

**ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ  
образца Э-31-17/2020**

**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]

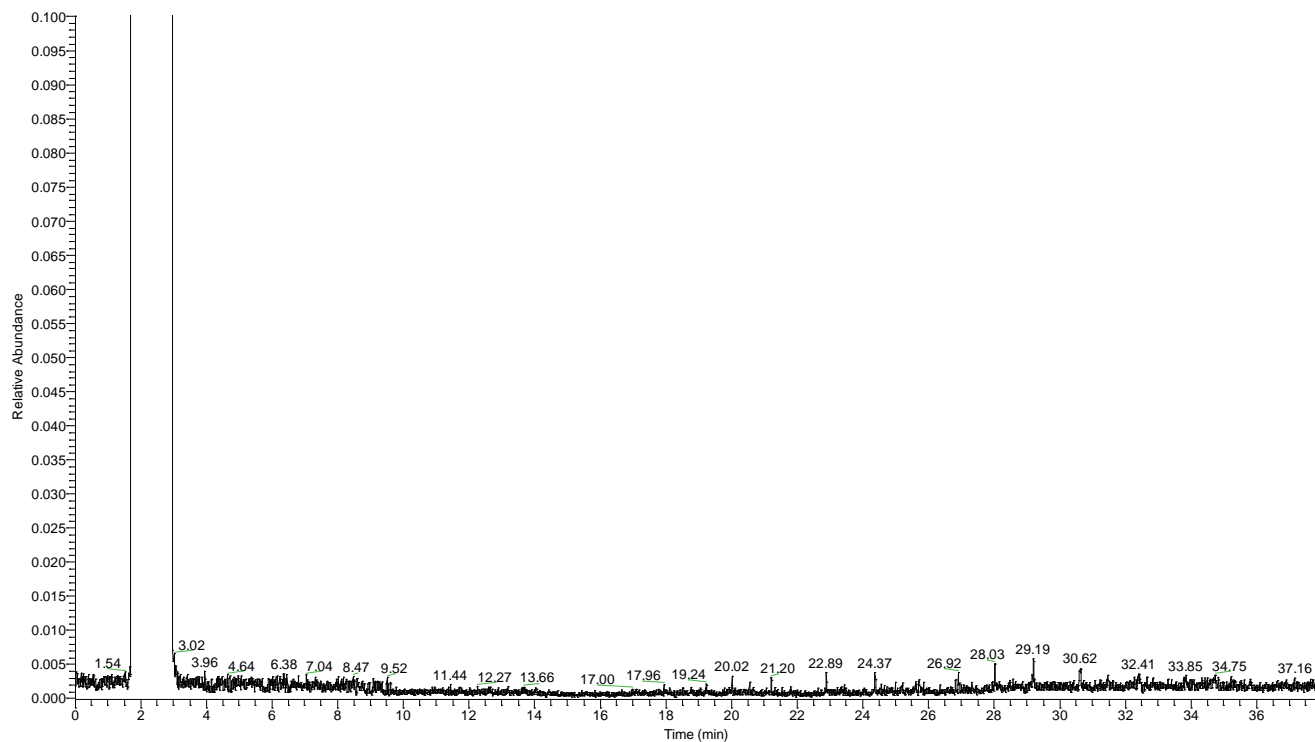
Detector Gain:        1,00X10<sup>5</sup> (1100 V)  
Fore Pressure (mTorr):    50  
Mass range (m/z):        15–650  
Ionization Energy (eV):   70.0

**Пробоподготовка:**

Экстрагент: ацетон/этанол/диэтиловый эфир (3/1/1об.).  
Экстракция: 50 г образца + 50 мл экстрагента.  
Время экстракции: 1 сутки.  
Объем закола: 0.5 мкл.  
Задержка МС-детектирования: 4 мин.

**Хроматограмма экстрагента:**

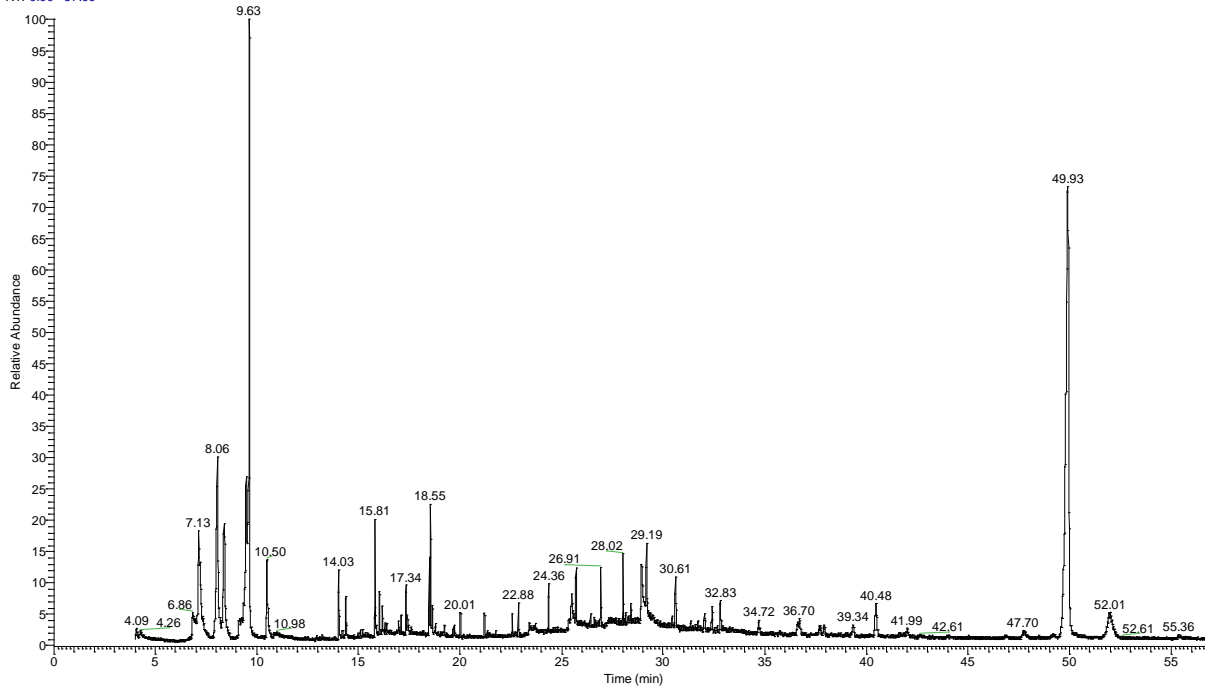
RT: 0.00 - 37.85



NL:  
2.65E9  
TIC MS  
Azeton\_Et\_  
DEE

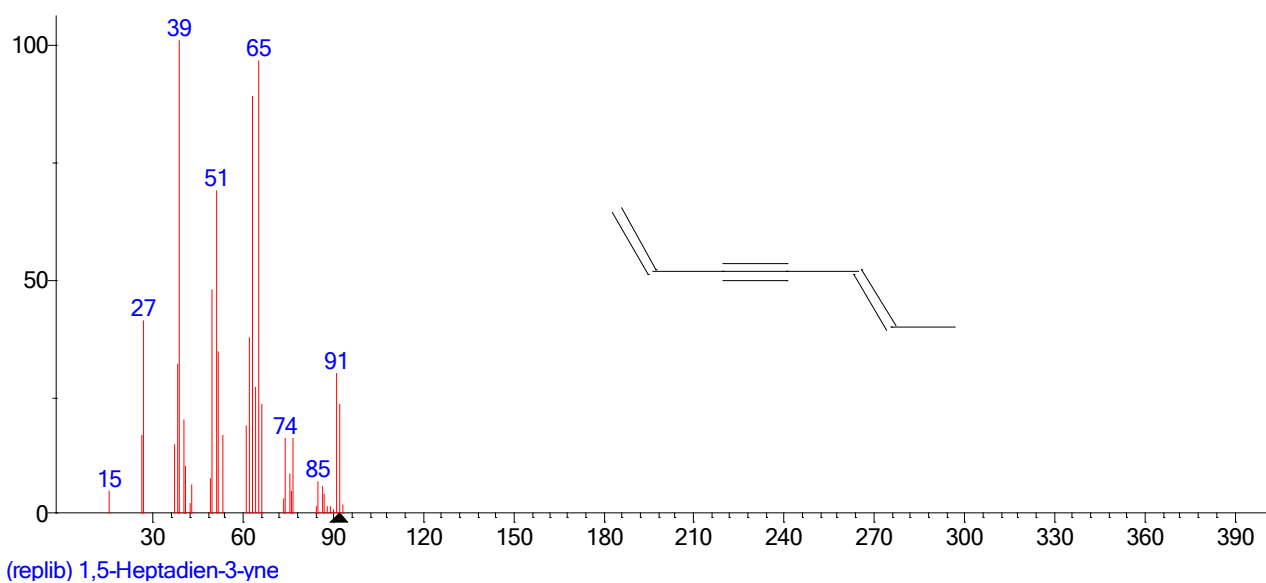
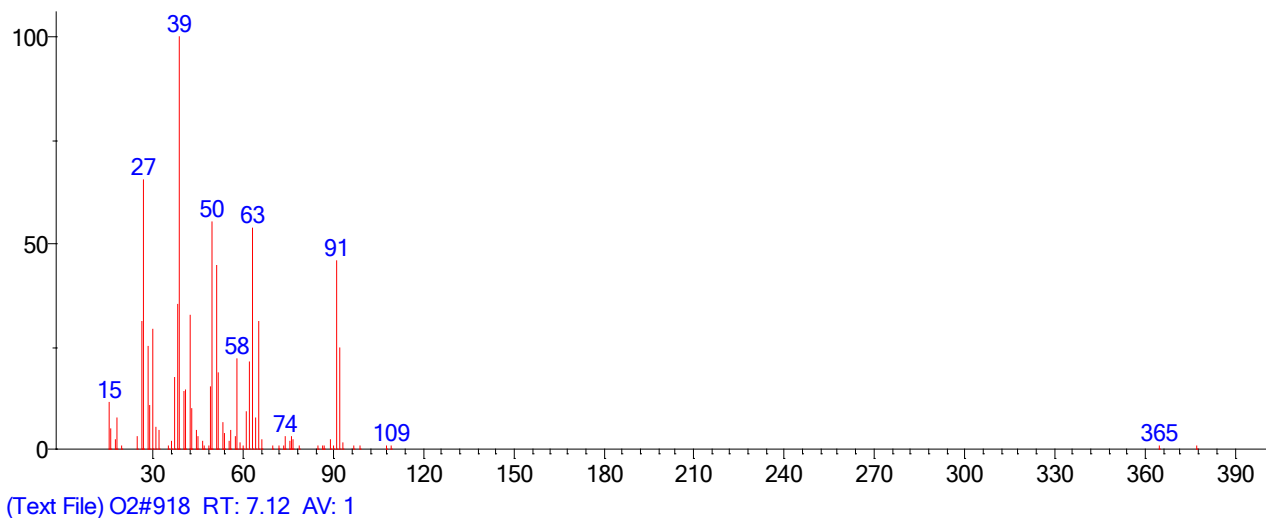
### Общая хроматограмма образца:

RT: 0.00 - 57.09

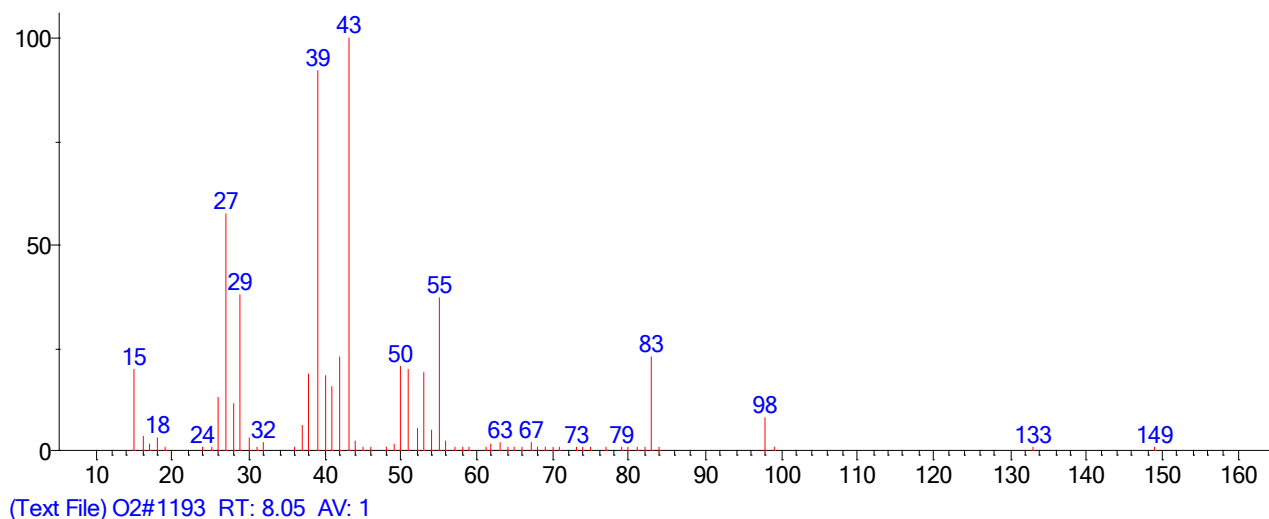


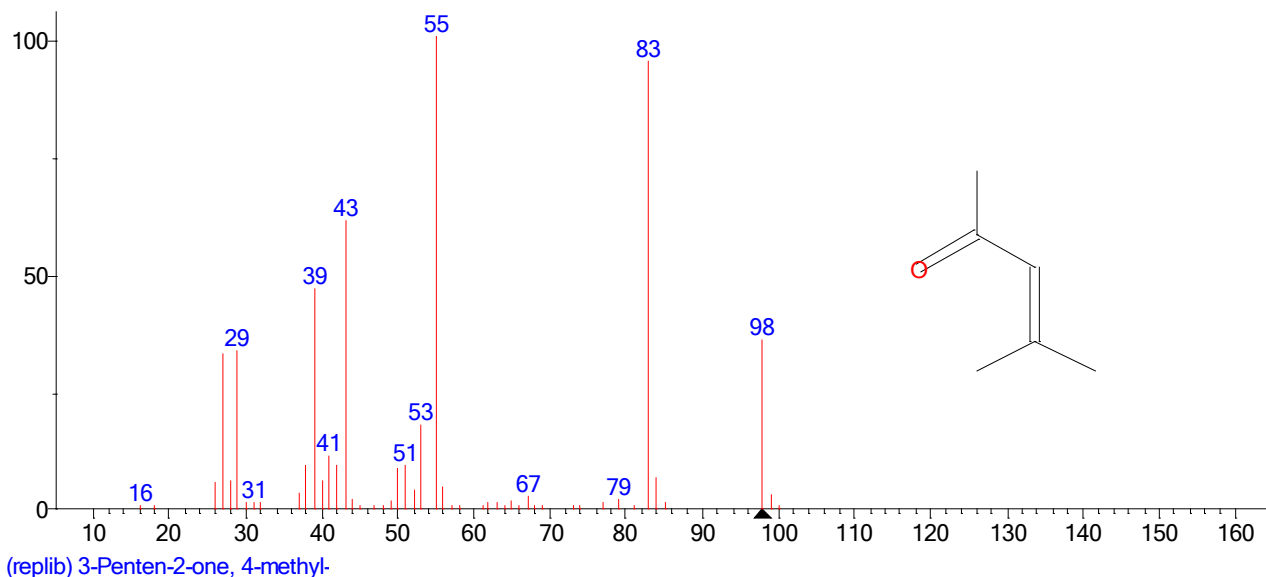
NL:  
1.97E7  
TIC MS O2

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 7.13

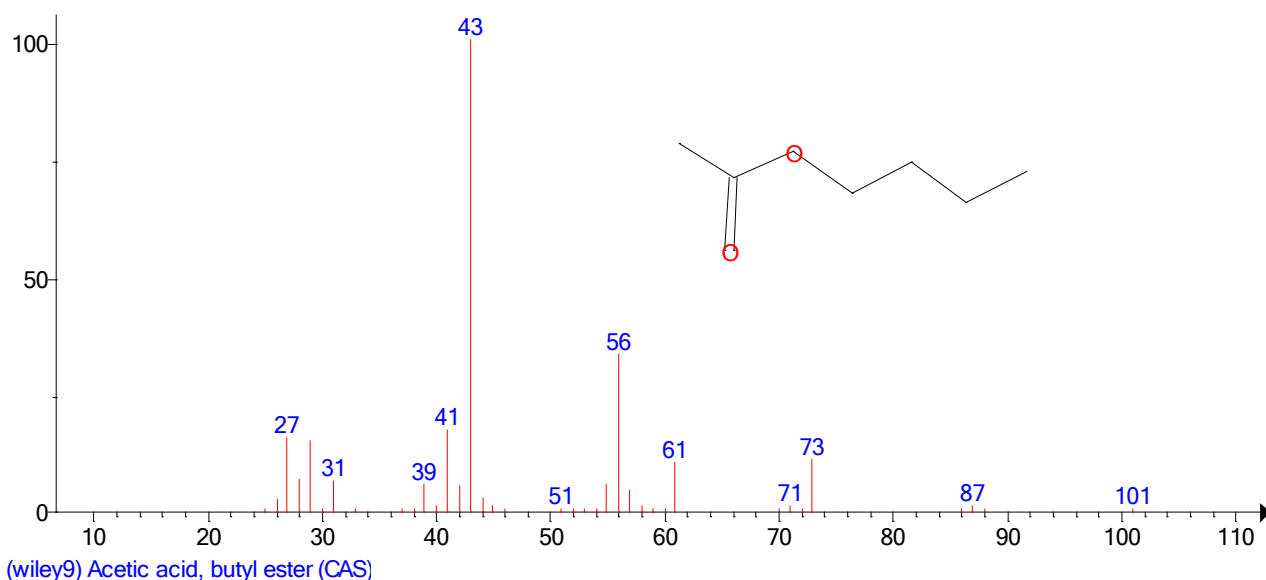
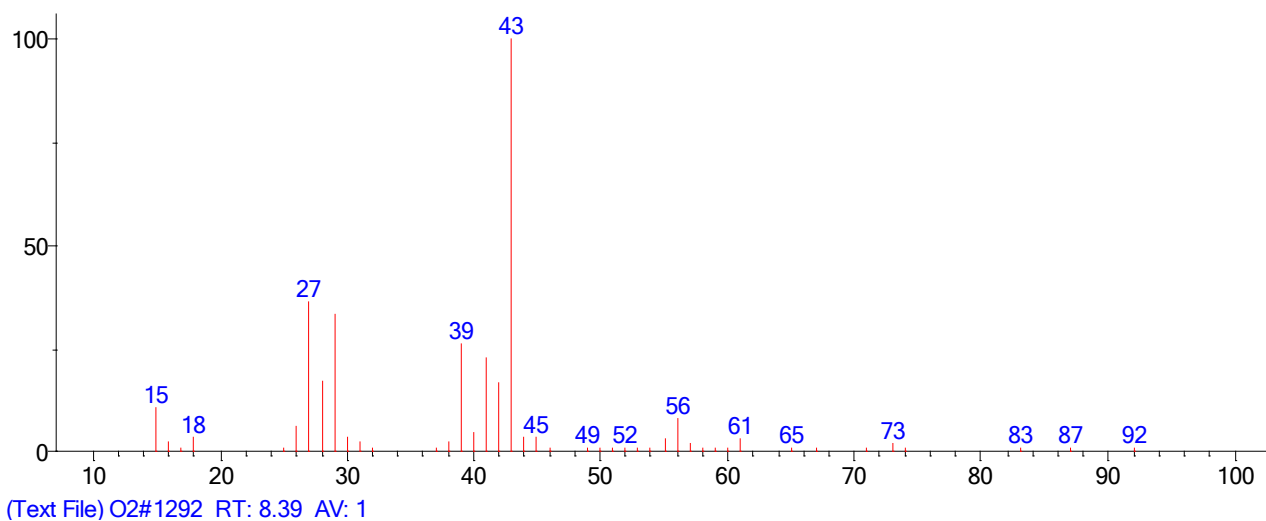


Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.06

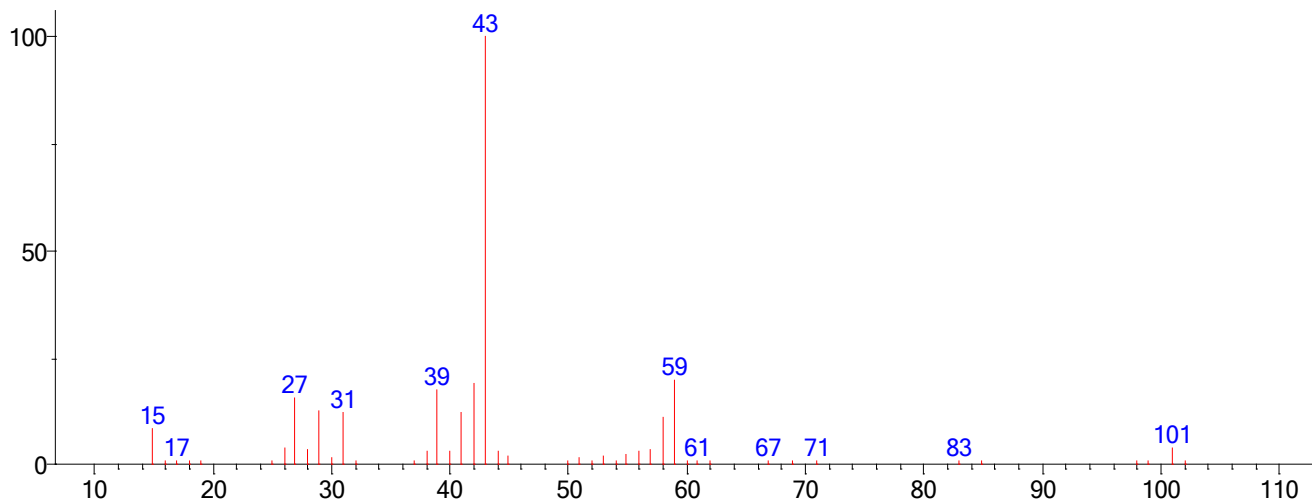




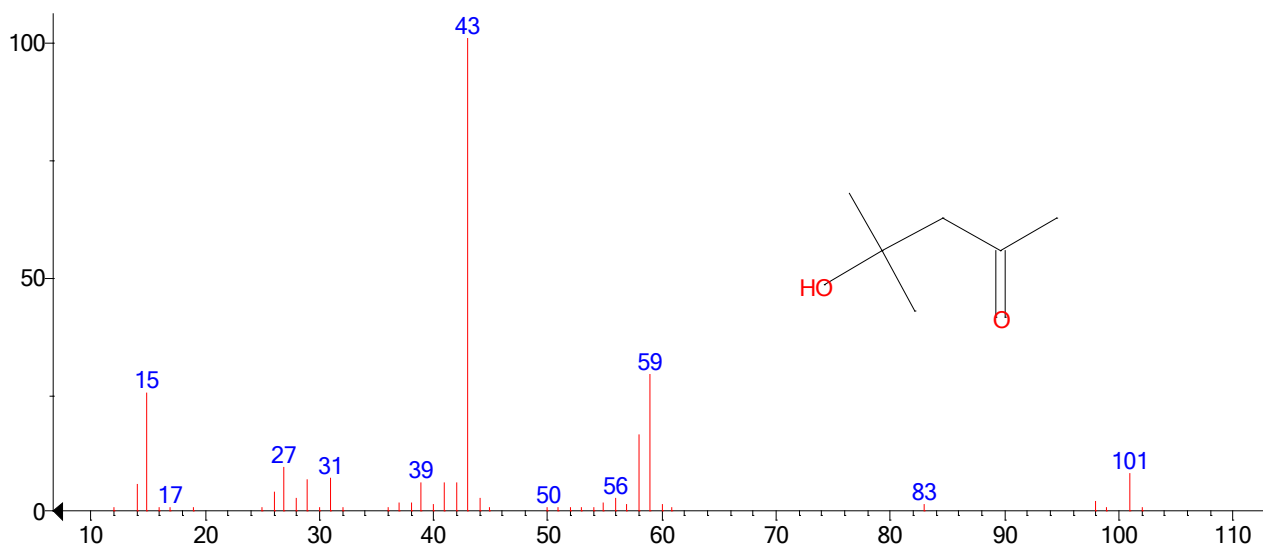
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.39



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 9.62

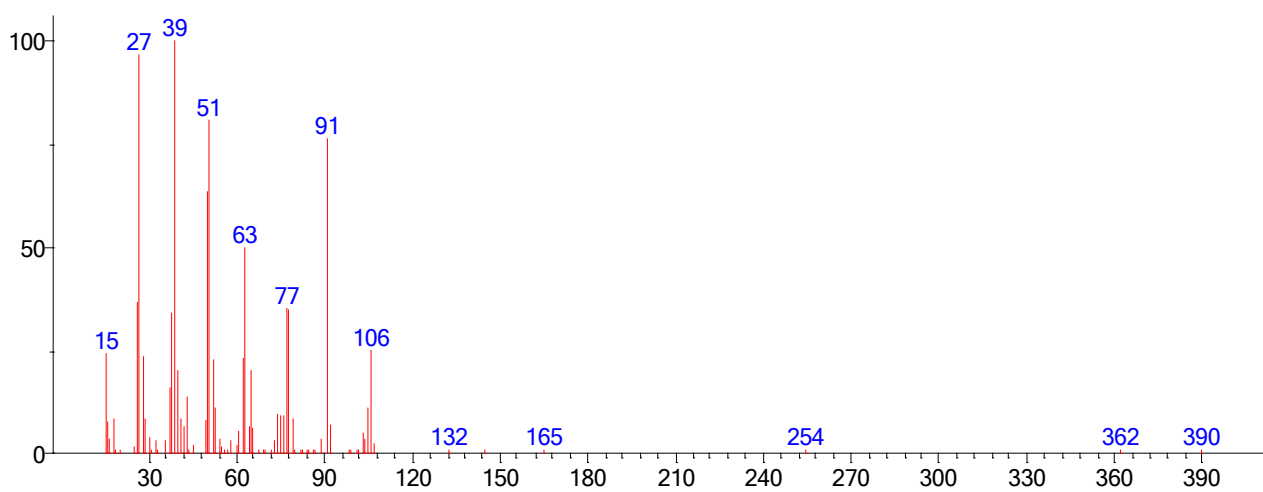


(Text File) O2#1653 RT: 9.62 AV: 1

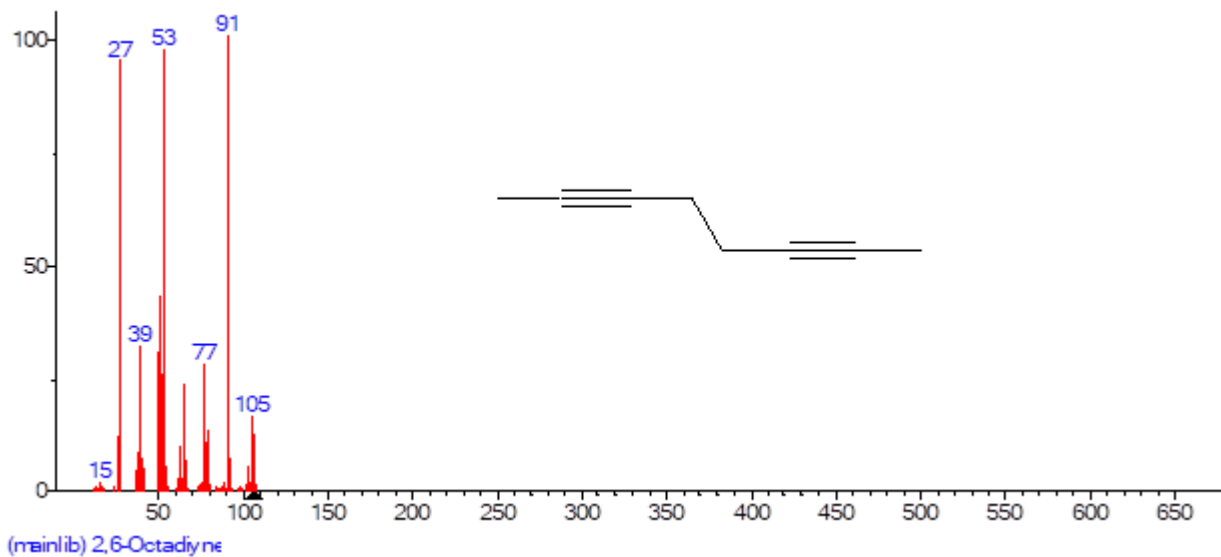


(wiley9) 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl- (CAS)

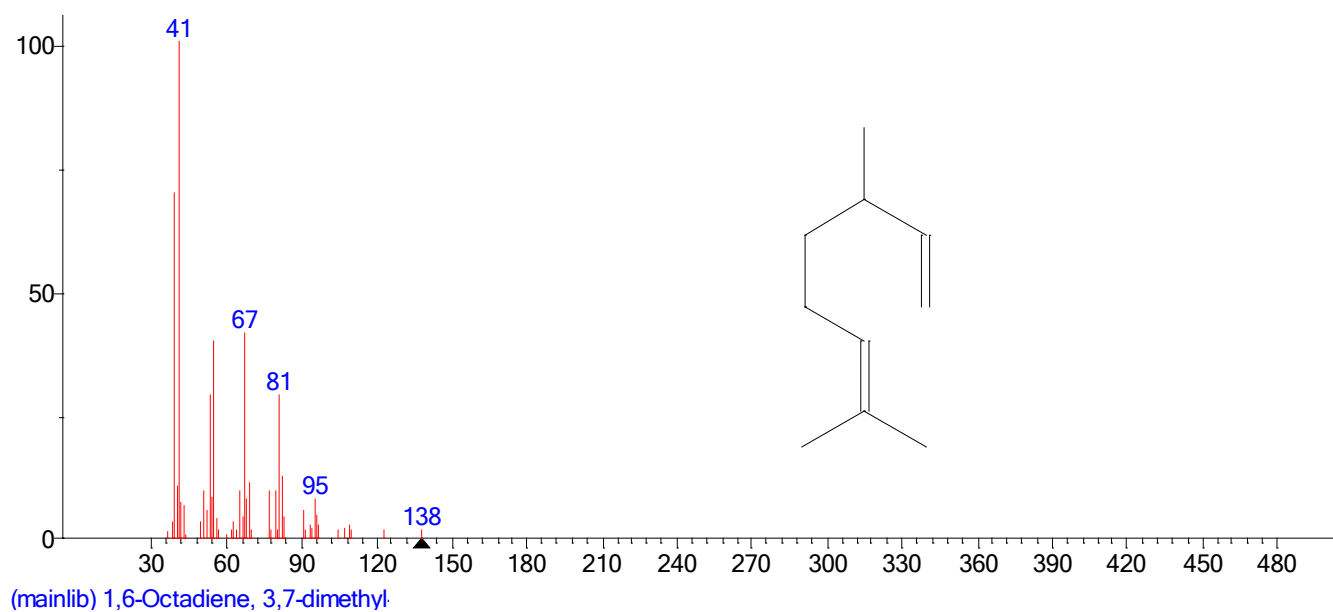
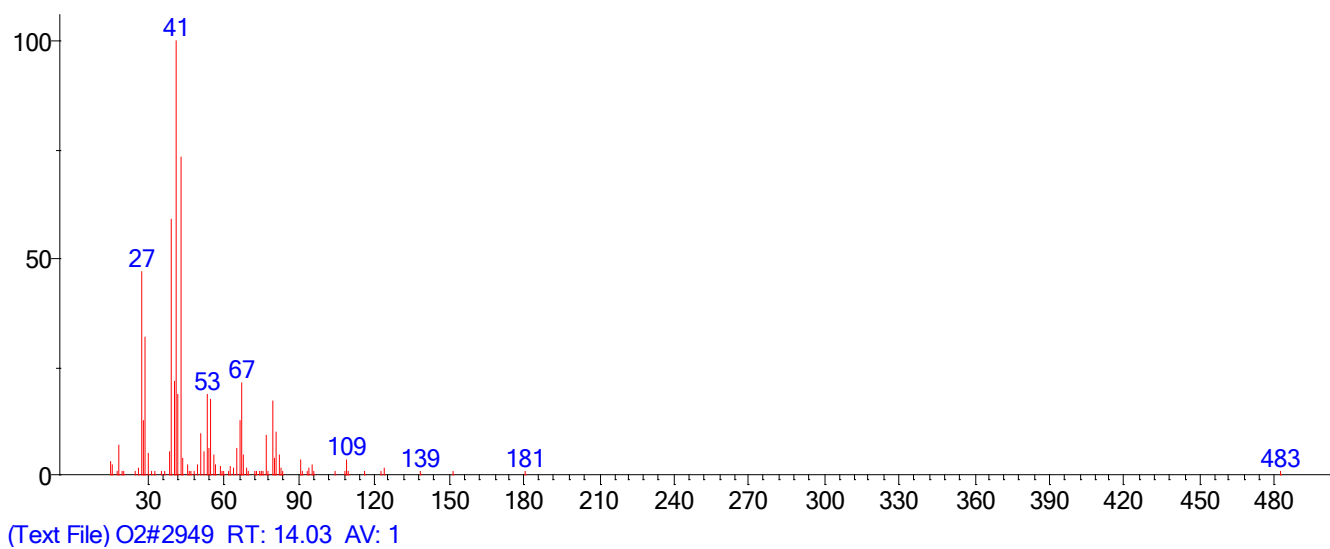
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.50



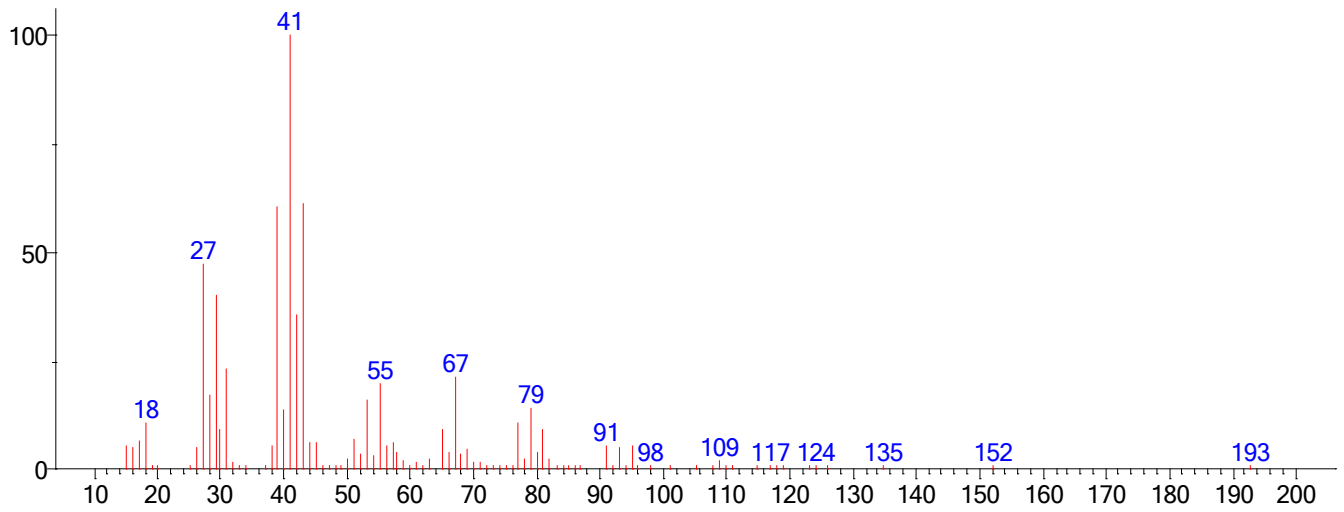
(Text File) O2#1912 RT: 10.50 AV: 1



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 14.03



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 14.37

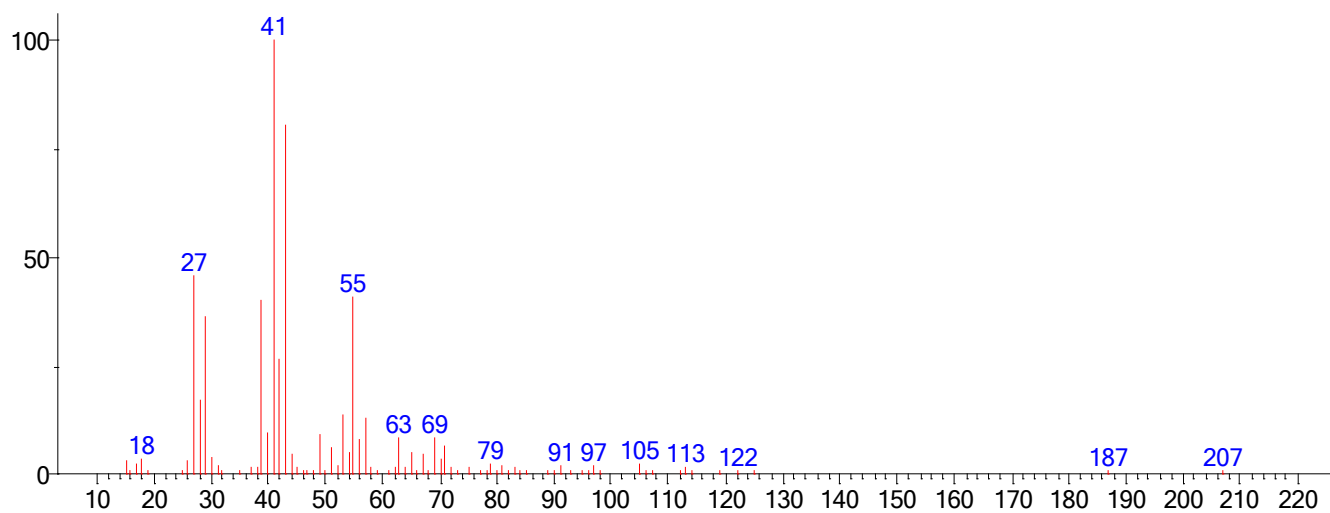


(Text File) O2#3045-3058 RT: 14.35-14.40 AV: 14

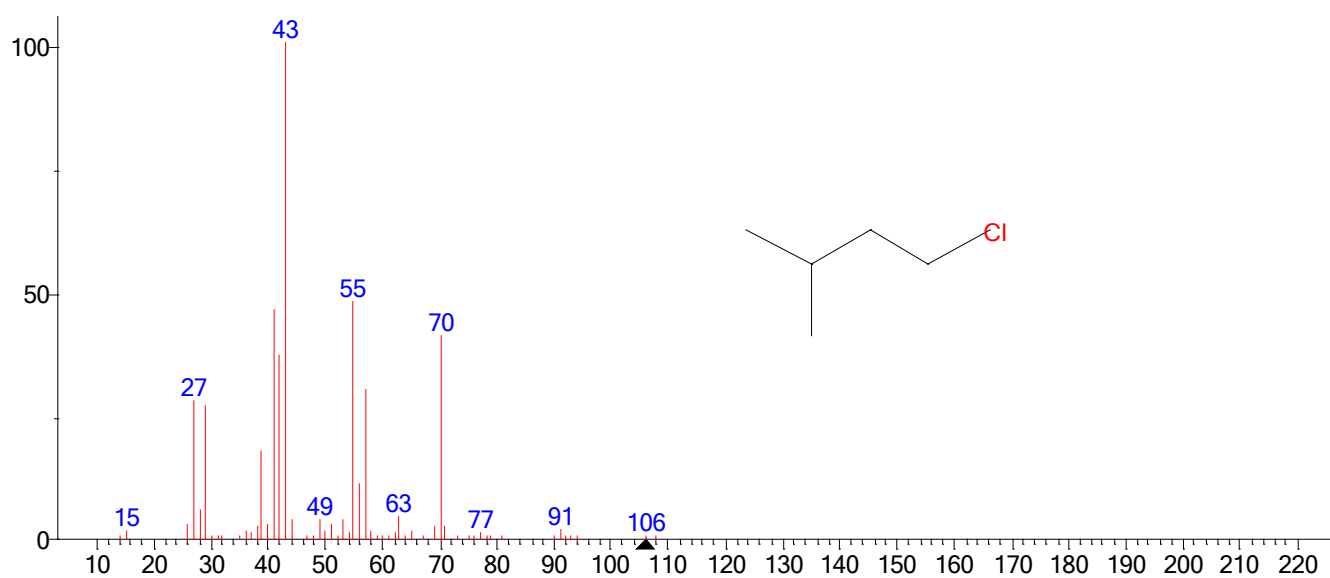


(wiley9) 2-Isononenal (CAS)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 15.81

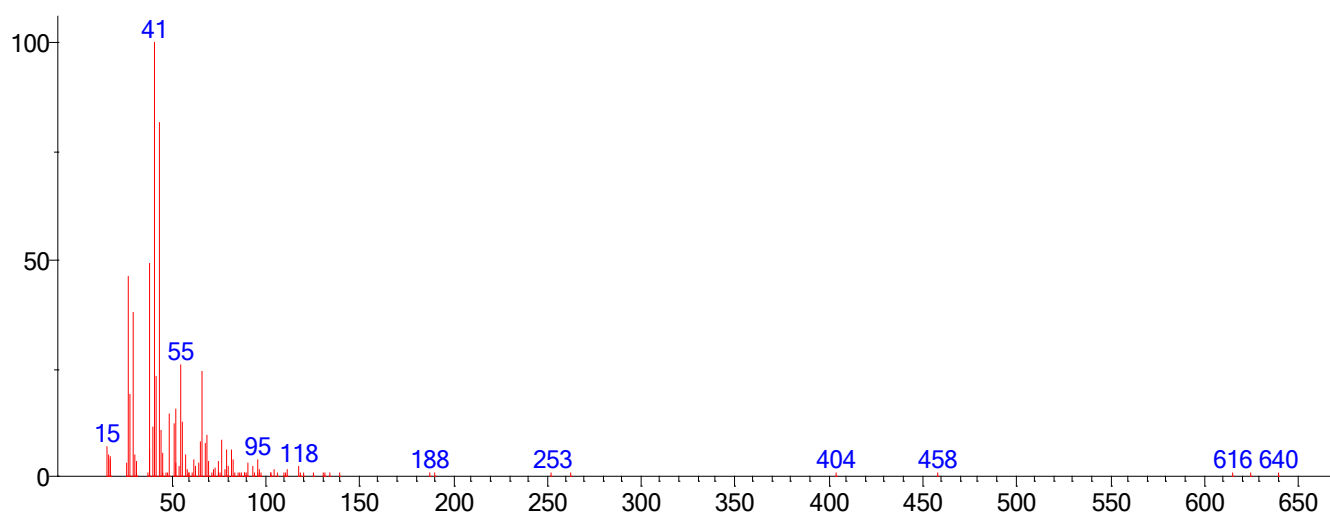


(Text File) O2#3474 RT: 15.81 AV: 1



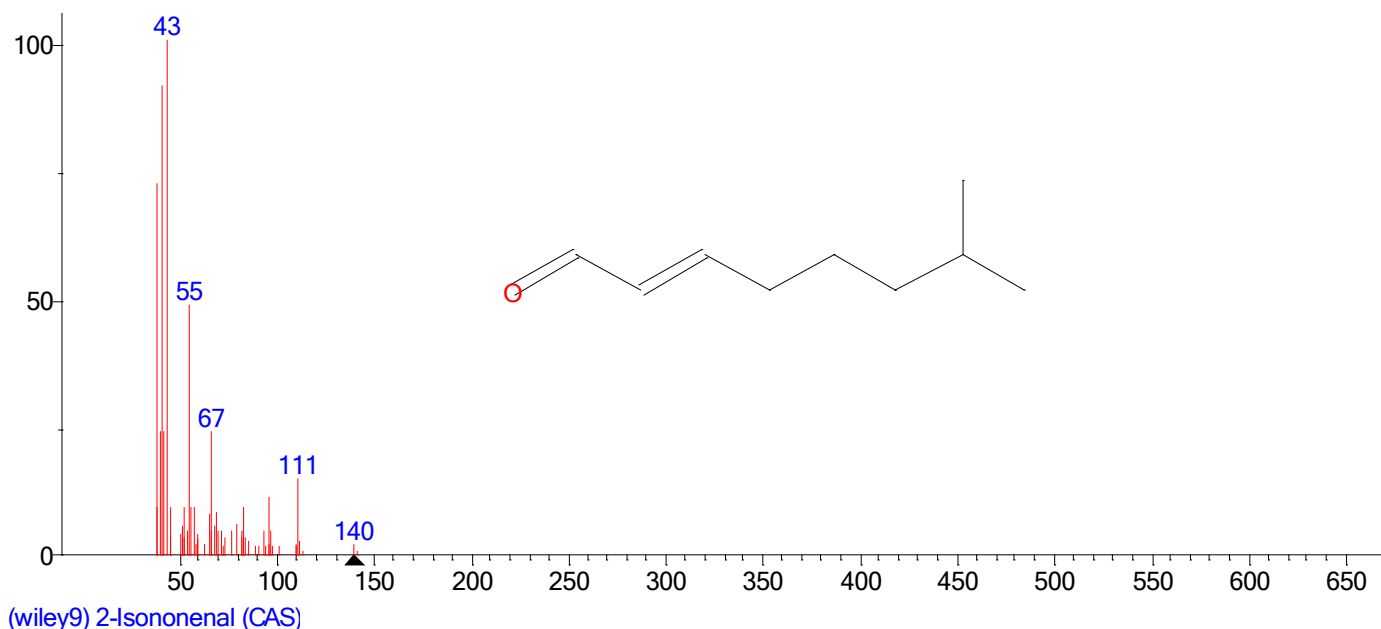
(replib) Butane, 1-chloro-3-methyl-

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 17.34

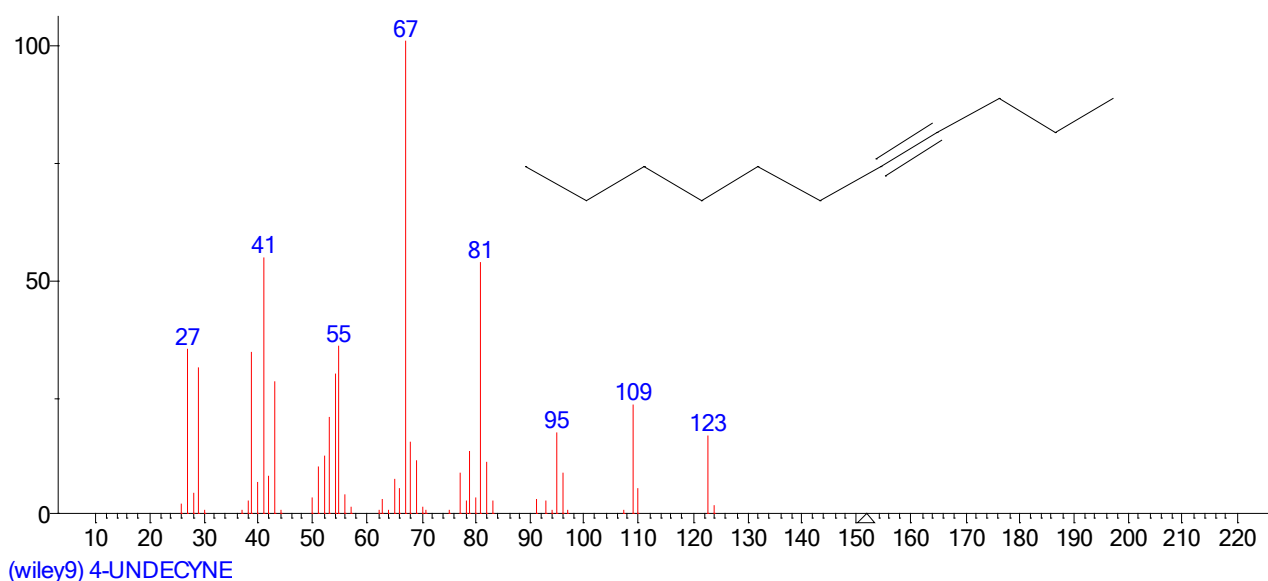
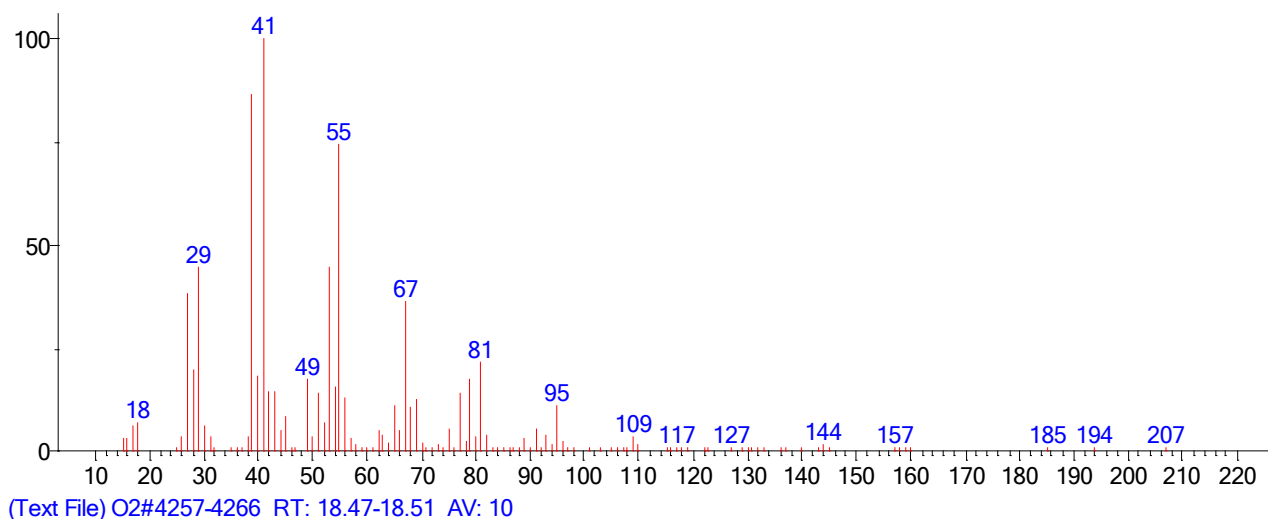


(Text File) O2#3922 RT: 17.34 AV: 1

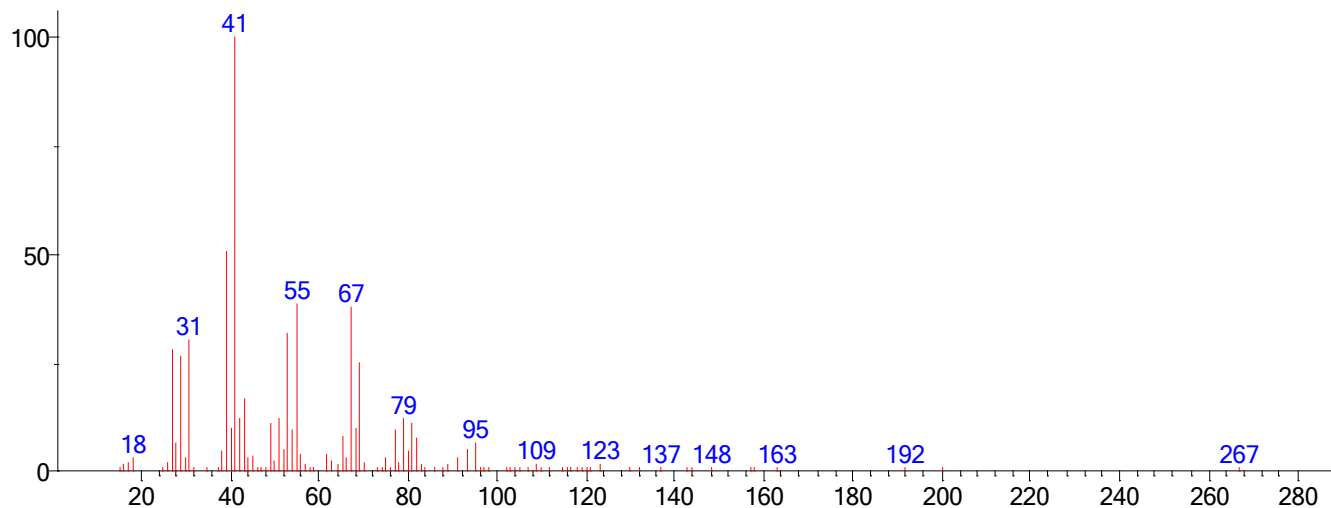




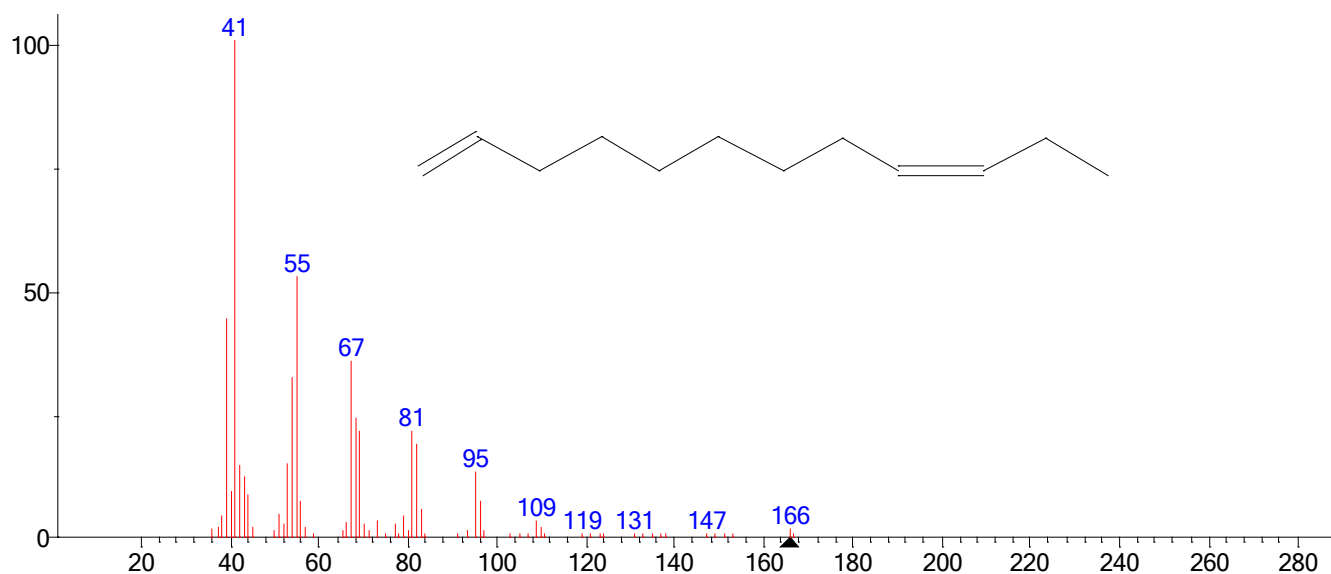
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.49



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.55

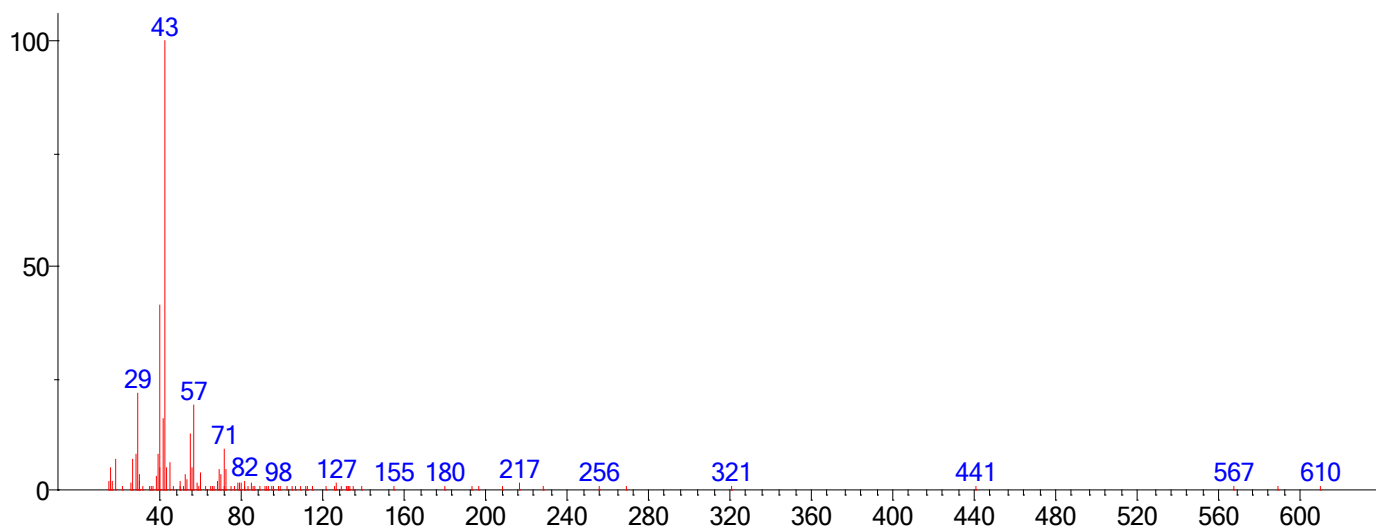


(Text File) O2#4279 RT: 18.55 AV: 1

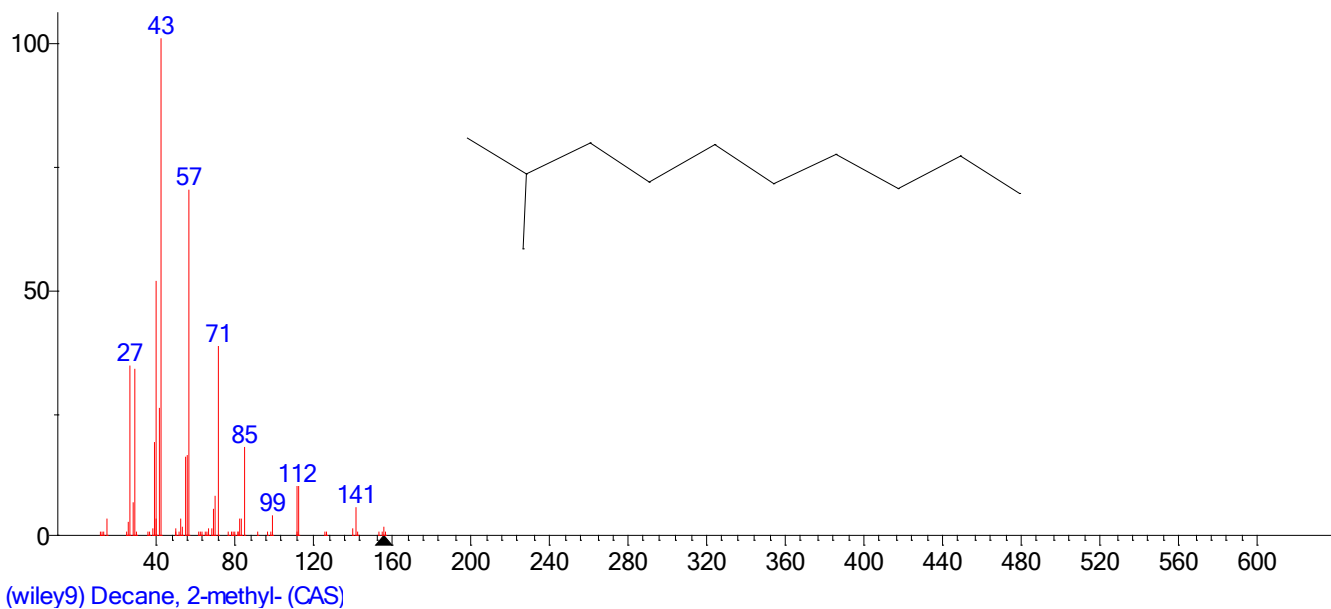


(mainlib) Z-1,9-Dodecadiene

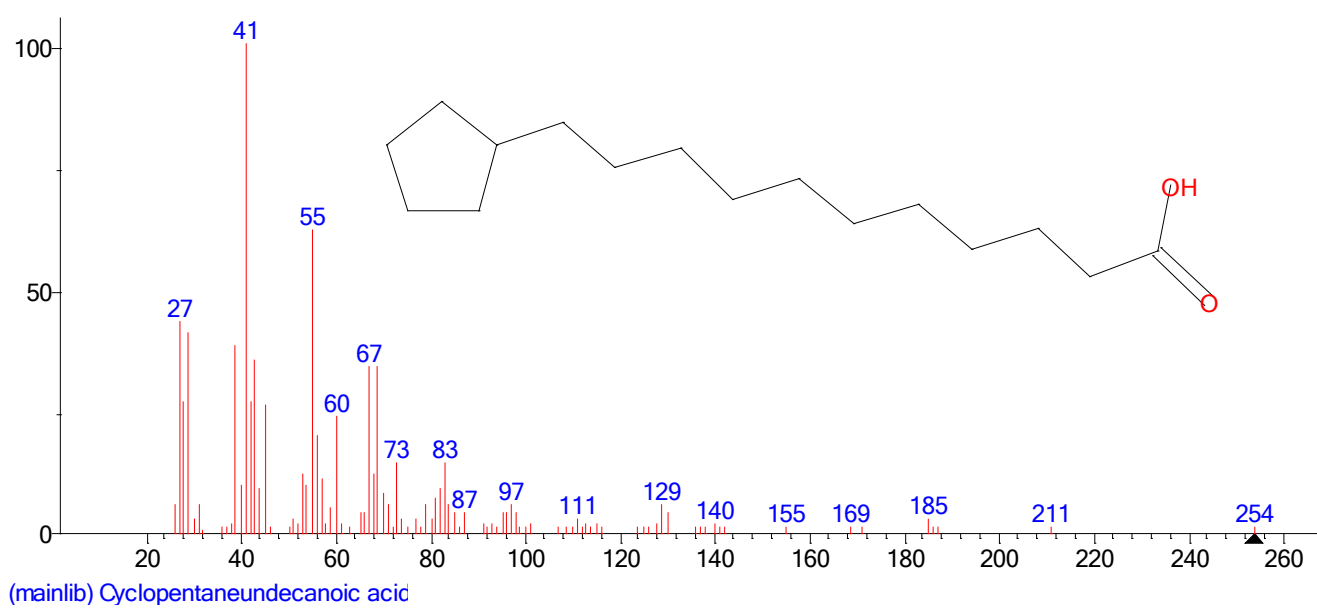
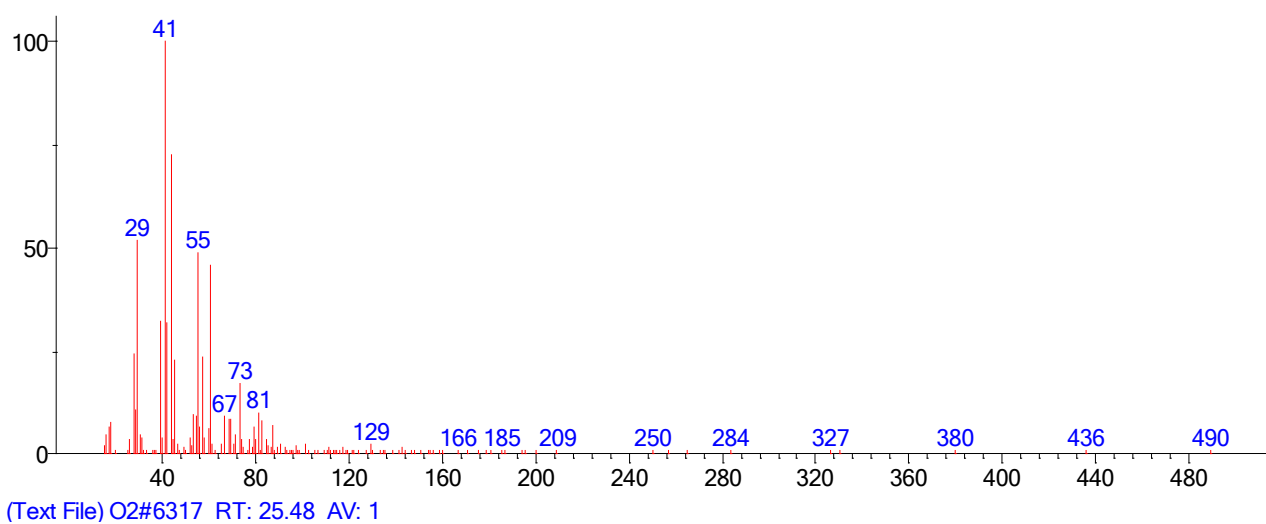
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 22.57



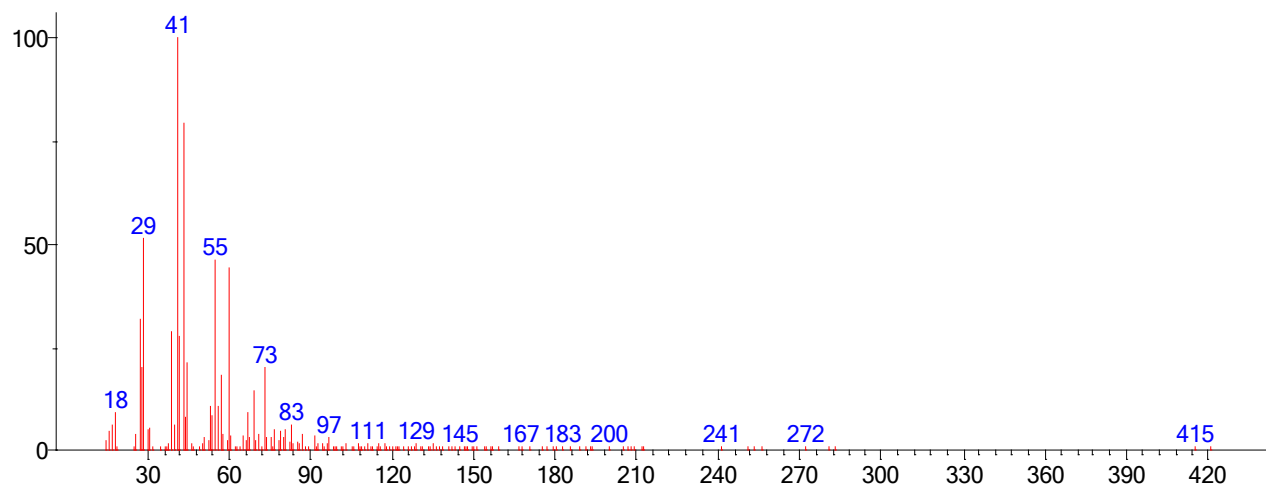
(Text File) O2#5458 RT: 22.56 AV: 1



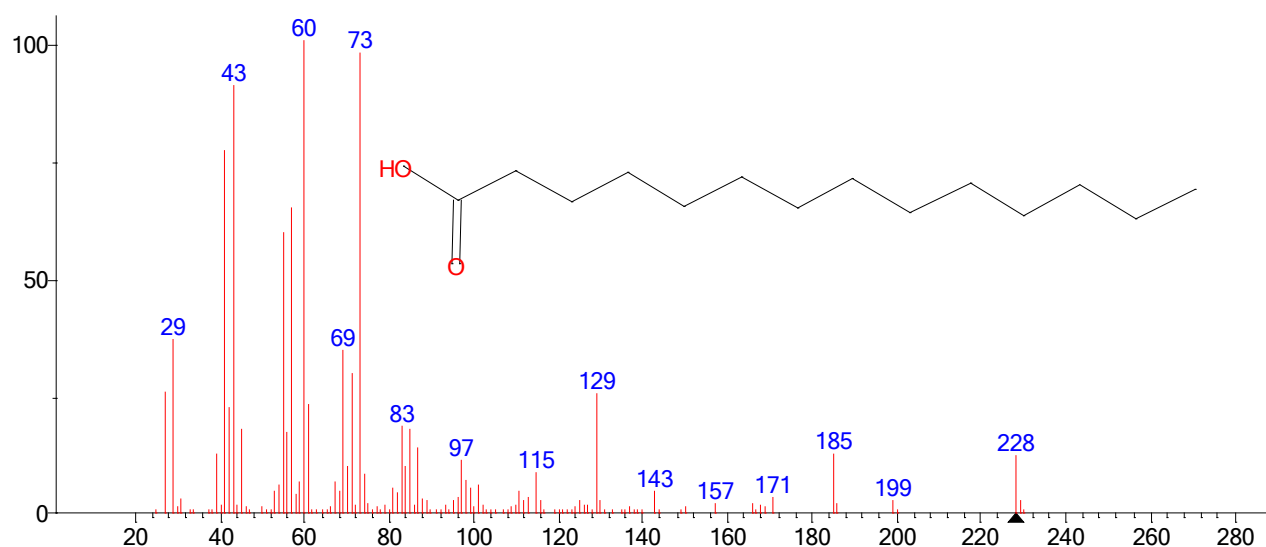
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.48



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.52

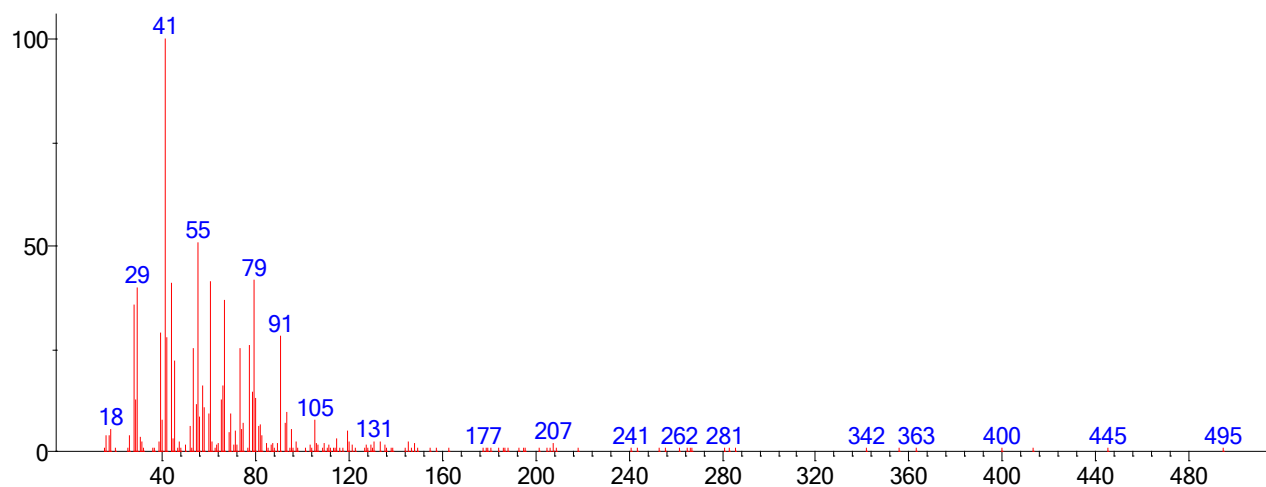


(Text File) O2#6313-6329 RT: 25.47-25.52 AV: 17

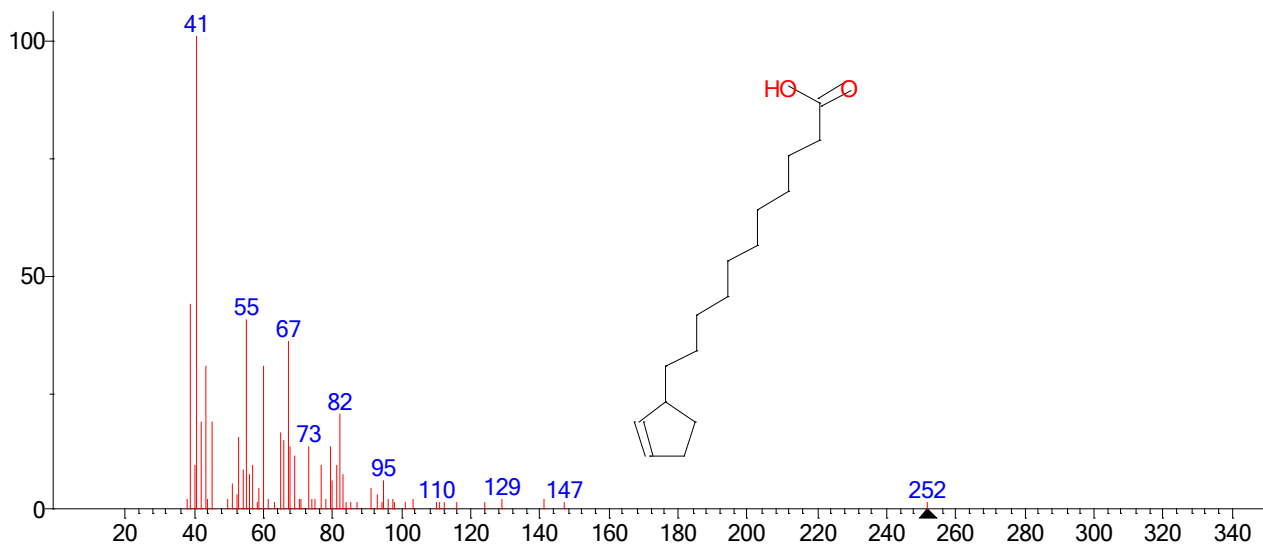


(wiley9) TETRADECANOIC ACID

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 28.94

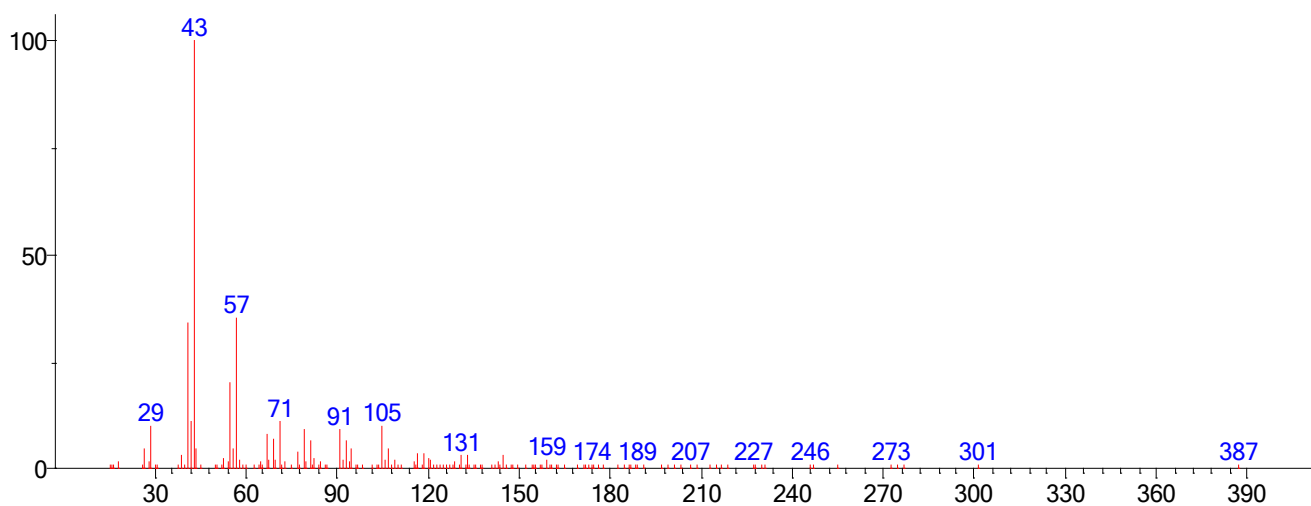


(Text File) O2#7335 RT: 28.94 AV: 1

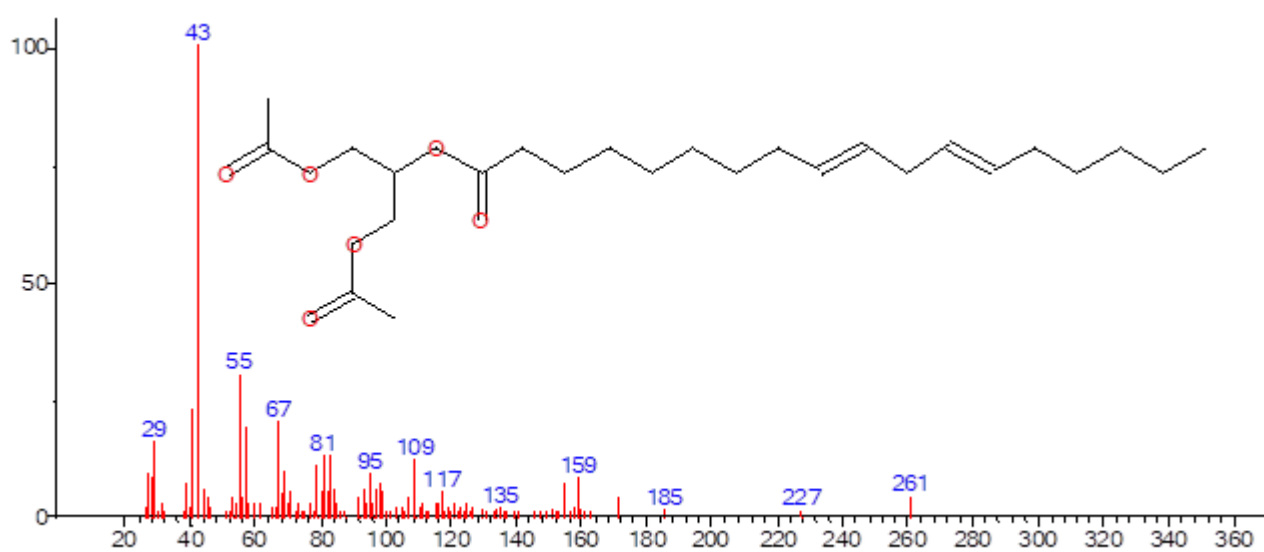


(mainlib) 11-(2-Cyclopenten-1-yl)undecanoic acid, (+)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 49.70

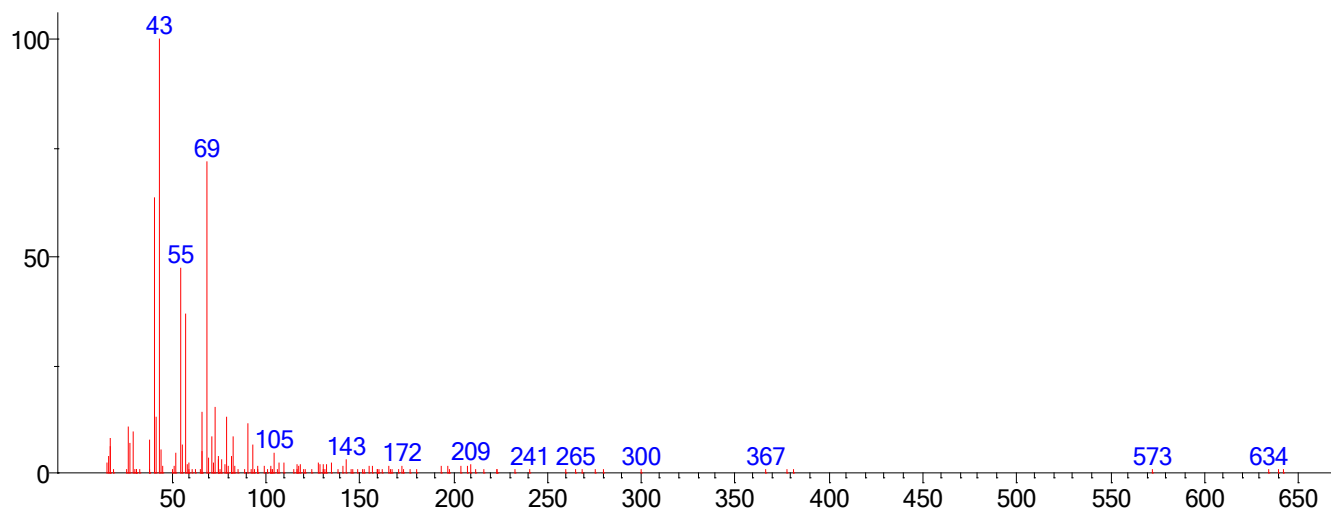


(Text File) O2#13505 RT: 49.93 AV: 1

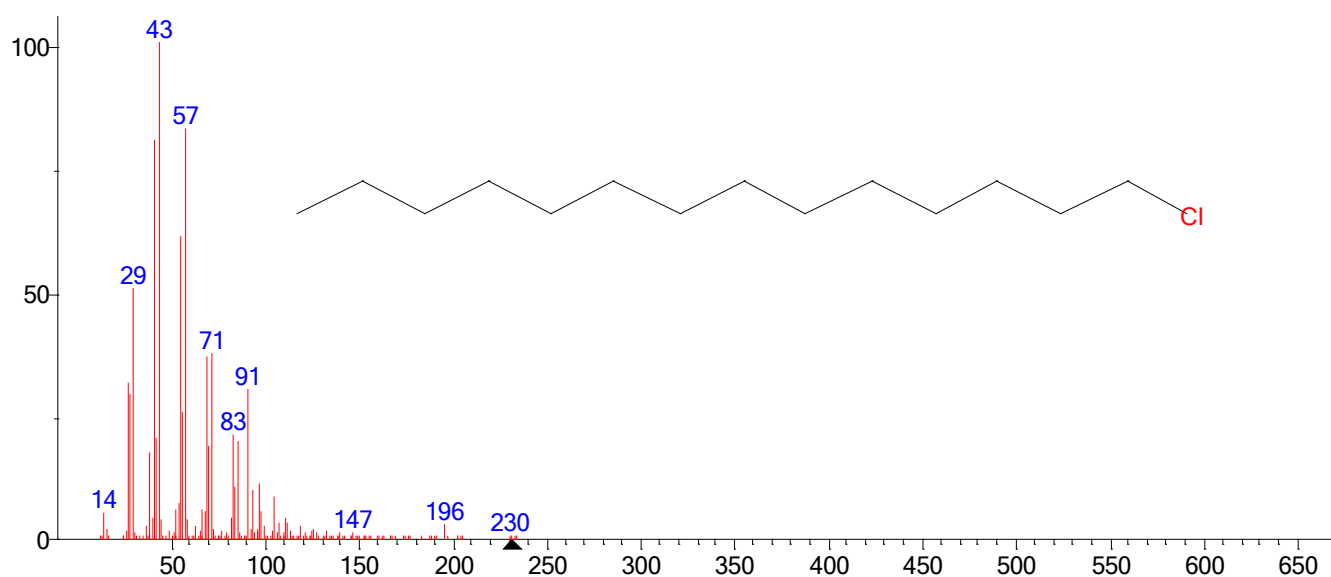


(mainlib) 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z), 2-(acetyloxy)-1-[(acetyloxy)methyl]ethyl ester

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 52.01



(Text File) O2#14102 RT: 51.96 AV: 1



(wiley9) Tetradecane, 1-chloro- (CAS)

### Выводы:

В образце Э-31-17/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- ненасыщенные углеводороды;
- кислородсодержащие соединения (кетоны, эфир, гидроксикетоны);
- жирные кислоты;
- глицерид.