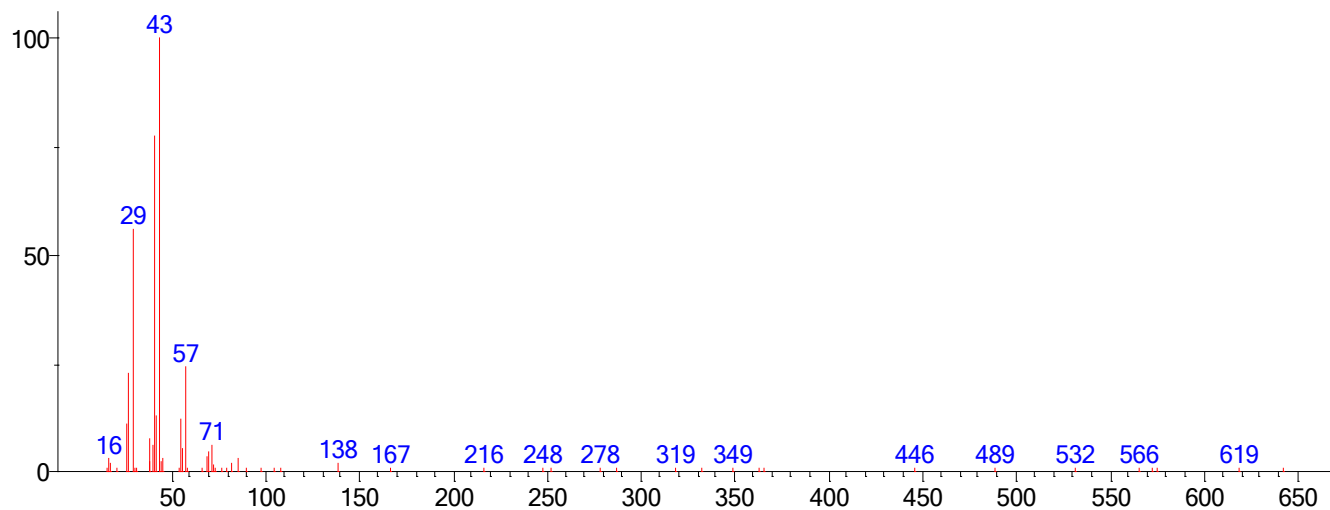
(Text File) B14_2#4082-4092 RT: 18.88-18.91 AV: 11



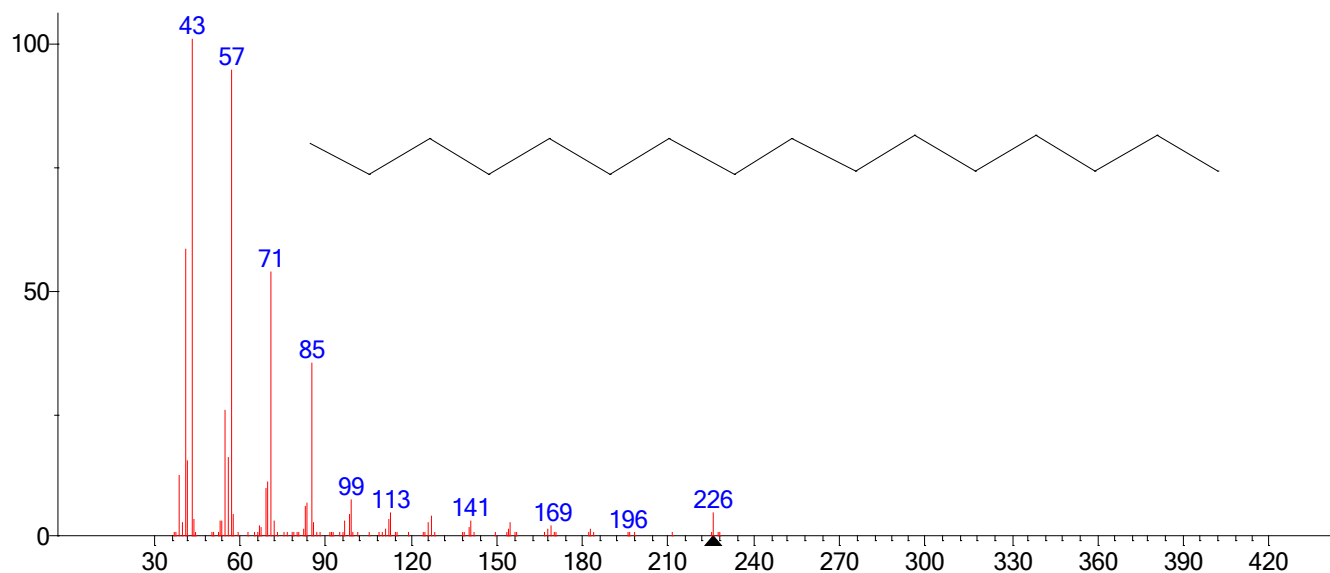
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 20.21



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 21.44

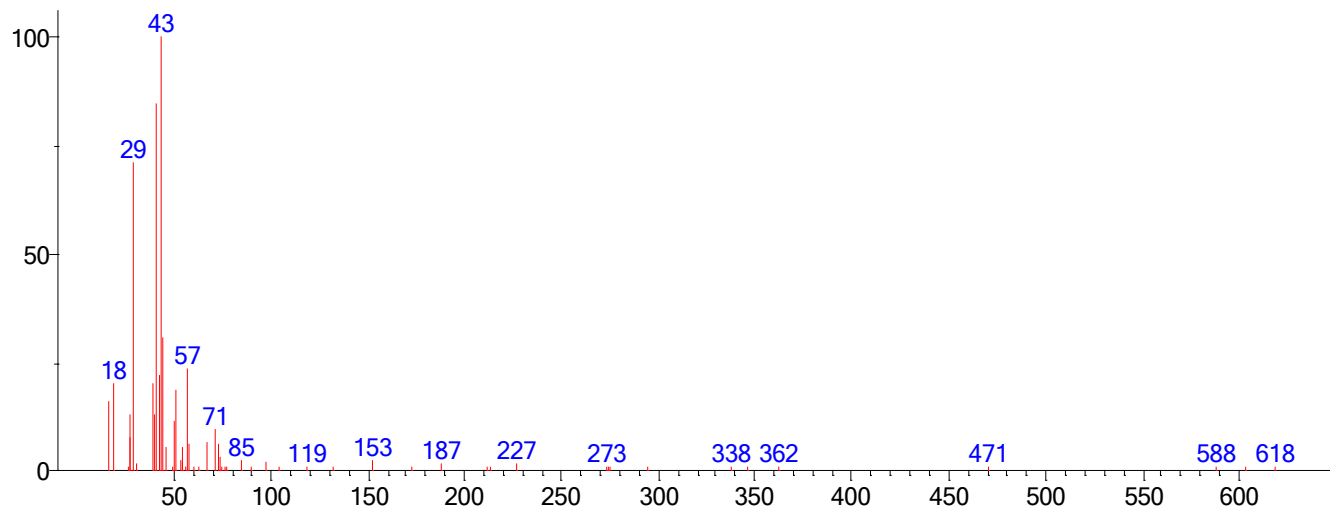


(Text File) B14_2#4832 RT: 21.43 AV: 1

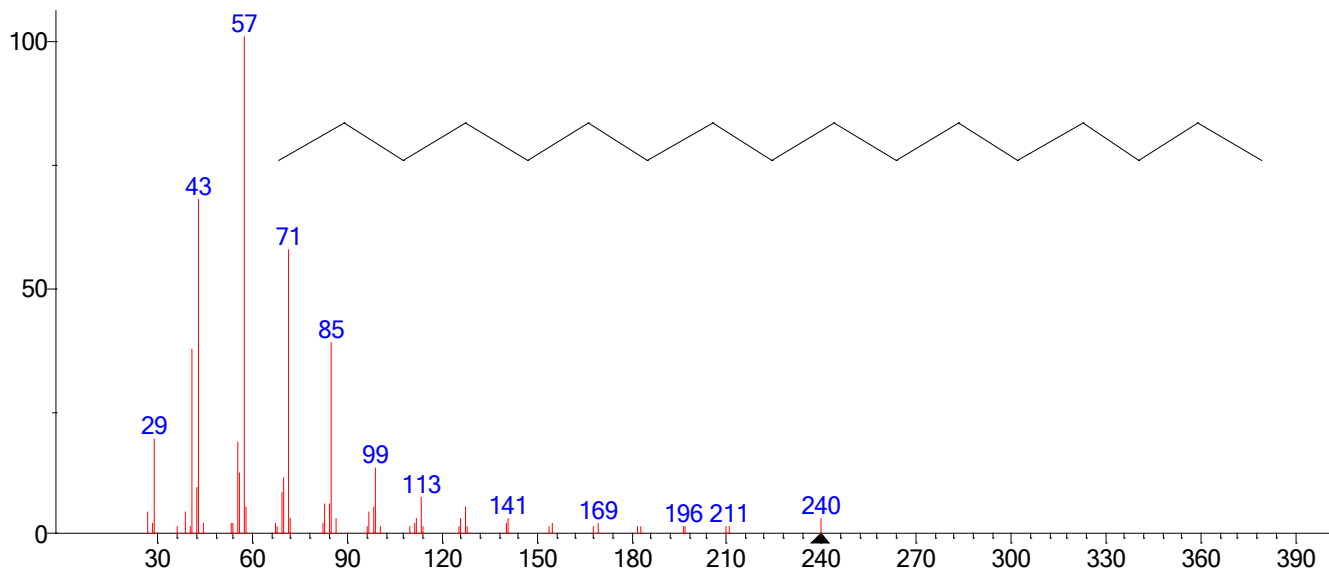


(wiley9) Hexadecane (CAS)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 22.60

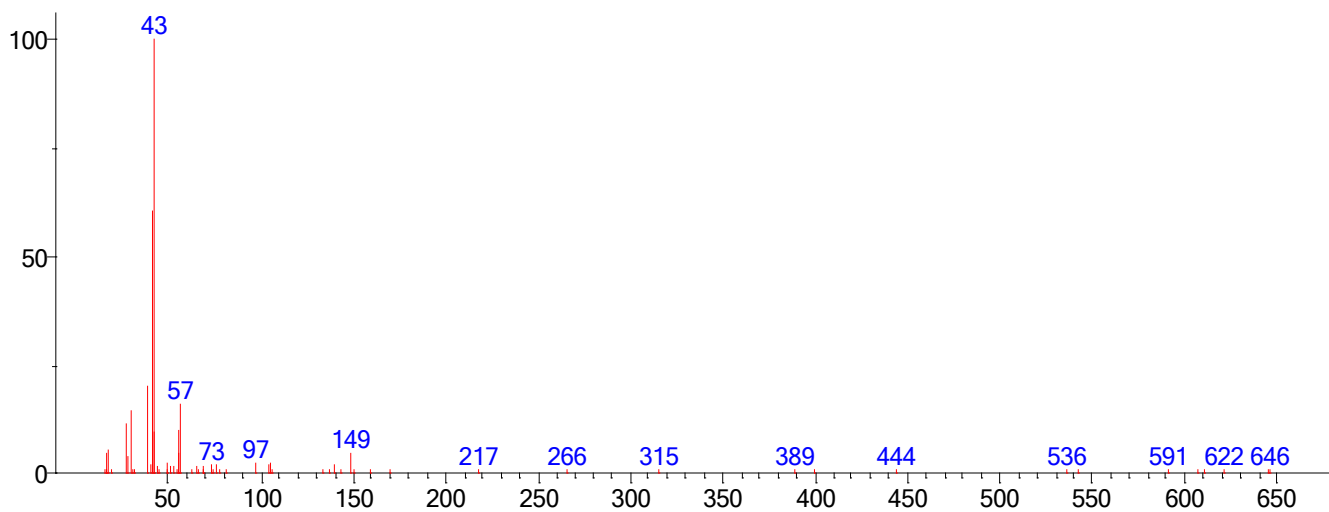


(Text File) B14_2#5175 RT: 22.60 AV: 1

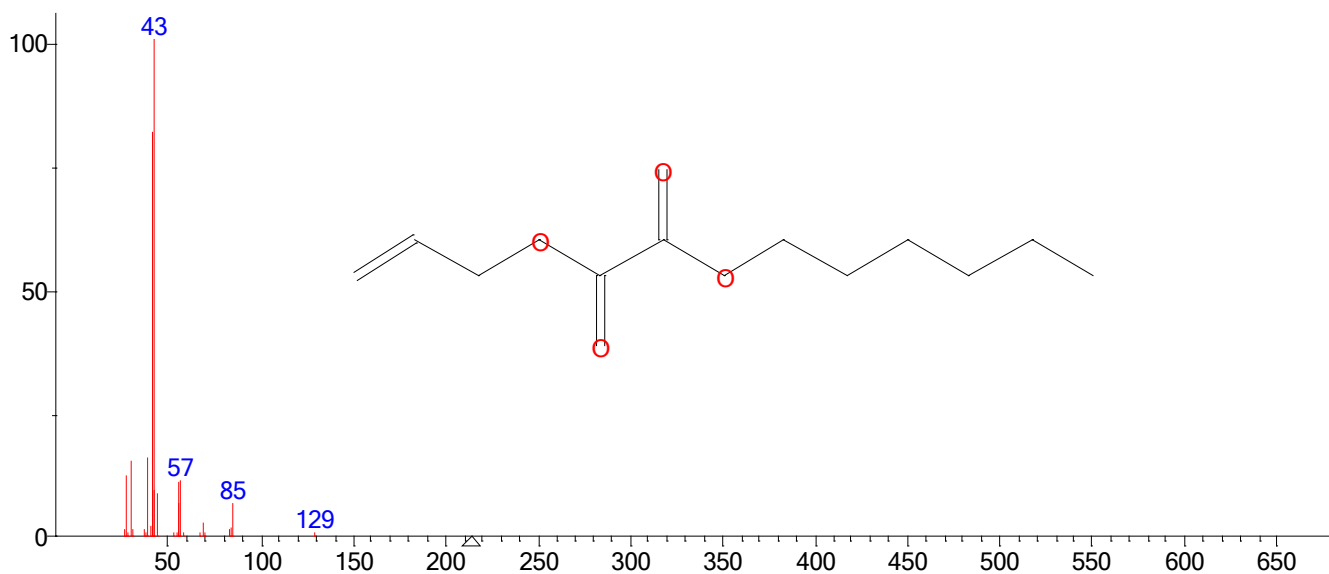


(replib) Heptadecane

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 24.63

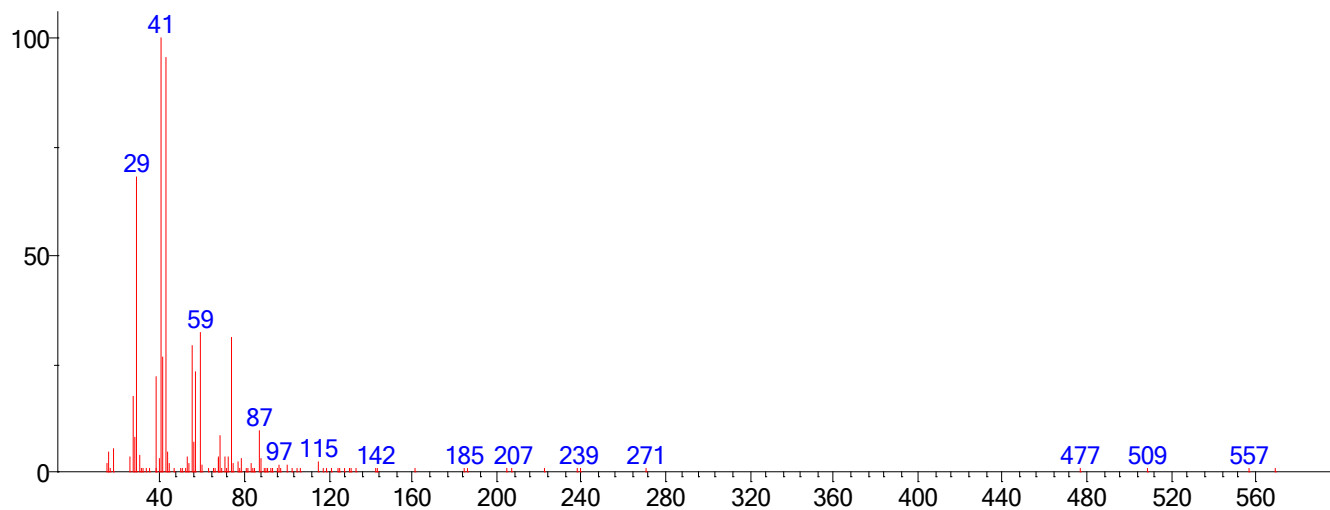


(Text File) B14_2#5772 RT: 24.63 AV: 1

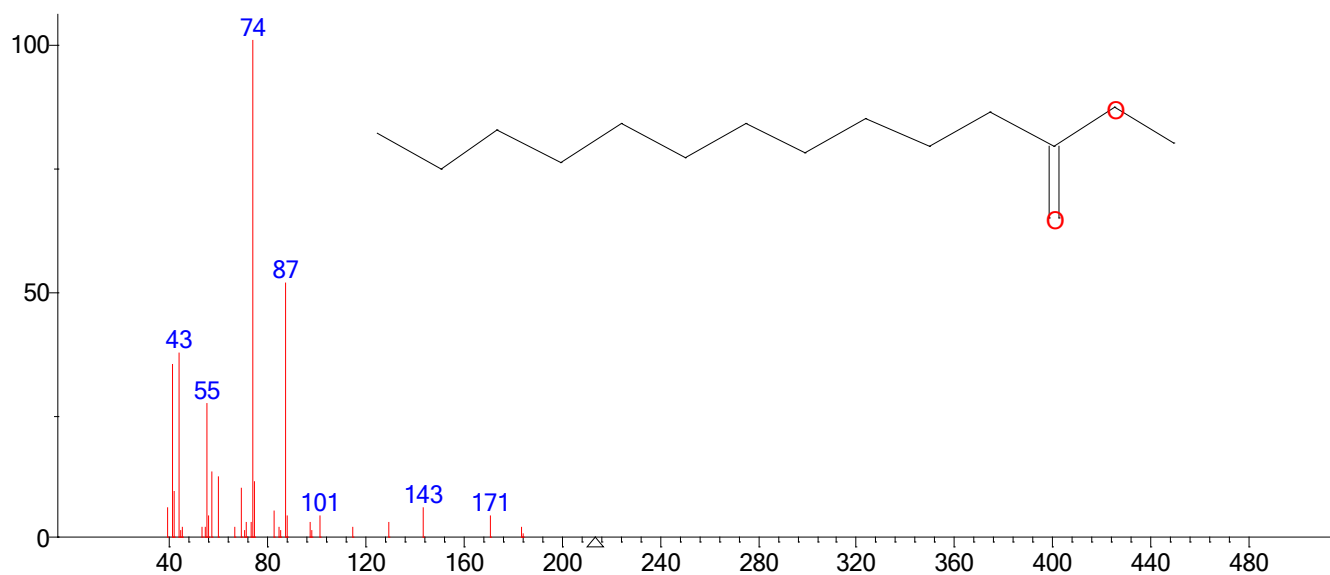


(mainlib) Oxalic acid, allyl hexyl este

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.08

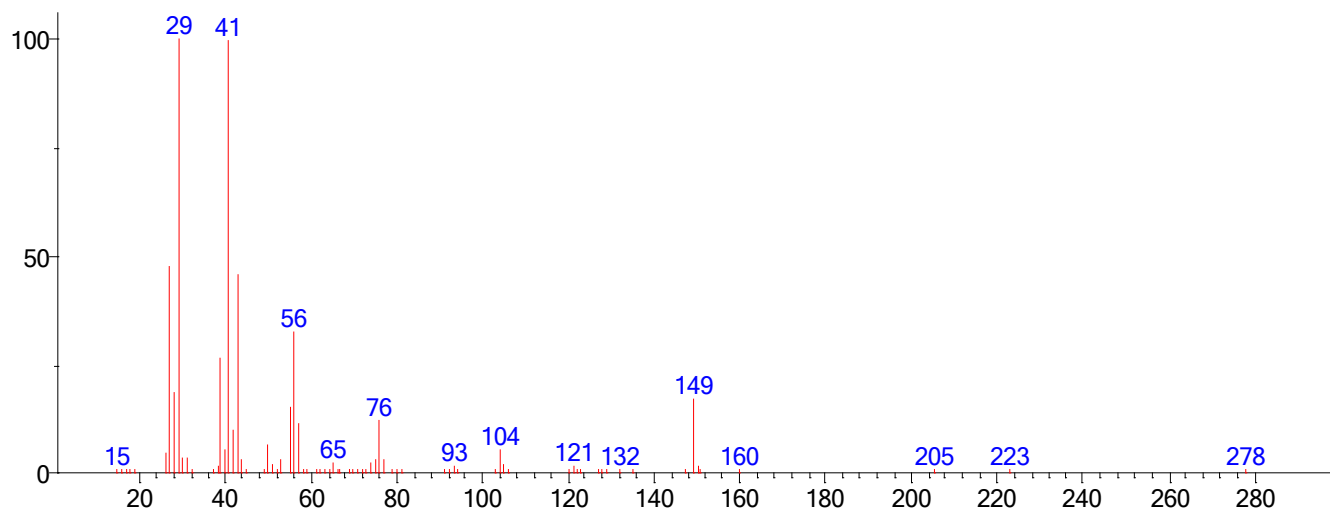


(Text File) B14_2#5898-5907 RT: 25.06-25.09 AV: 10

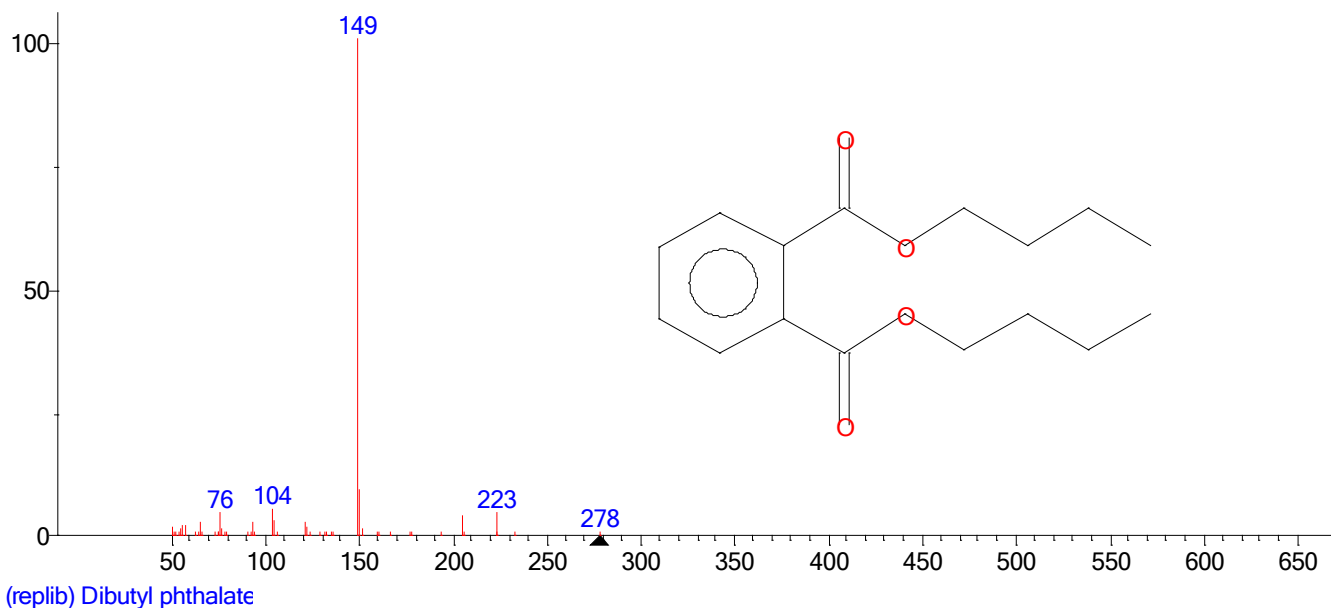


(wiley9) Dodecanoic acid, methyl ester (CAS)

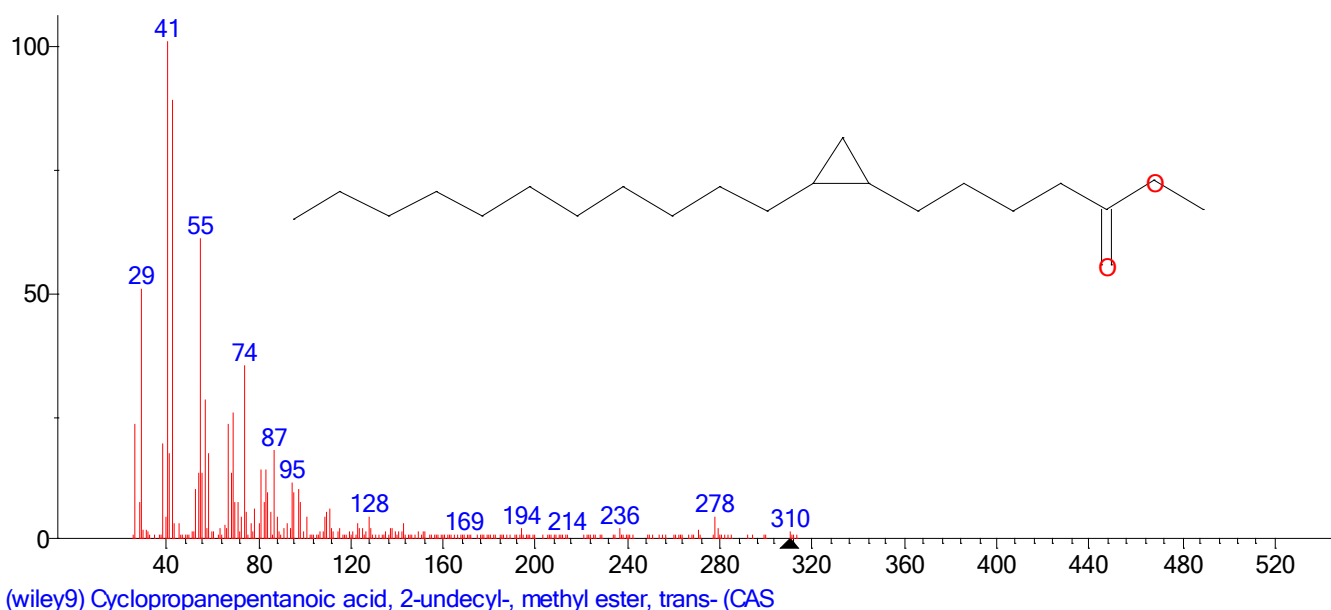
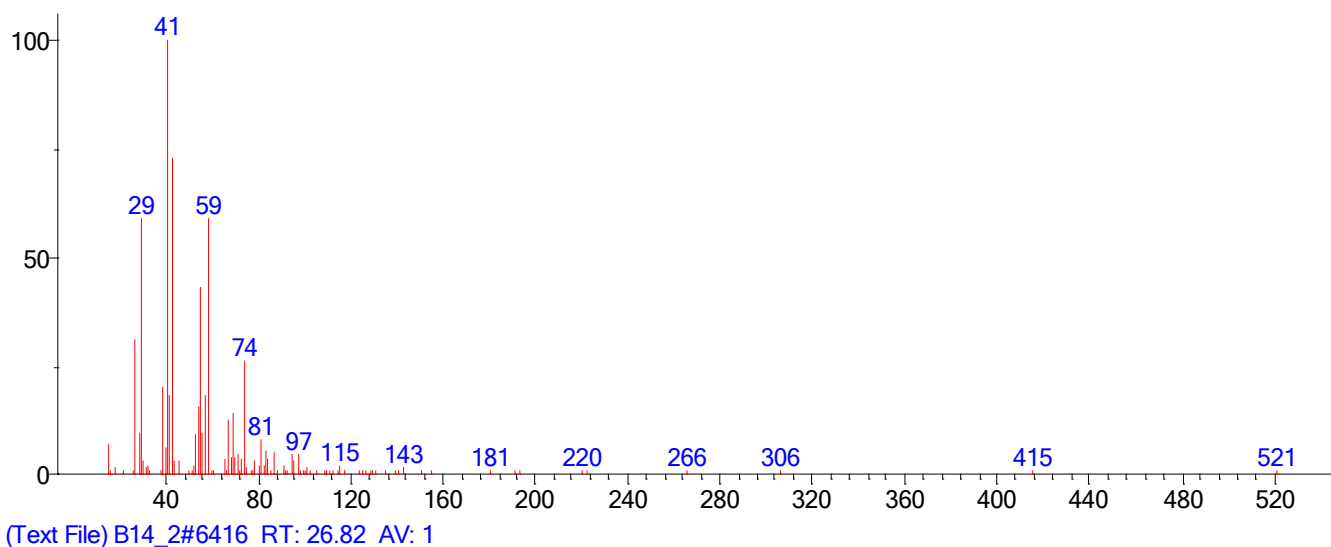
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.63



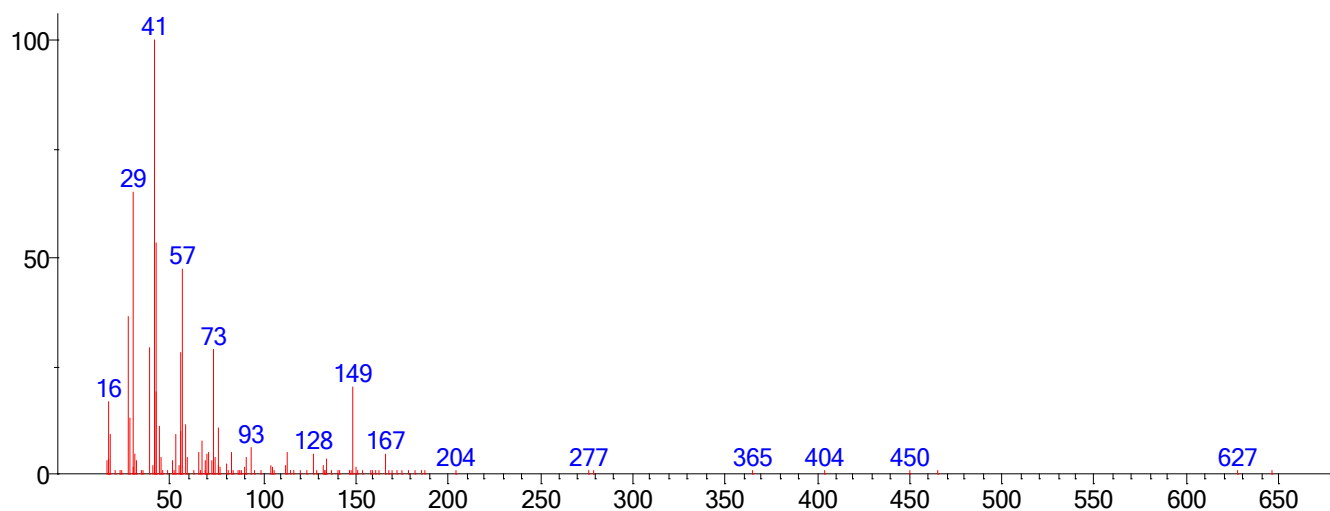
(Text File) B14_2#6063-6069 RT: 25.62-25.64 AV: 7



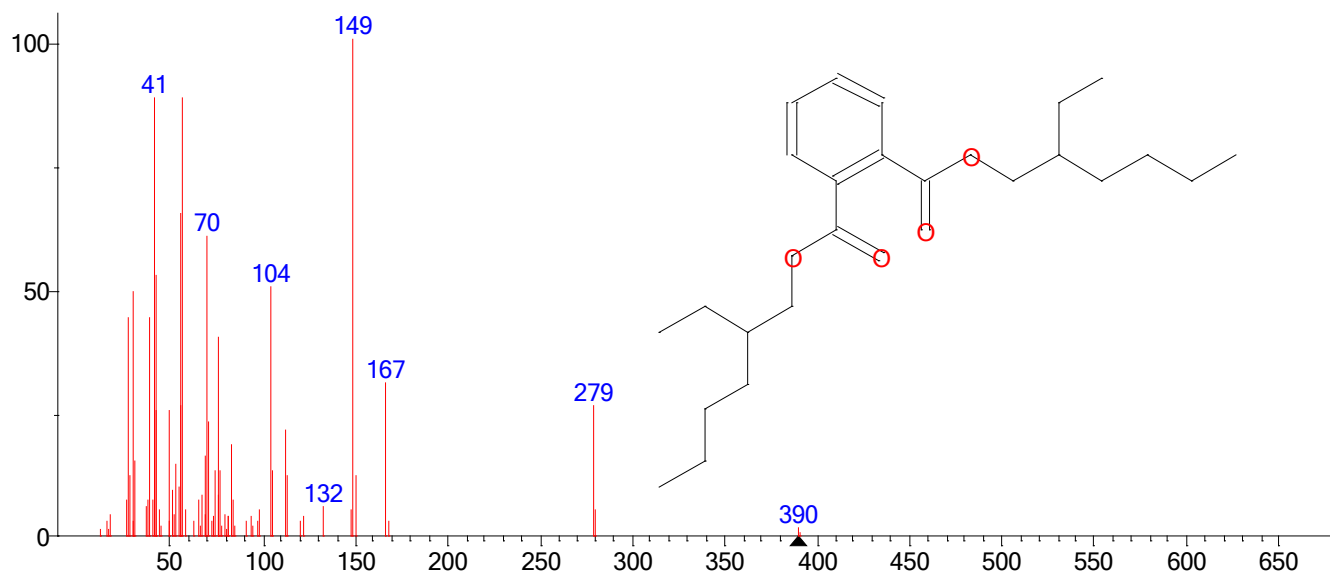
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 26.82



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 31.50



(Text File) B14_2#7792 RT: 31.50 AV: 1



(wiley9) 1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester (CAS

Выводы:

В образце Э-31-11/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- кислородсодержащие соединения (альдегид, гидропероксид, диэфир);
- углеводороды (парафины, олефины);
- метиловые эфиры жирных кислот;
- фталаты.