

## ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ образца Э-31-19/2020

### 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).

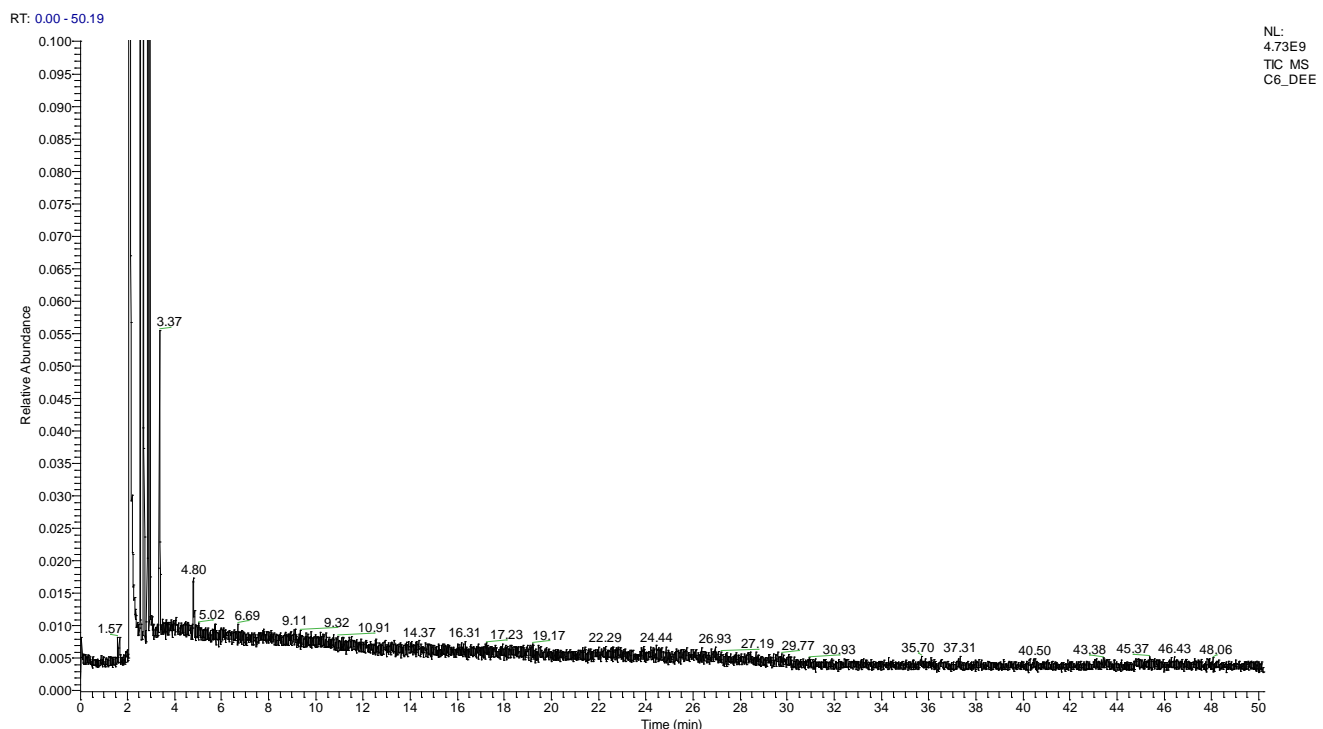
**Режим анализа:** Время анализа [60 мин]  
**Термостат:** Температура, °C [50 °C, 5 мин, 10 °C/мин, 280 °C]  
**Колонка:** Газ-носитель (Гелий) [0.9 мл/мин, 0 мин]  
 Сброс потока [0 мл/мин, 1 мин; 30 мл/мин] Деление потока [0]  
**Испаритель:** Температура, °C [250 °C, 1 мин; 10 °C/мин, 280 °C]  
**МСД:**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

**Detector Gain:** 1,00X10<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.

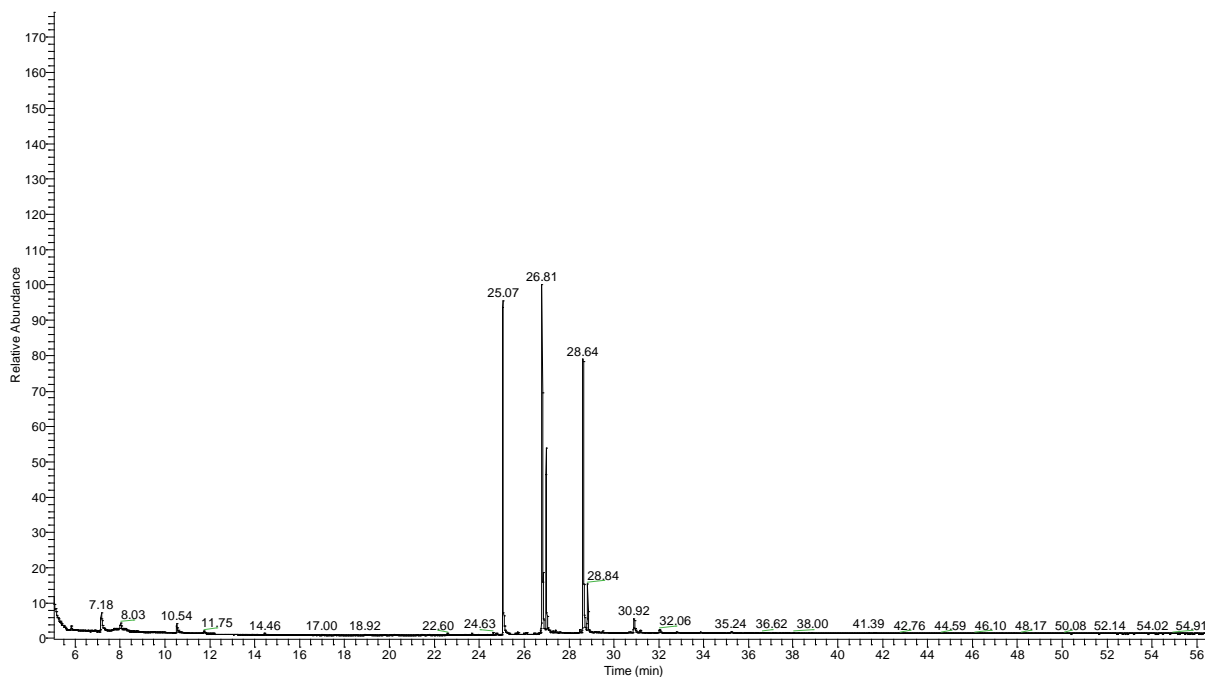
### Хроматограмма экстрагента:



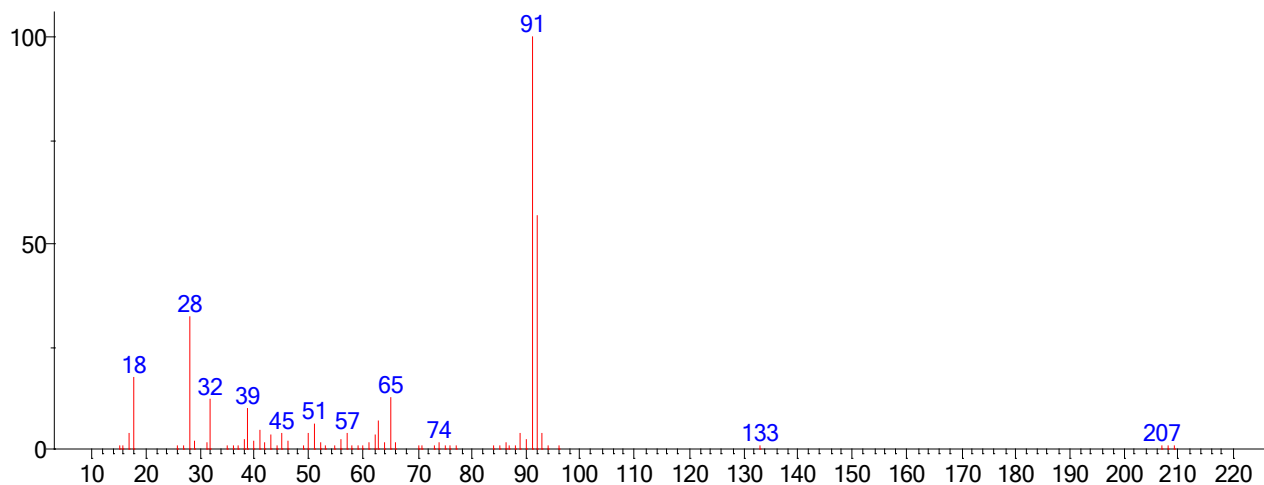
# Общая хроматограмма образца:

RT: 5.05 - 56.73

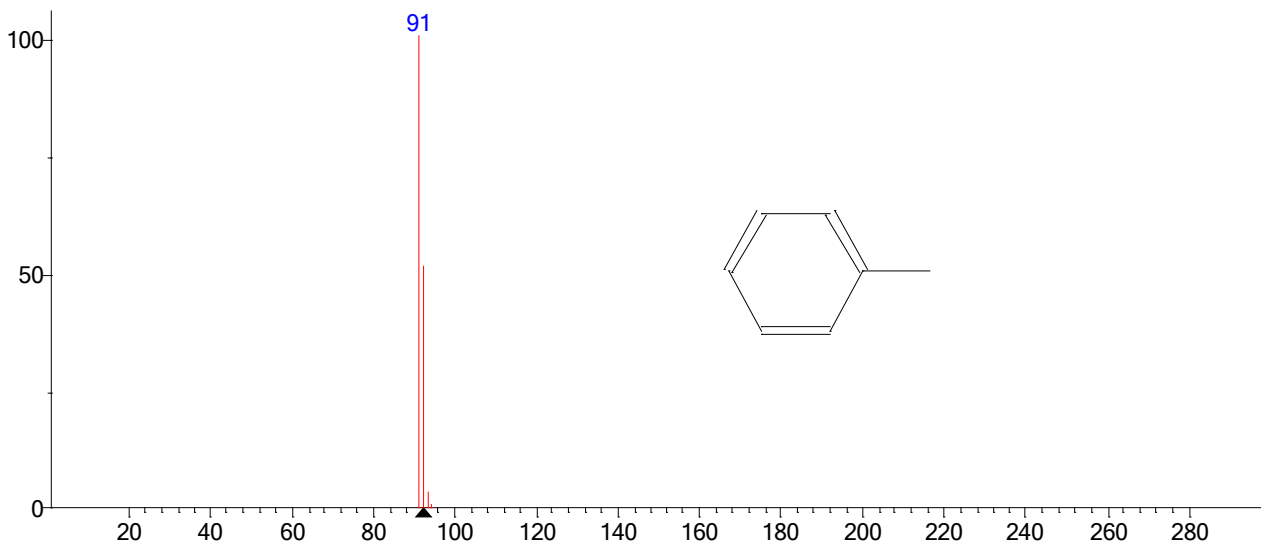
NL:  
1.17E9  
TIC\_MS  
B18\_G



## Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.18

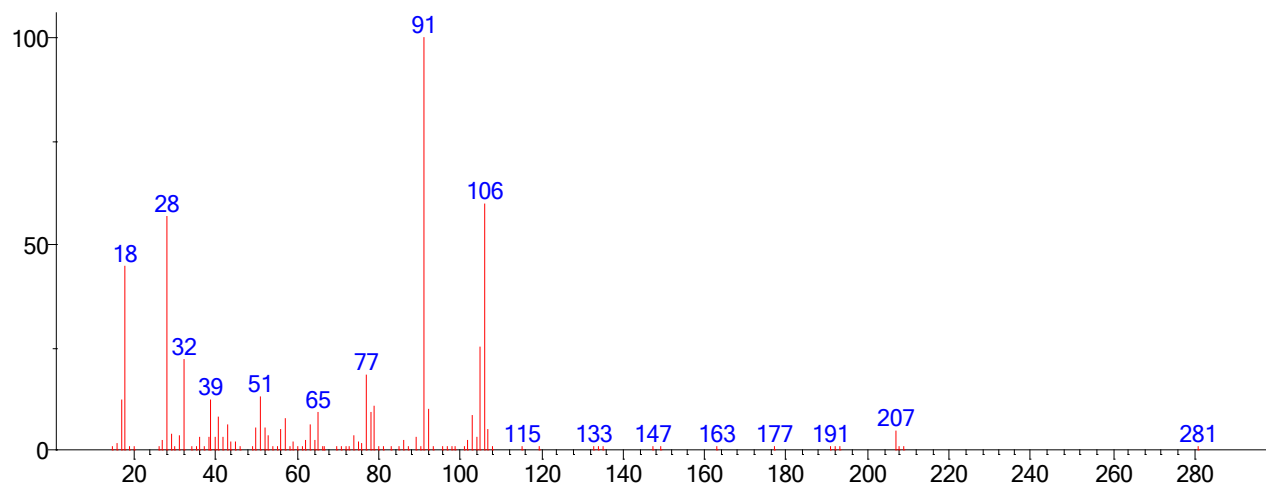


(Text File) B18\_G#933 RT: 7.17 AV: 1

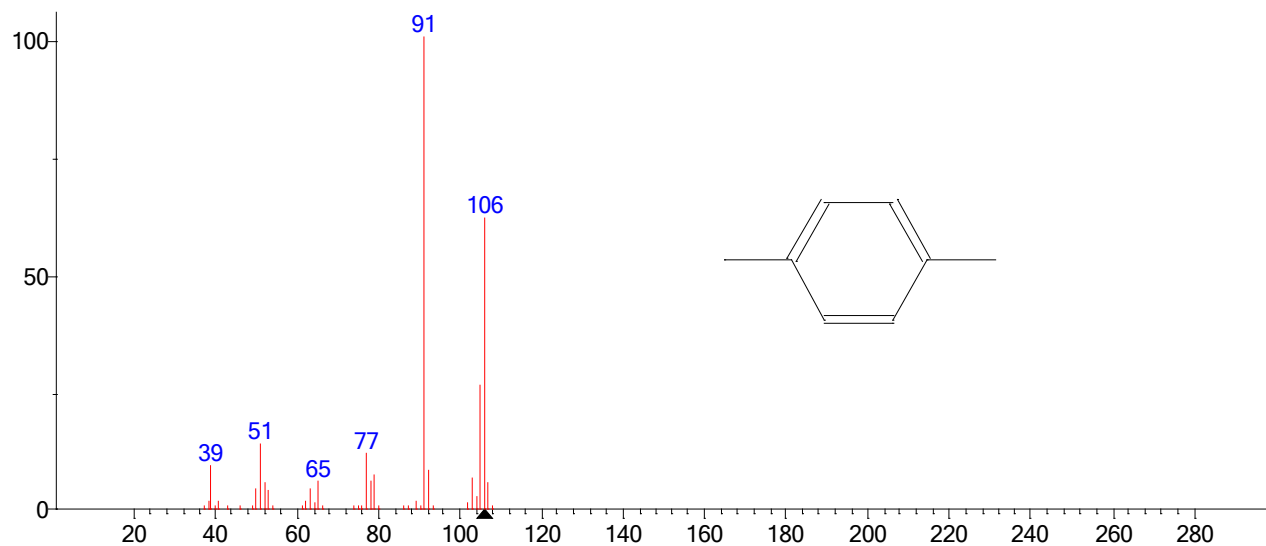


(wiley9) Benzene, methyl- (CAS)

### Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.54

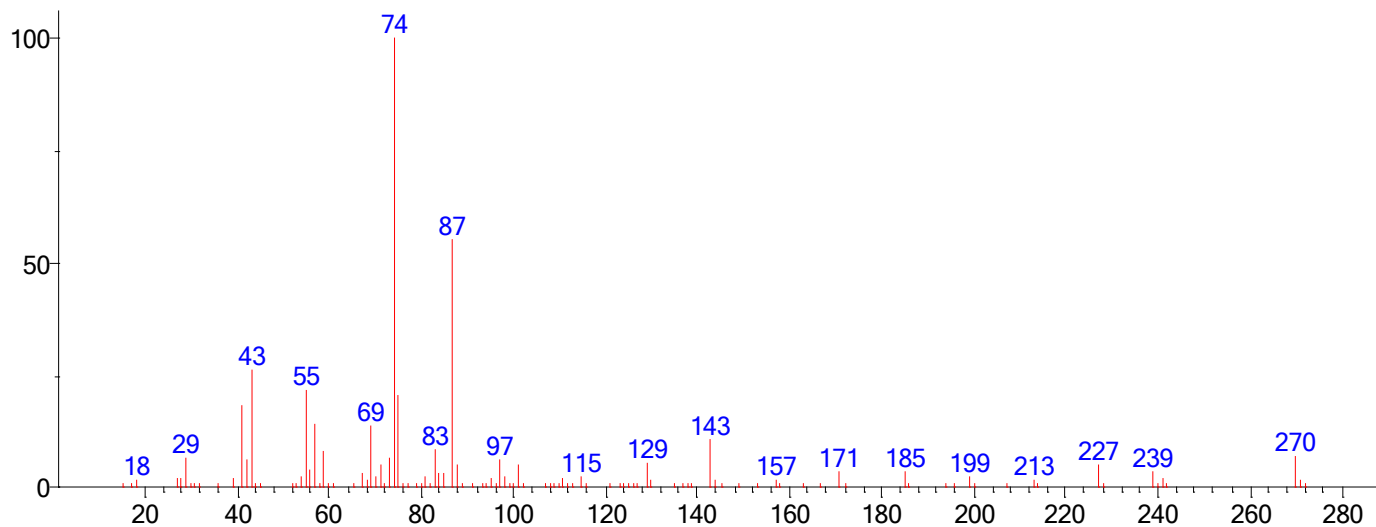


(Text File) B18\_G#1920 RT: 10.53 AV: 1

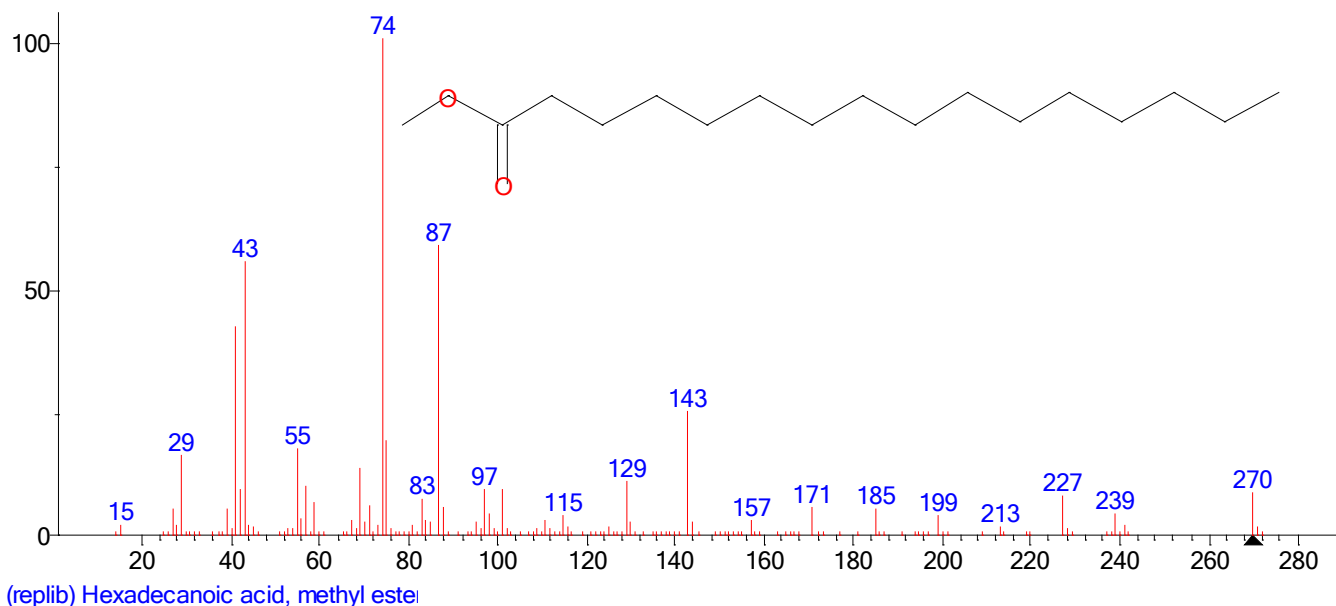


(wiley9) Benzene, 1,4-dimethyl- (CAS)

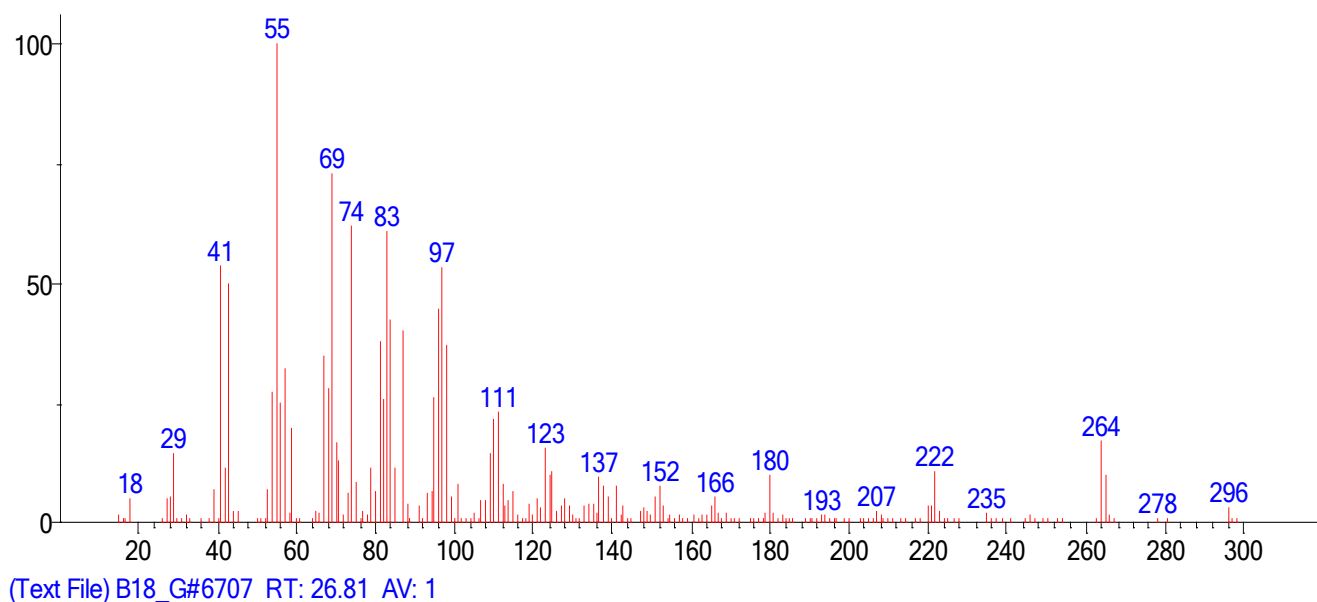
### Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.07

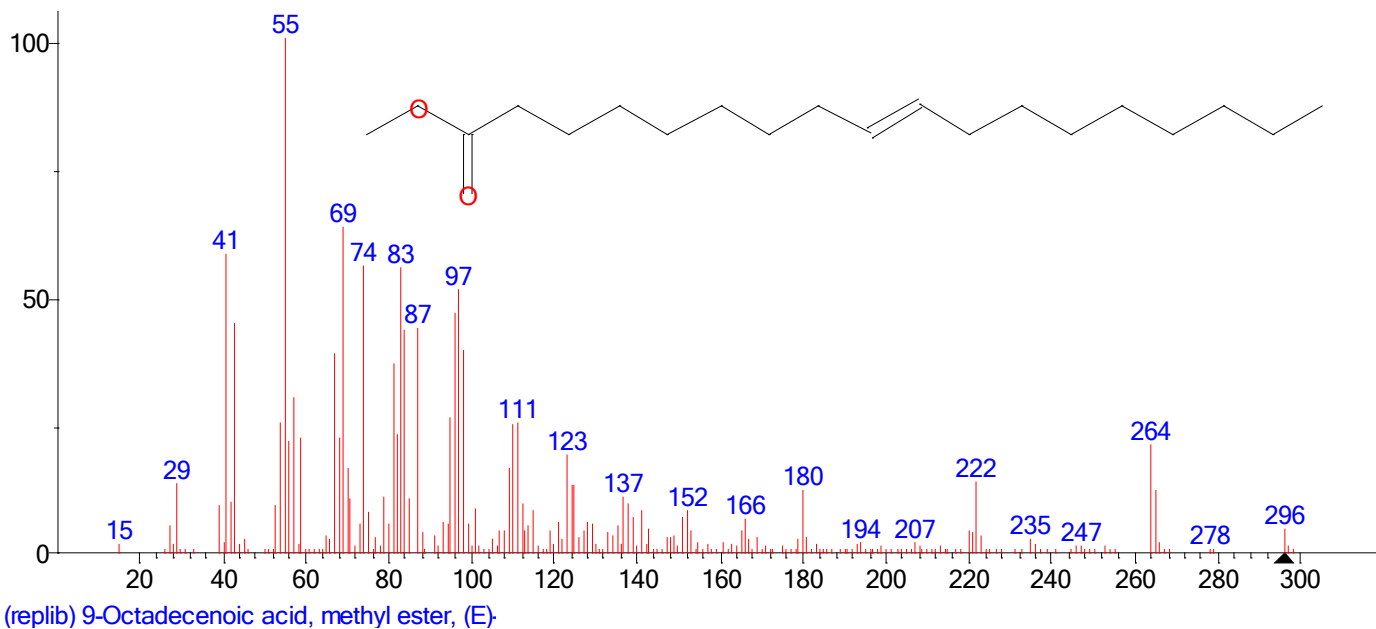


(Text File) B18\_G#6194 RT: 25.06 AV: 1

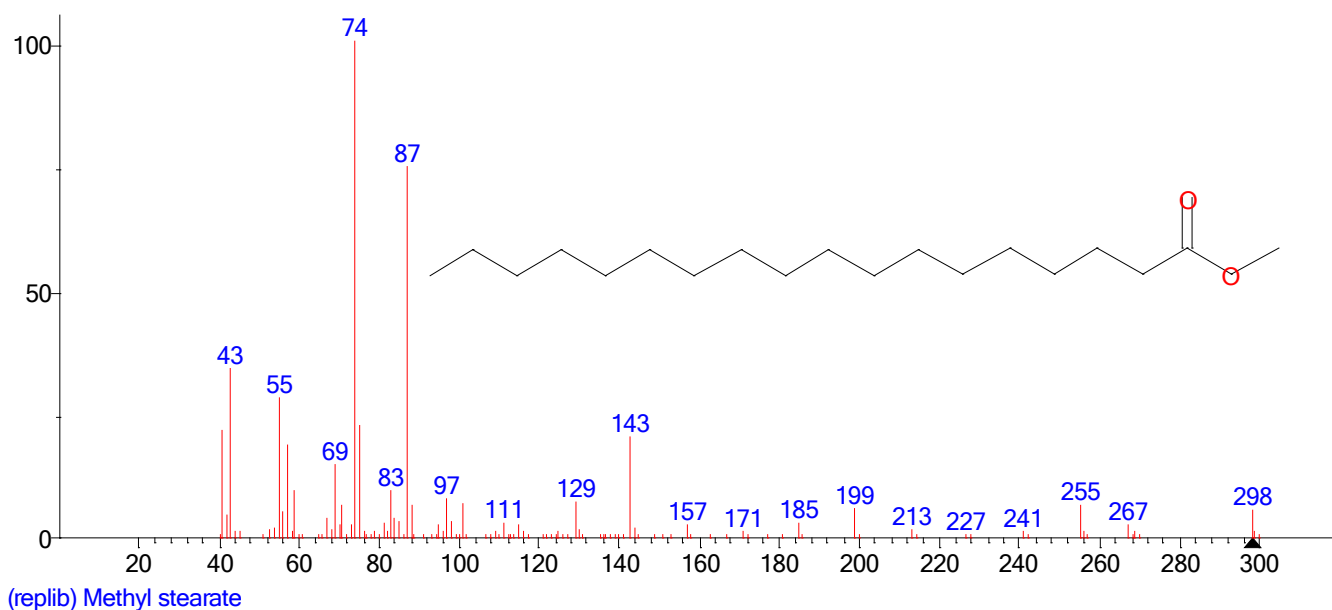
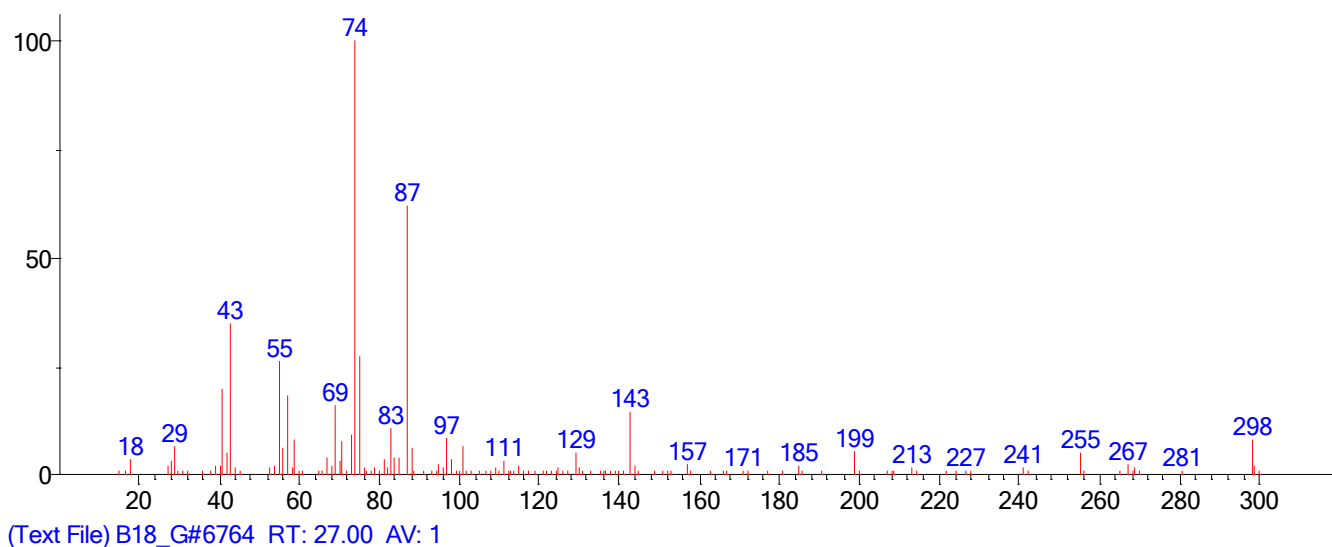


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 26.81

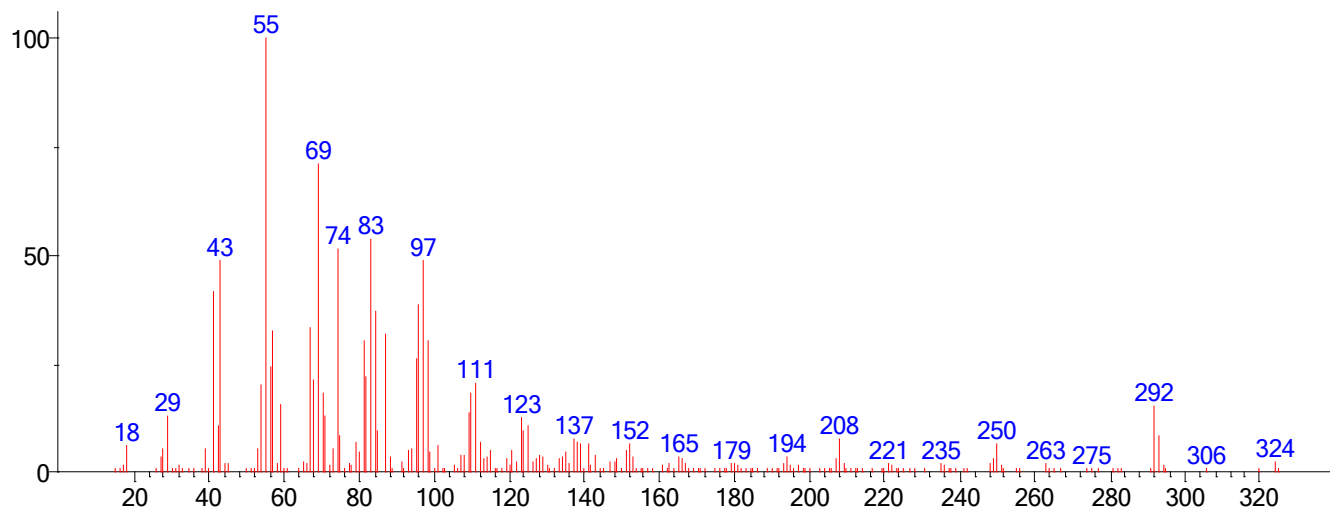




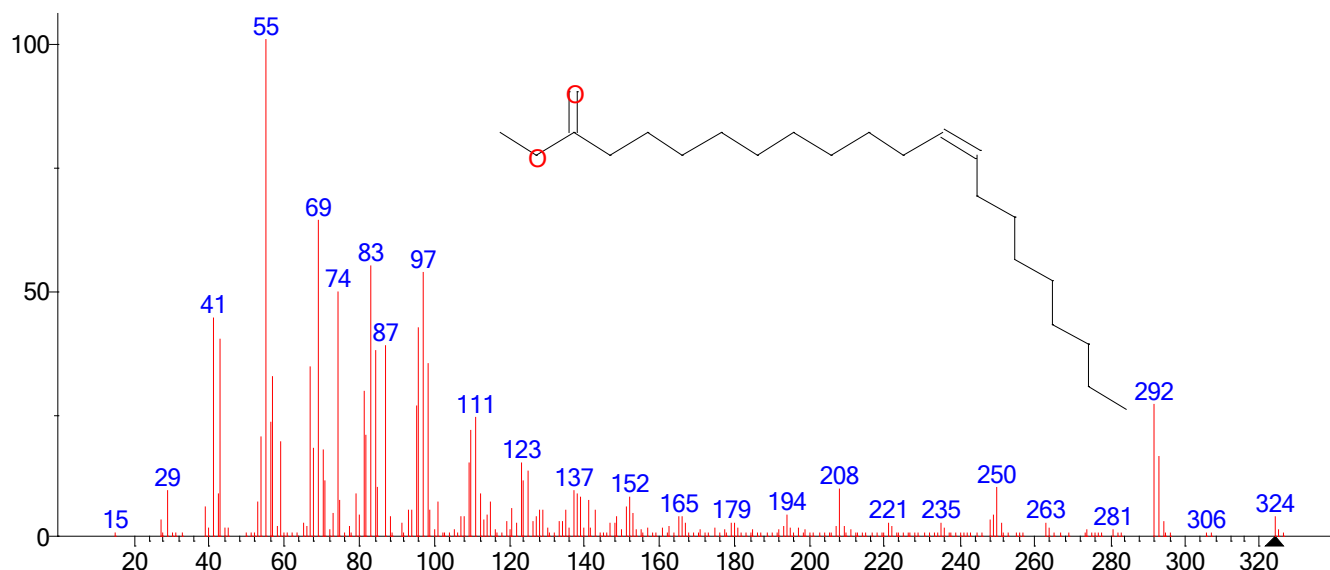
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 27.00



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 28.64

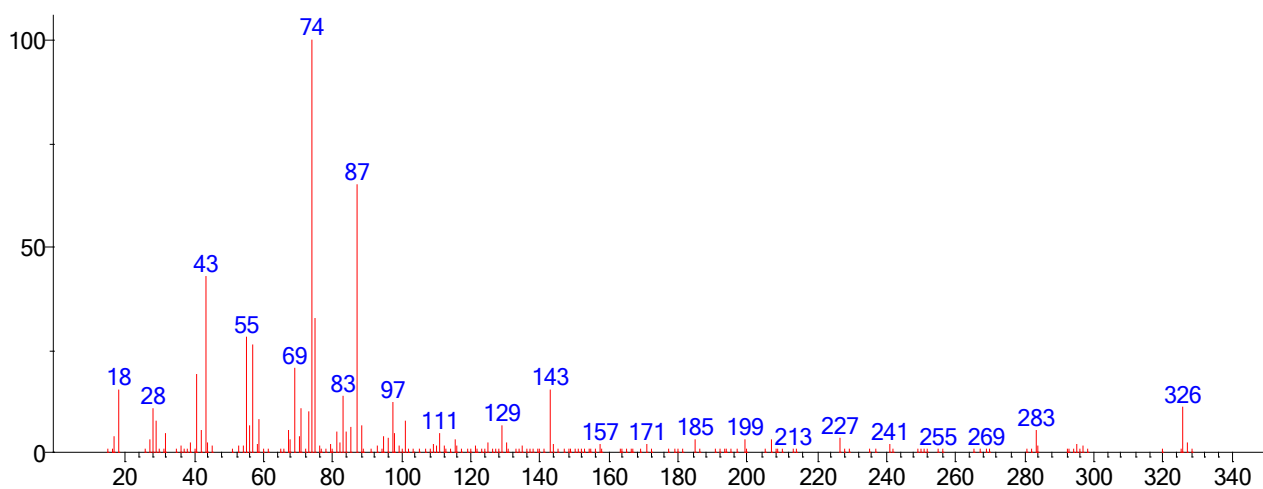


(Text File) B18\_G#7245 RT: 28.64 AV: 1

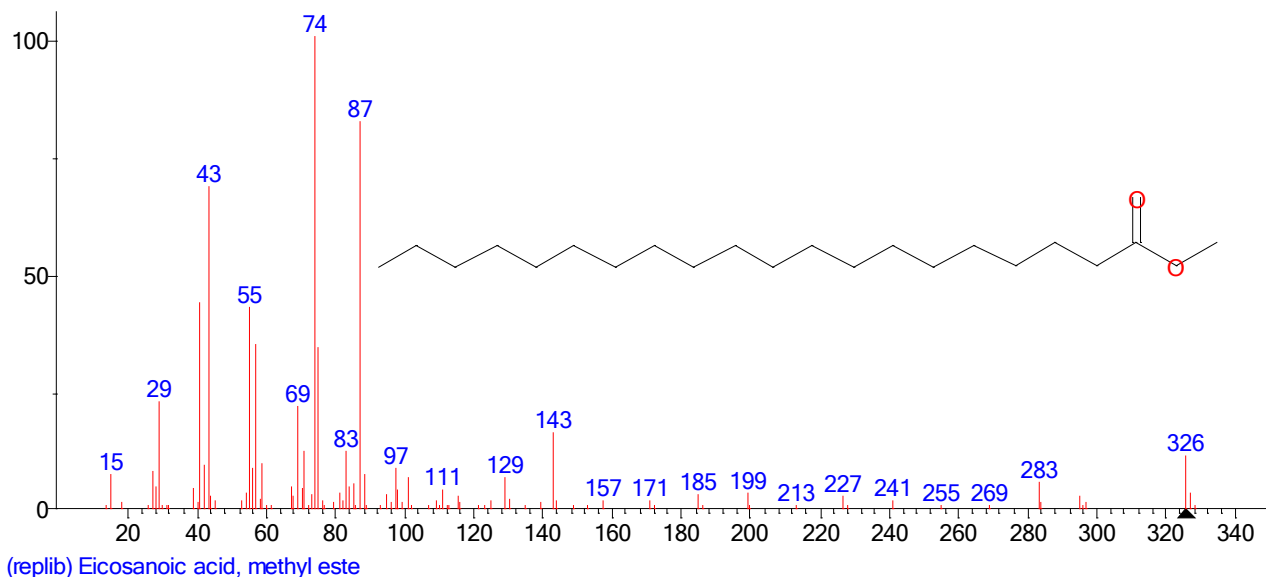


(mainlib) cis-11-Eicosenoic acid, methyl este

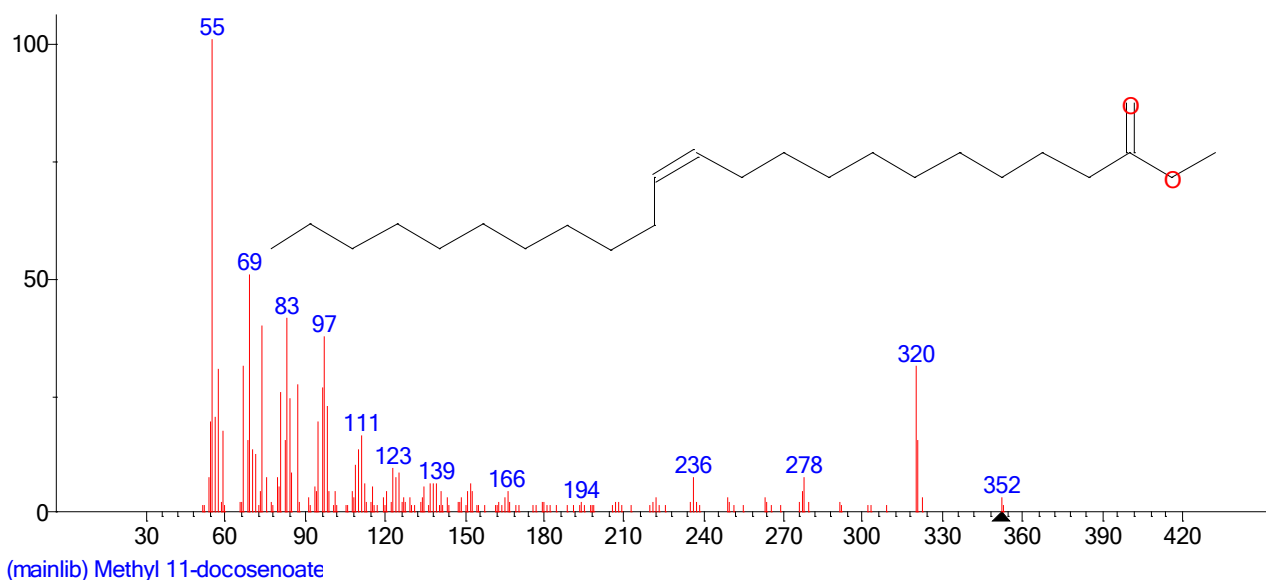
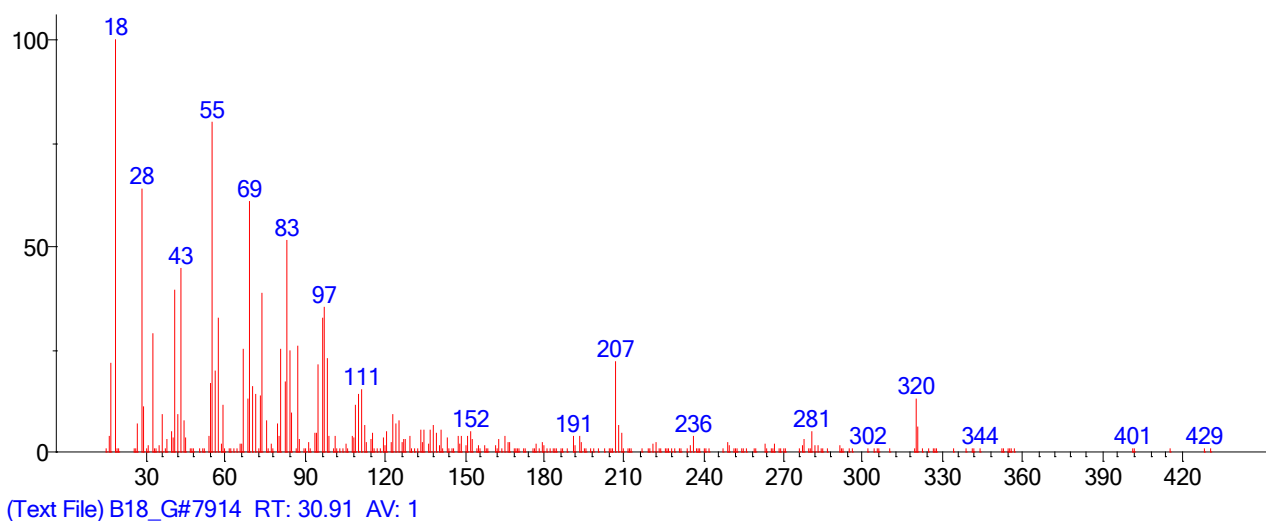
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 28.84



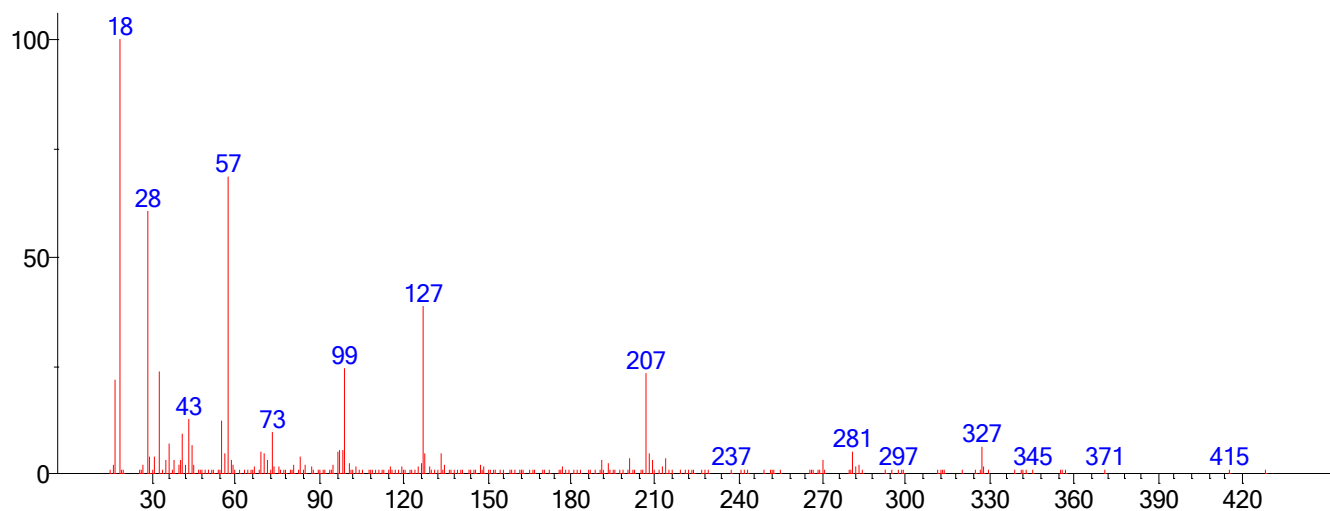
(Text File) B18\_G#7304 RT: 28.84 AV: 1



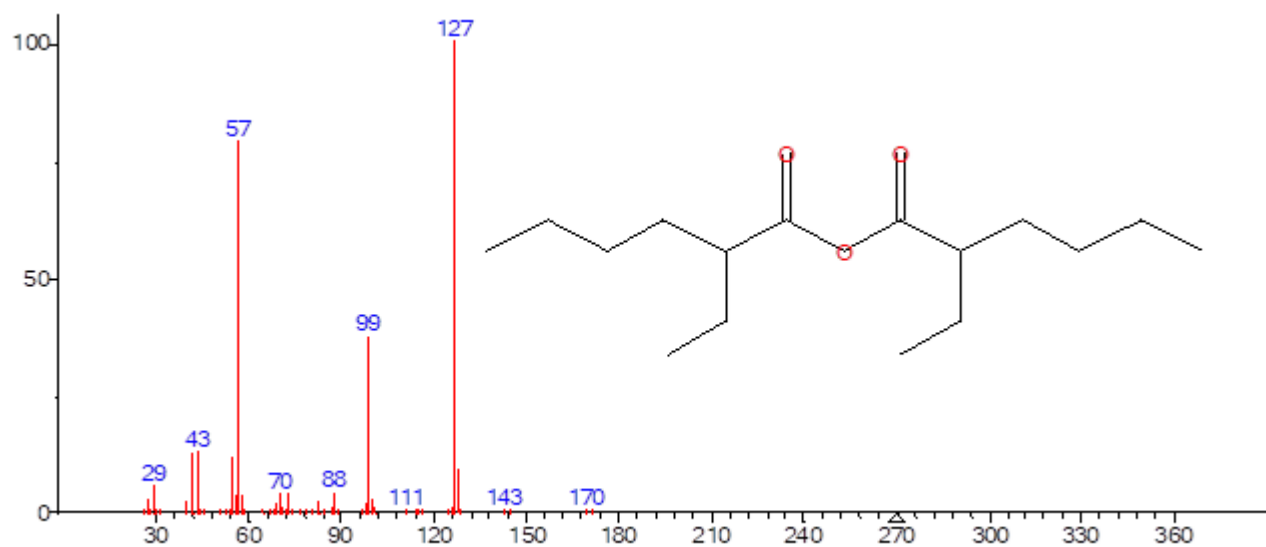
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 30.92



## Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 32.06



(Text File) B18\_G#8250 RT: 32.05 AV: 1



(mainlib) Hexanoic acid, 2-ethyl-, anhydride

### Выводы:

В образце Э-31-19/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- углеводороды (ароматические);
- метиловые эфиры жирных кислот (предельные и непредельные C16-C22);
- ангидрид 2-этилгексановой кислоты.