

ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ образца Э-31-18/2020

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
Испаритель: Температура, °C [250 °C, 1 мин; 10 °C/мин, 280 °C]
МСД: Температура, °C [250 °C, 0 мин]

Пробоподготовка:

Экстрагент: ацетон/этанол/диэтиловый эфир (3/1/1об.).

Экстракция: 50 г образца + 50 мл экстрагента.

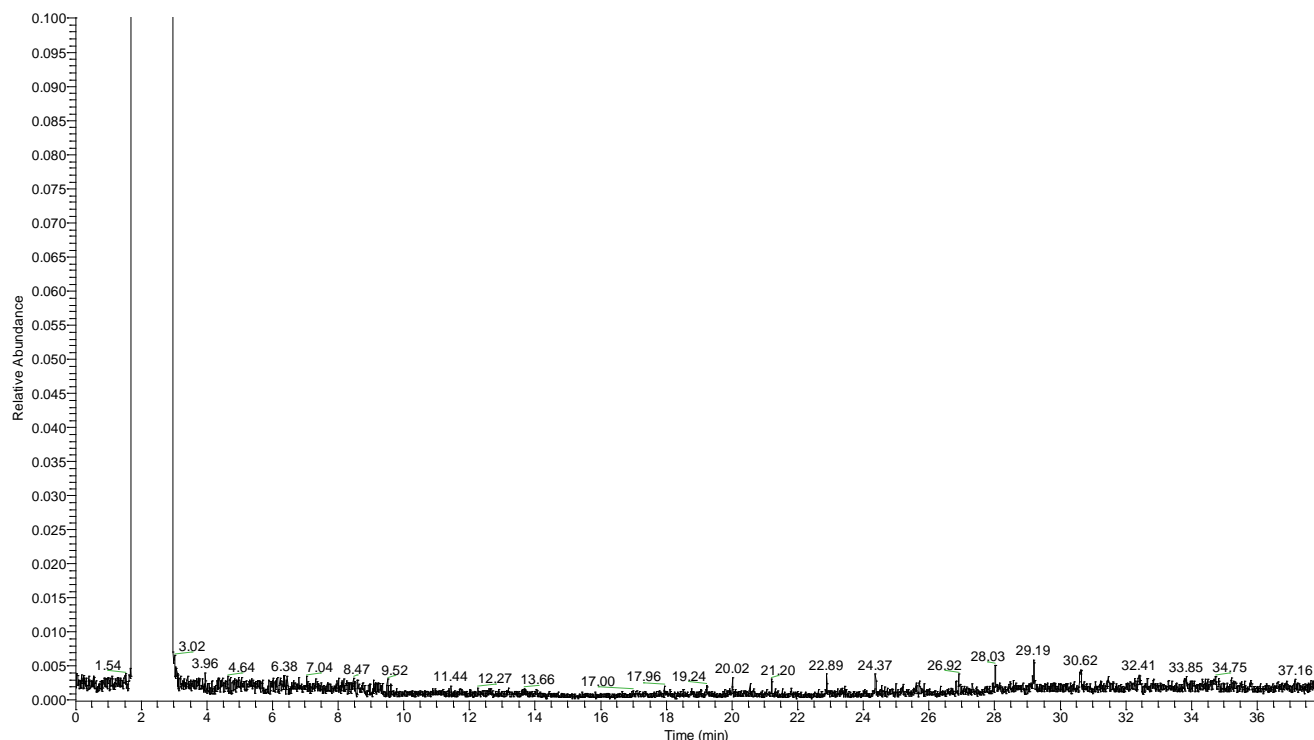
Время экстракции: 1 сутки.

Объем закола: 0.5 мкл.

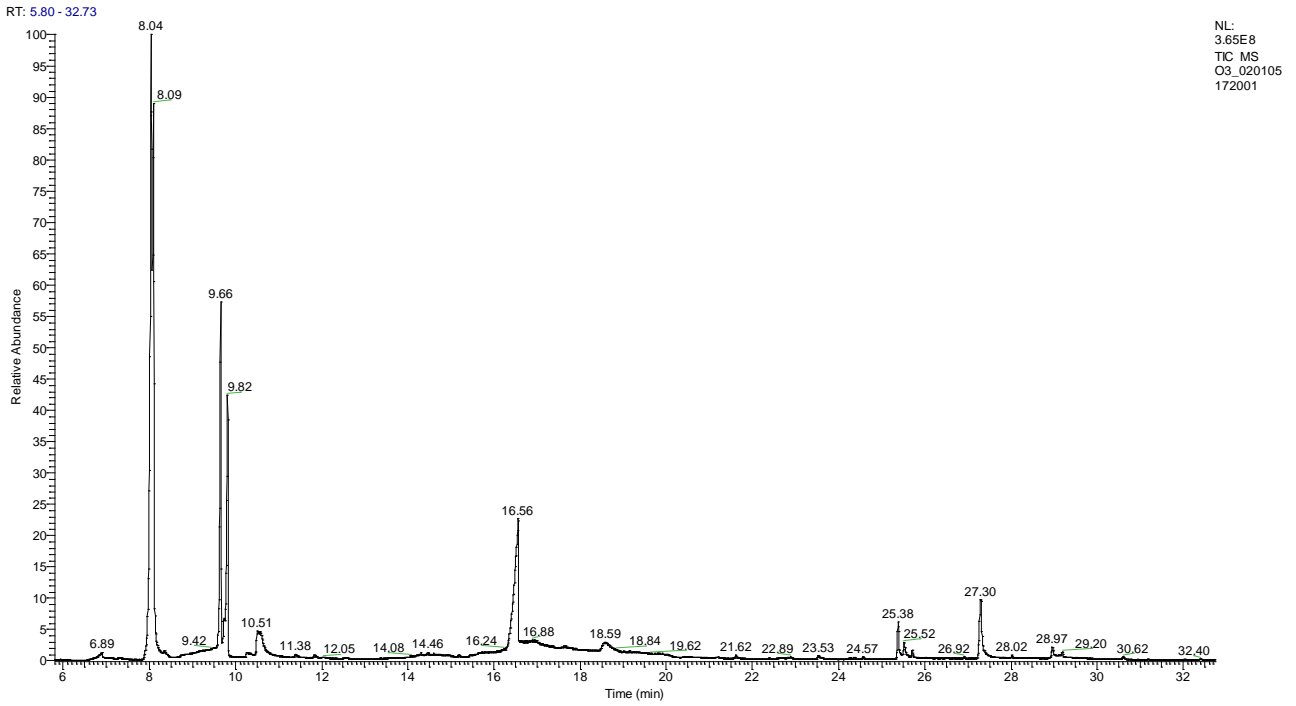
Задержка МС-детектирования: 4 мин.

Хроматограмма экстрагента:

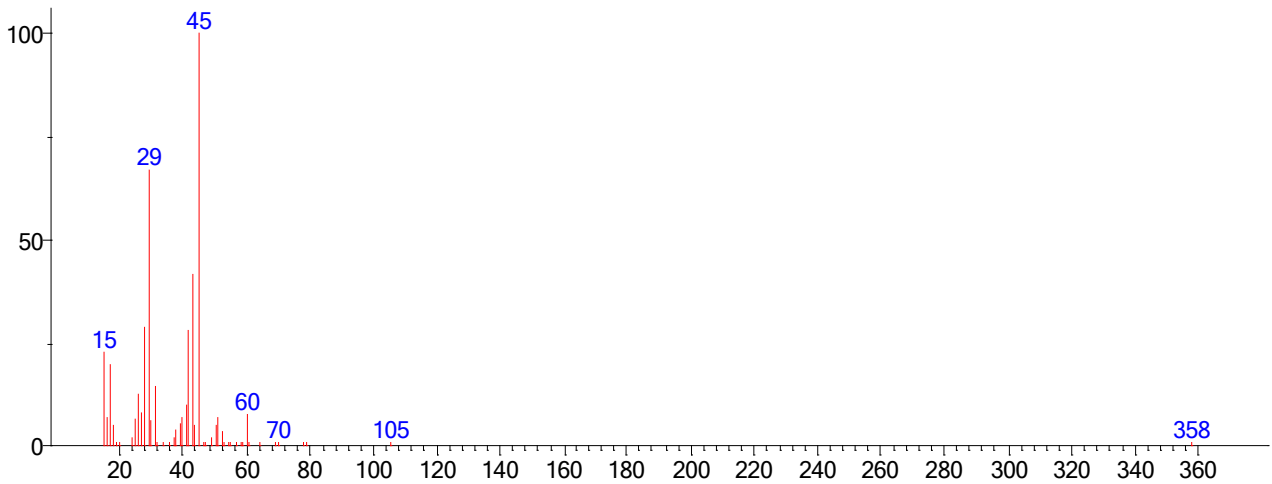
RT: 0.00 - 37.85



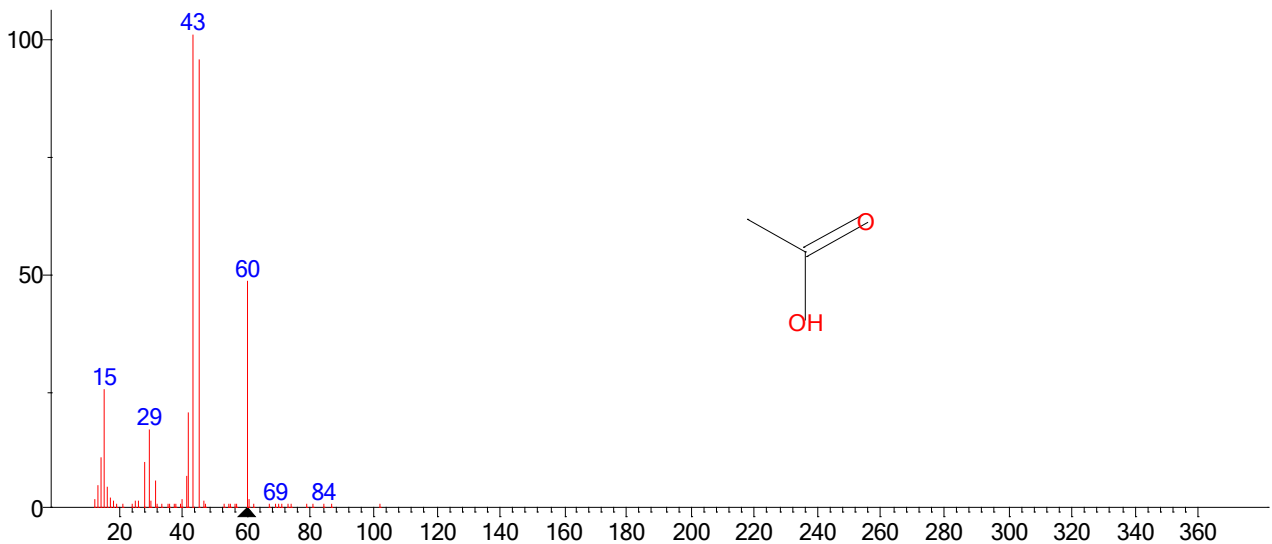
Общая хроматограмма образца:



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 6.89

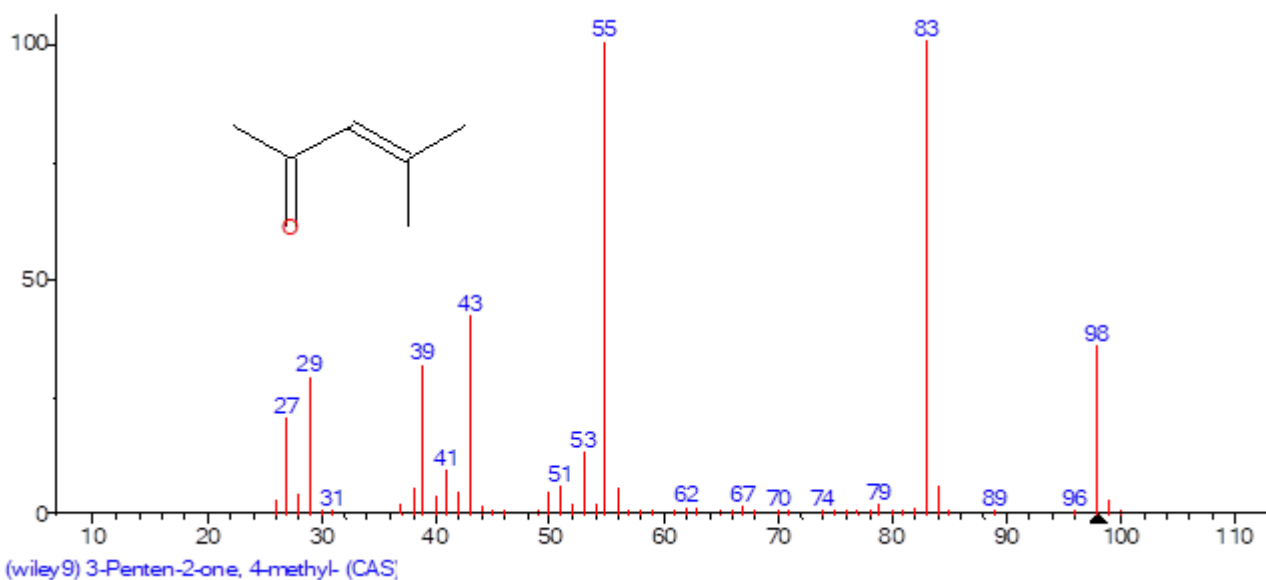
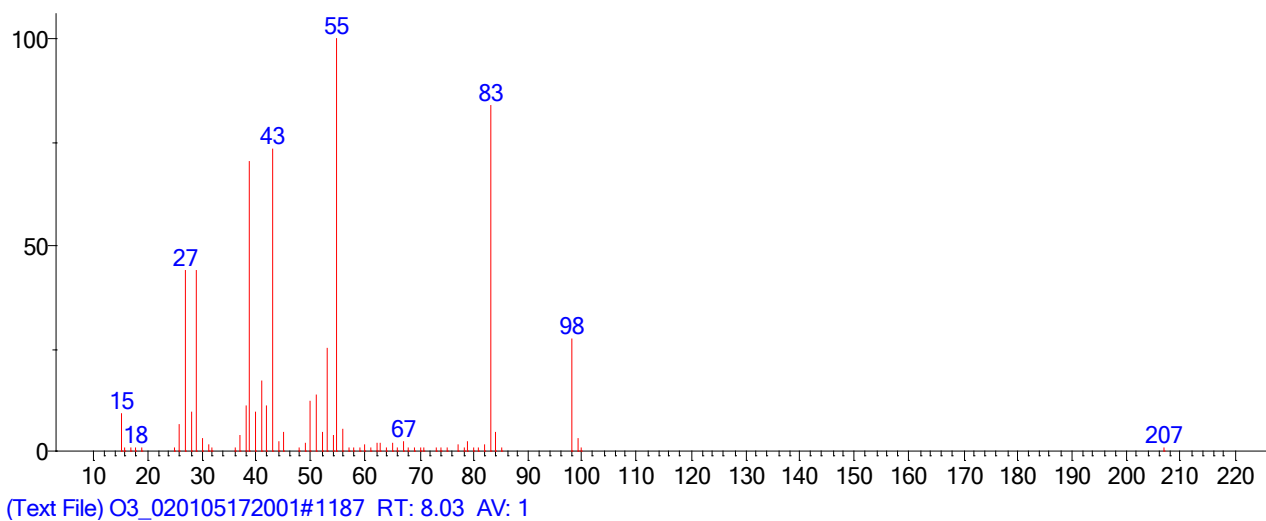


(Text File) O3_020105172001#851 RT: 6.89 AV: 1

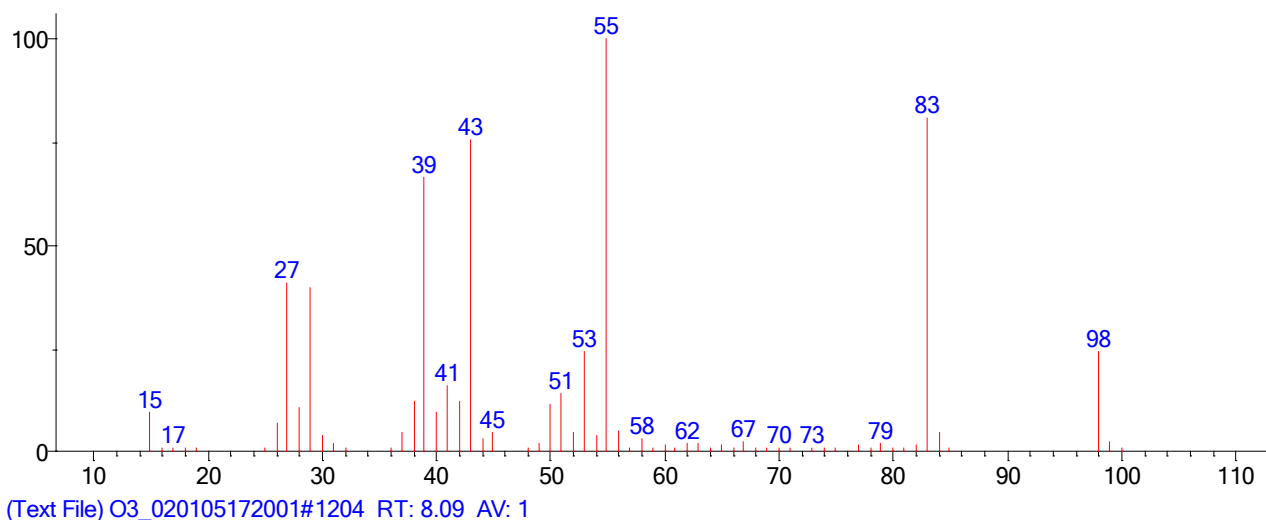


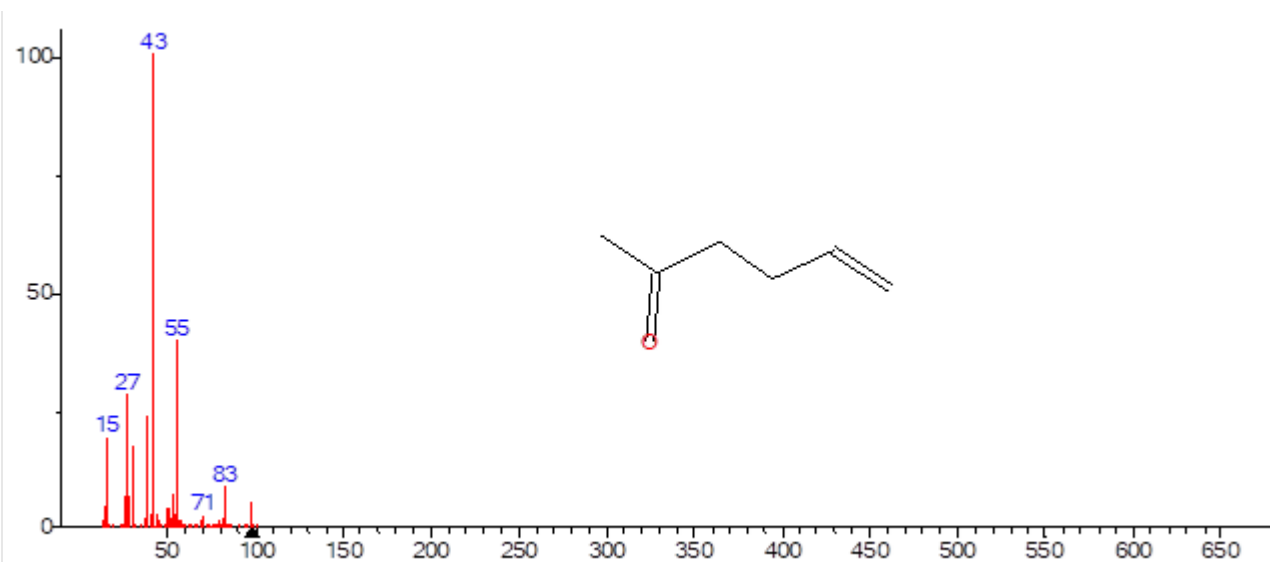
(replib) Acetic acid

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.04



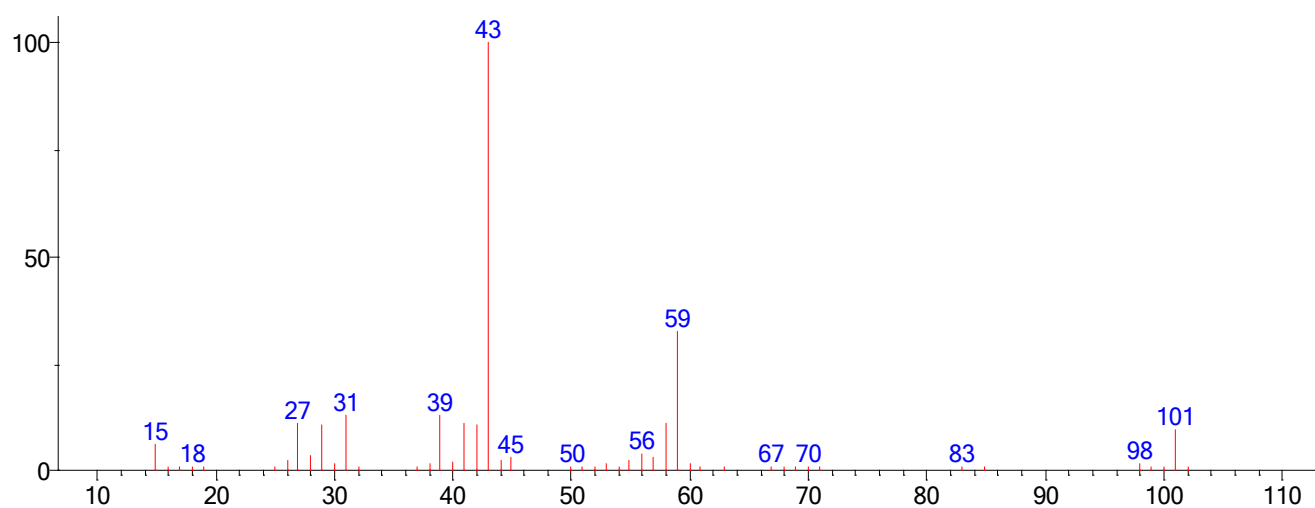
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 8.09



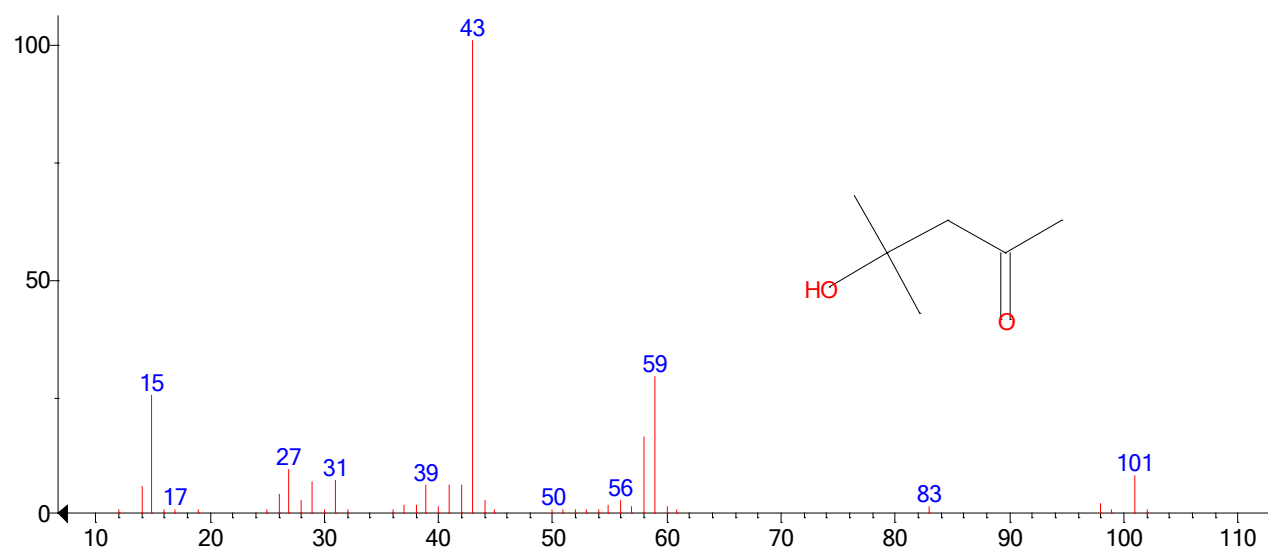


(wiley9) 5-Hexen-2-one (CAS)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 9.66

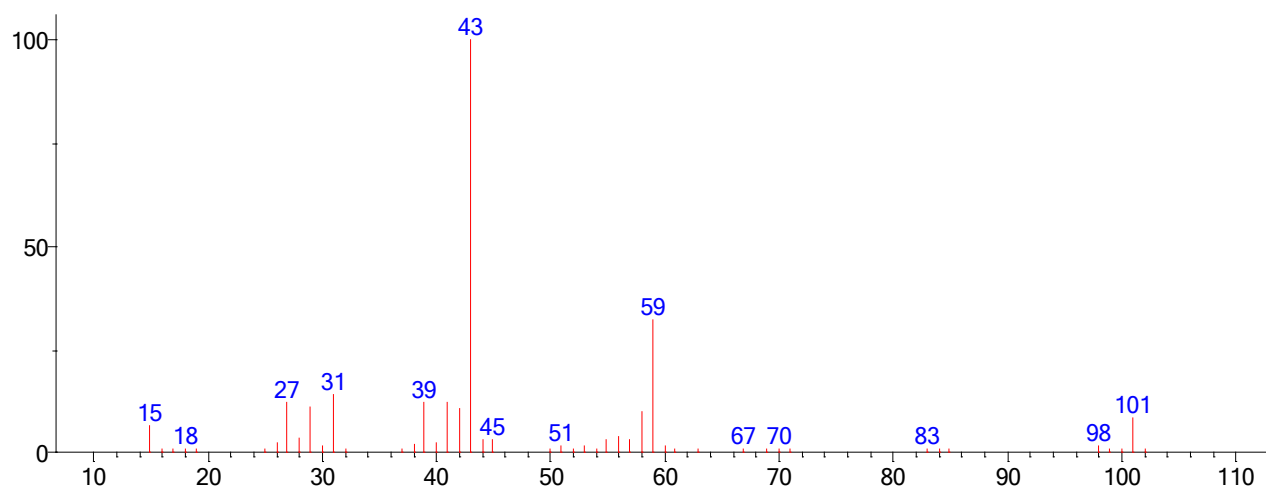


(Text File) O3_020105172001#1662 RT: 9.65 AV: 1

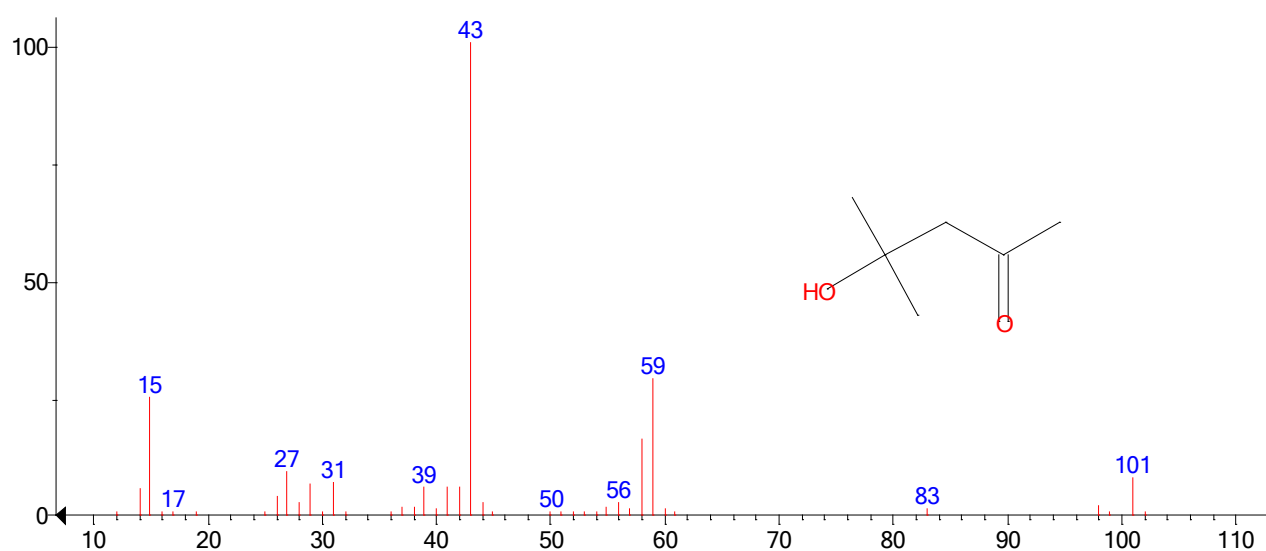


(wiley9) 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl- (CAS)

Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 9.82

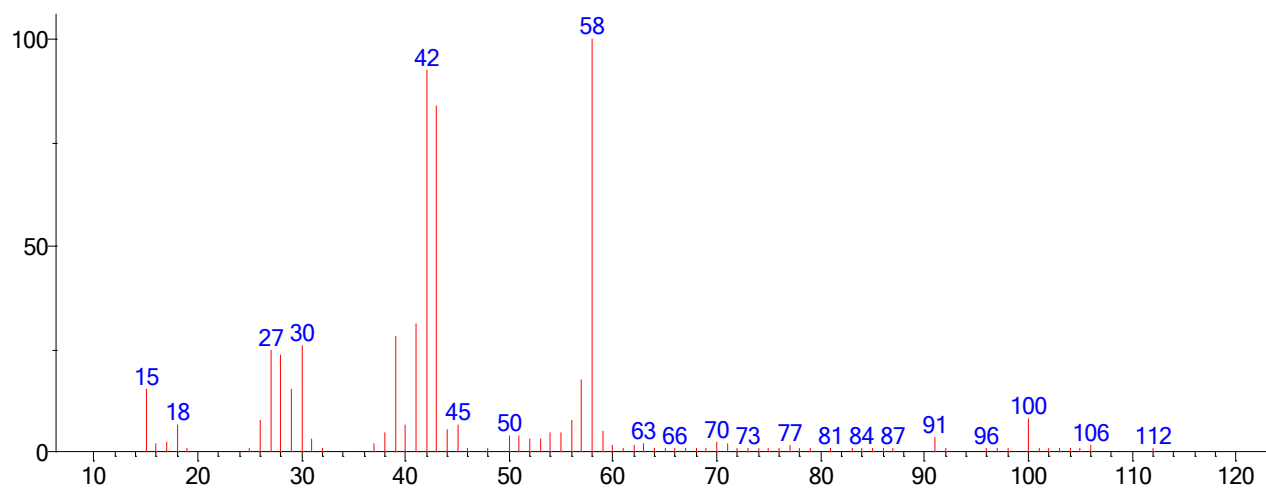


(Text File) O3_020105172001#1709 RT: 9.81 AV: 1

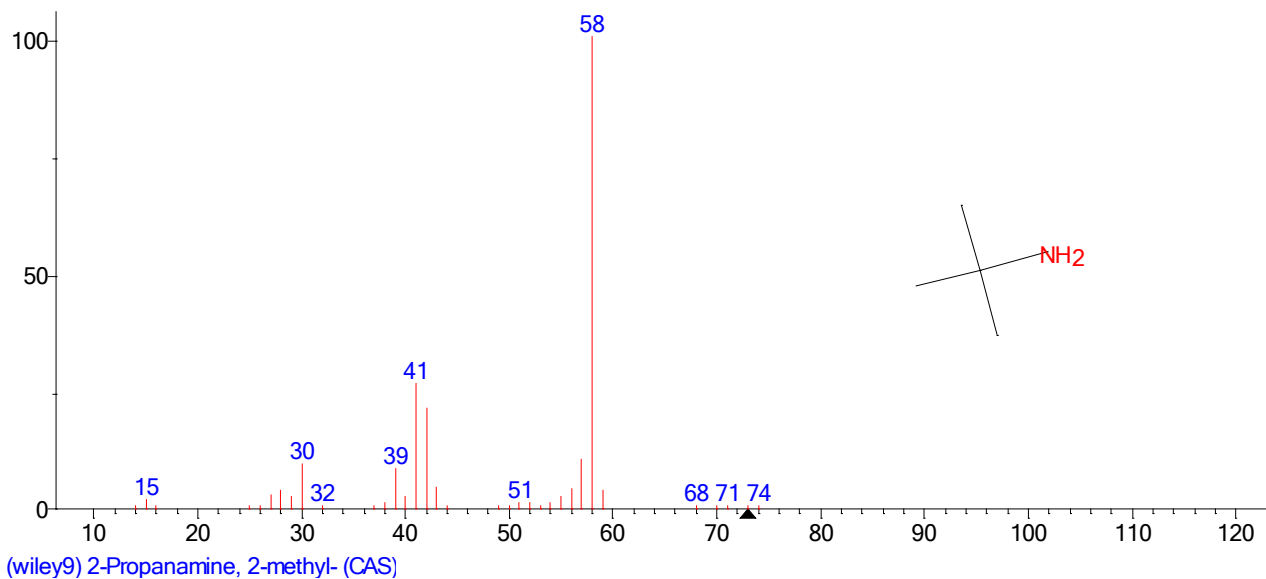


(wiley9) 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl- (CAS)

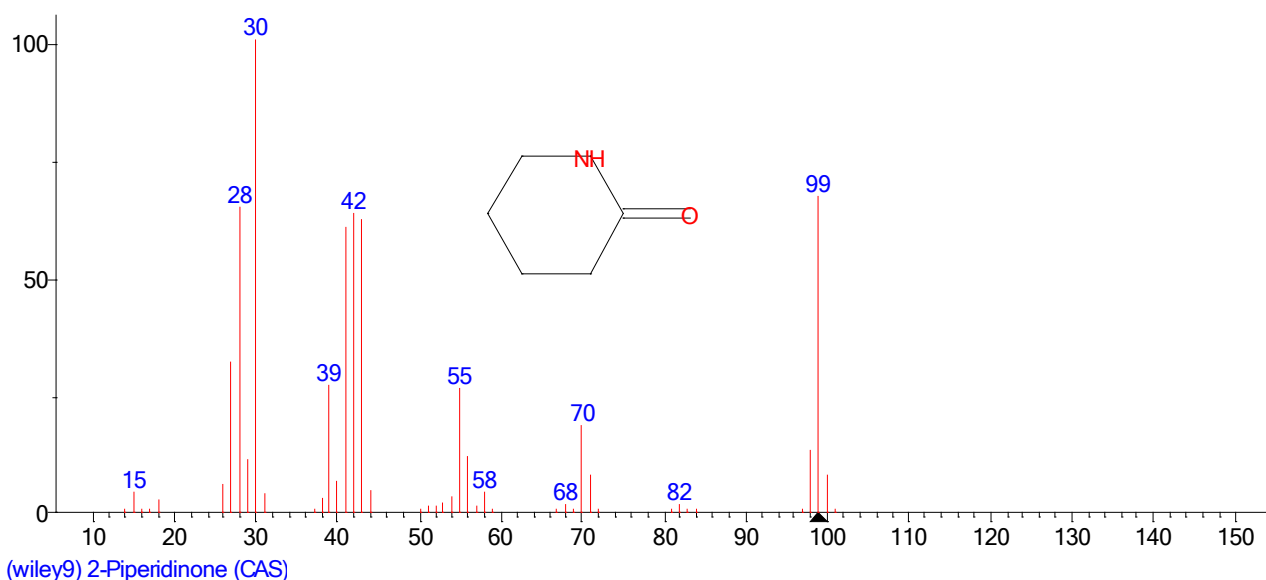
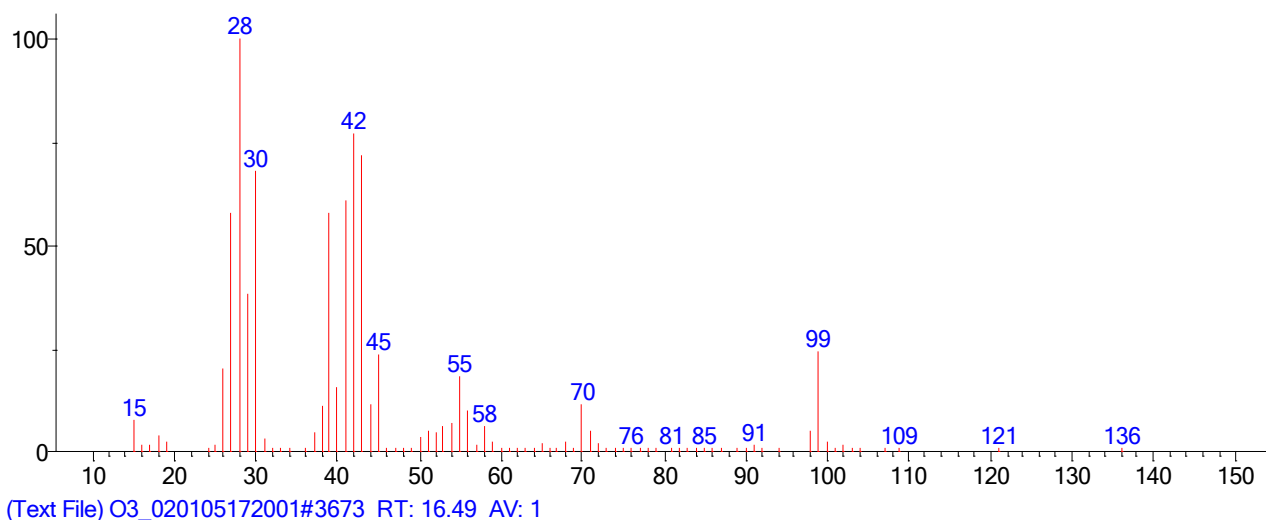
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 10.51



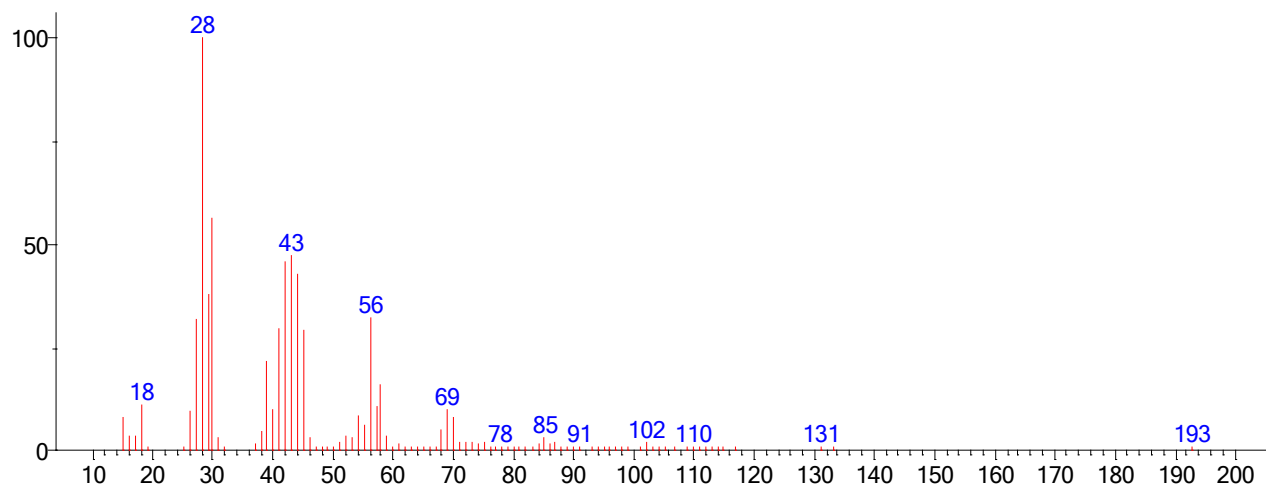
(Text File) O3_020105172001#1917 RT: 10.52 AV: 1



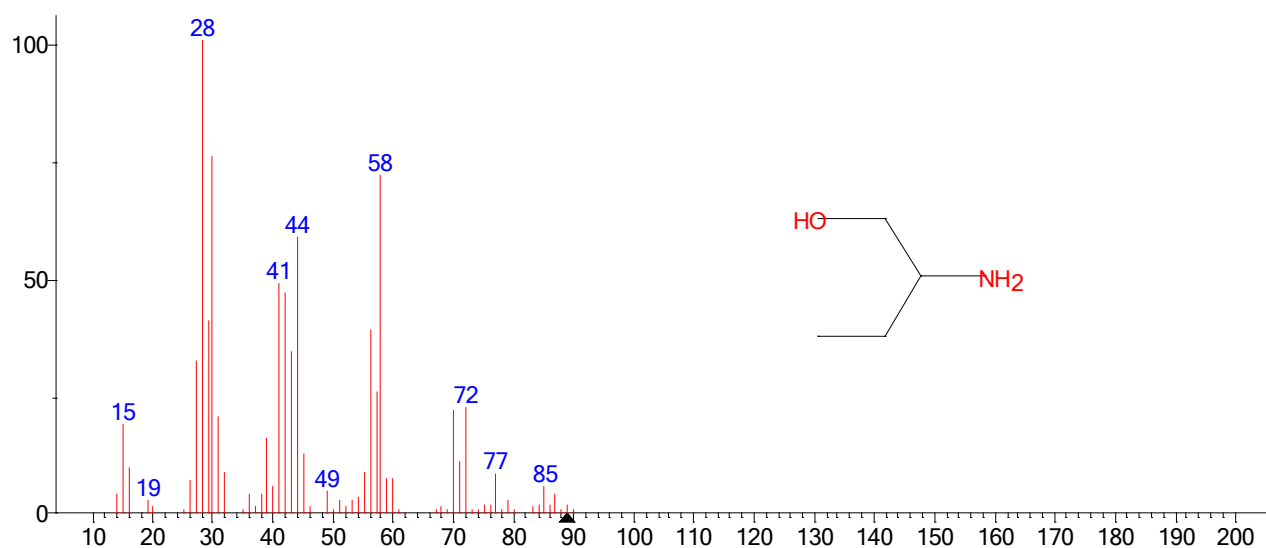
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 16.56



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 18.59

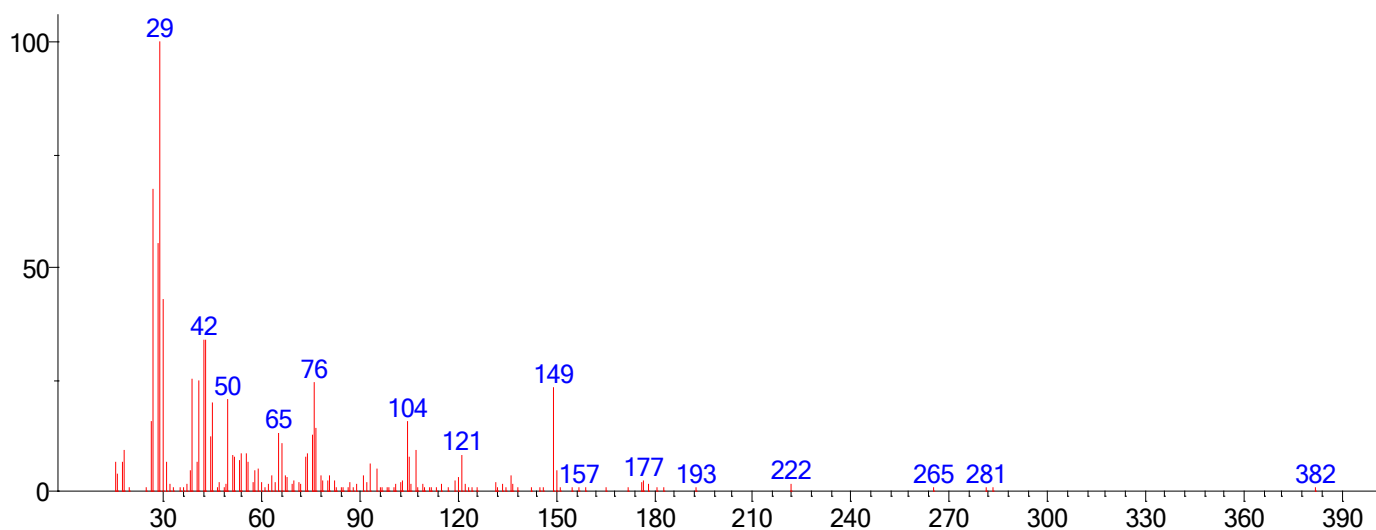


(Text File) O3_020105172001#4267-4309 RT: 18.51-18.65 AV: 43

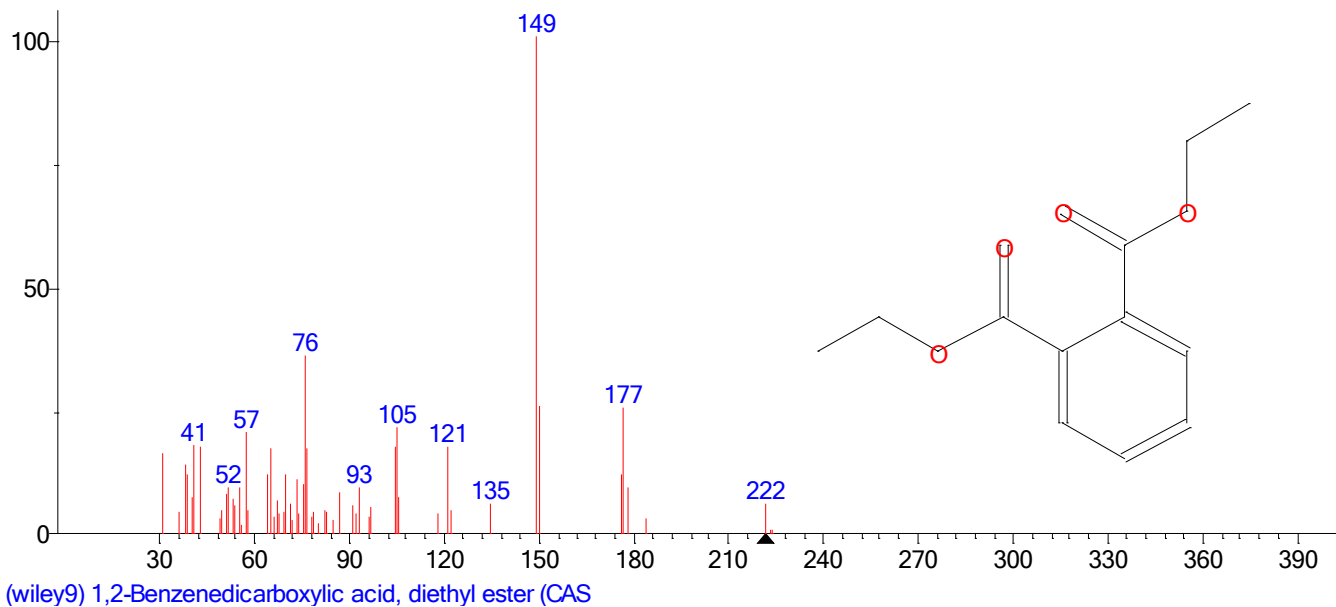


(wiley9) 1-Butanol, 2-amino- (CAS)

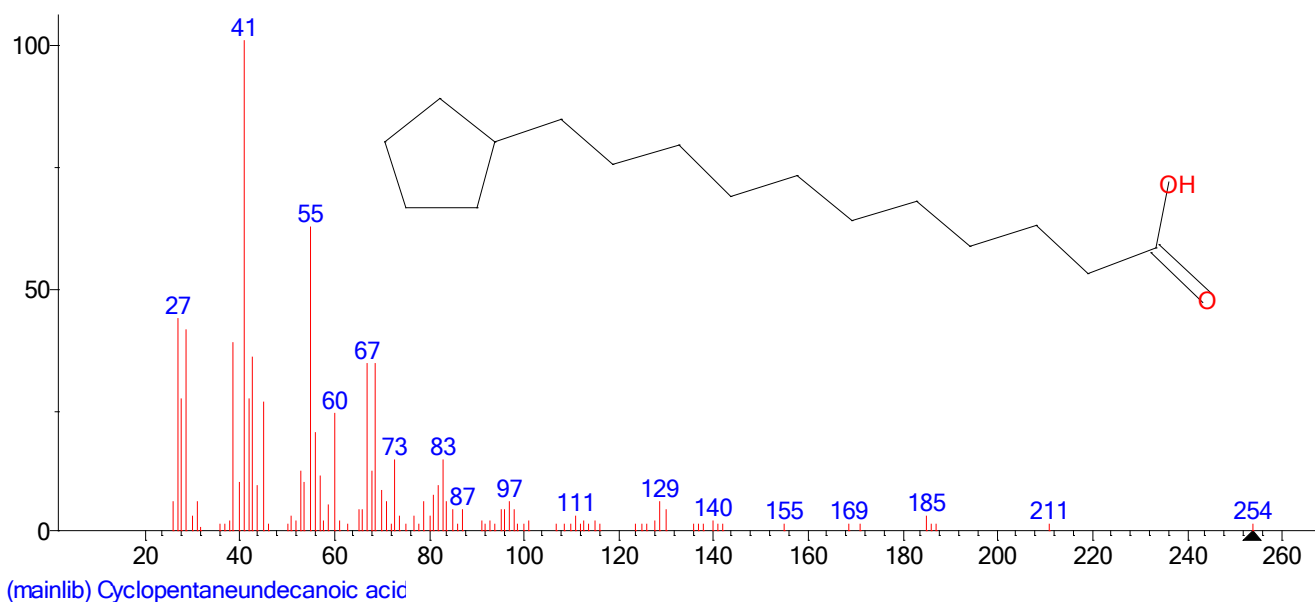
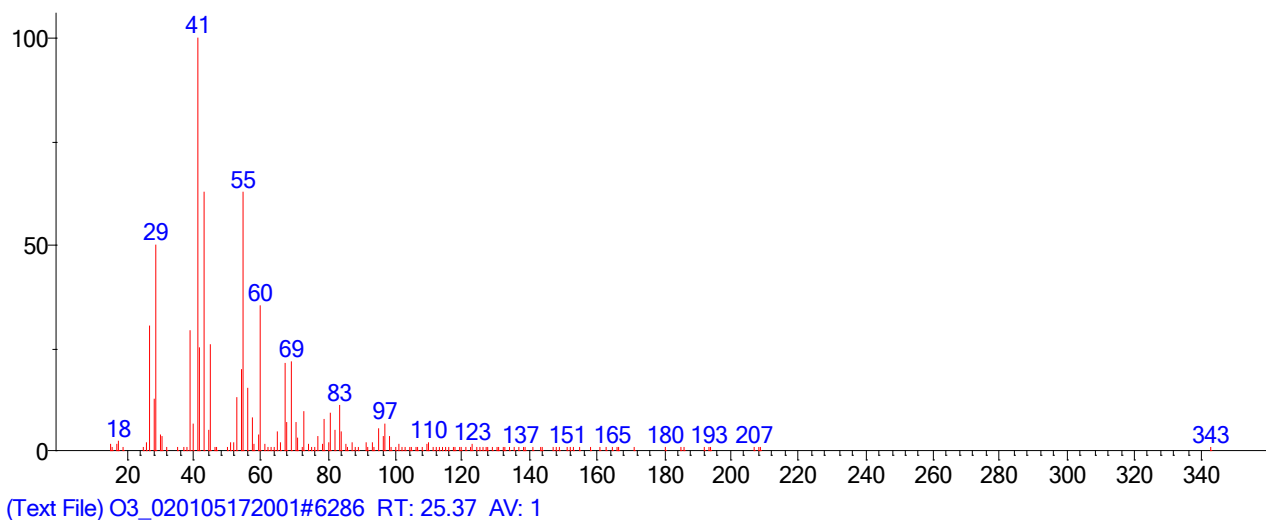
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 21.62



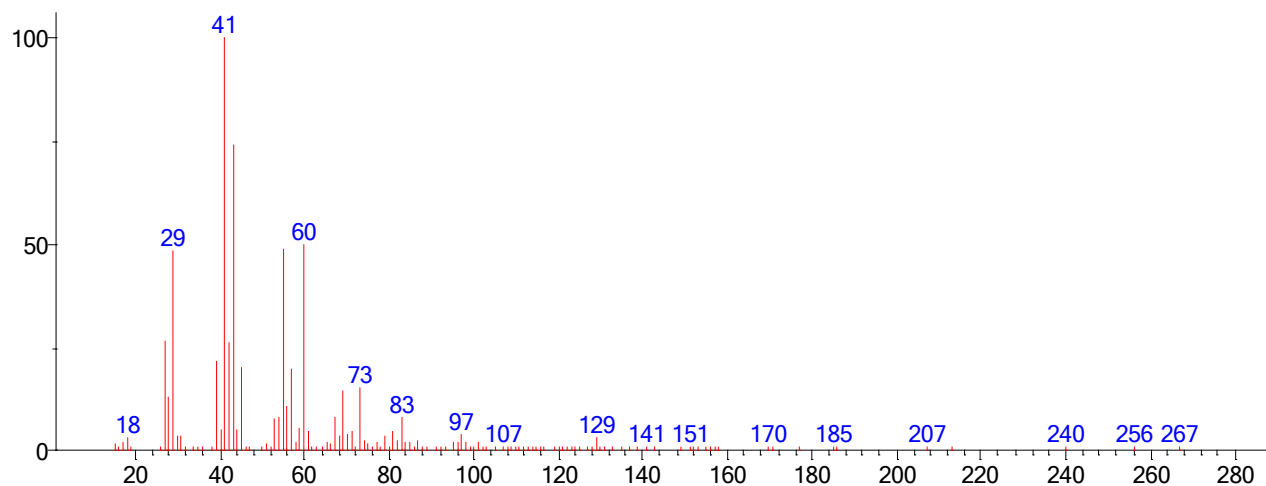
(Text File) O3_020105172001#5180 RT: 21.61 AV: 1



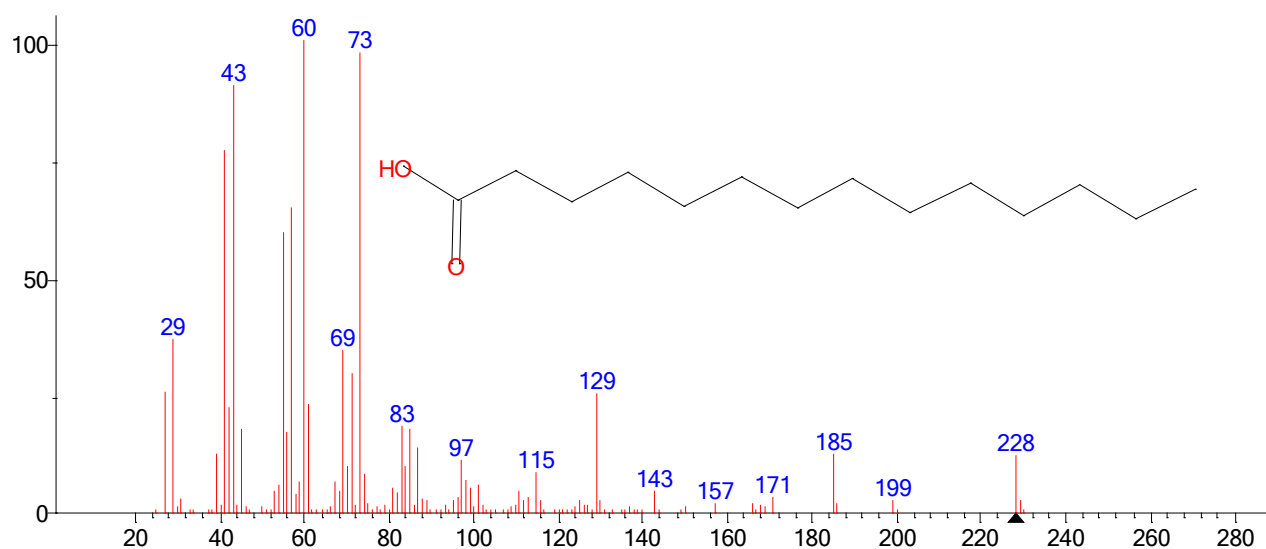
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.38



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 25.52

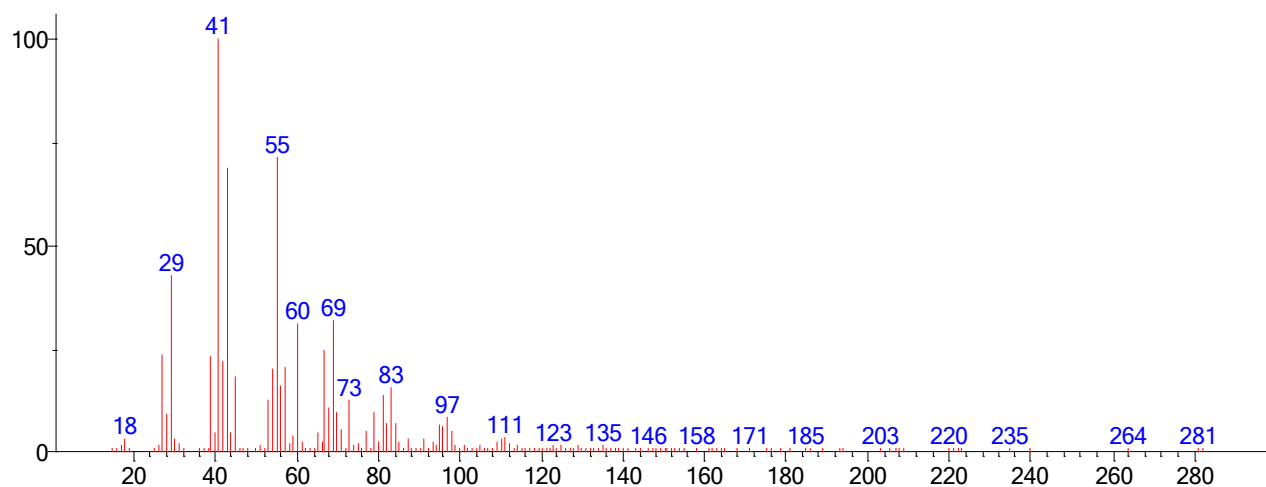


(Text File) O3_020105172001#6328 RT: 25.52 AV: 1

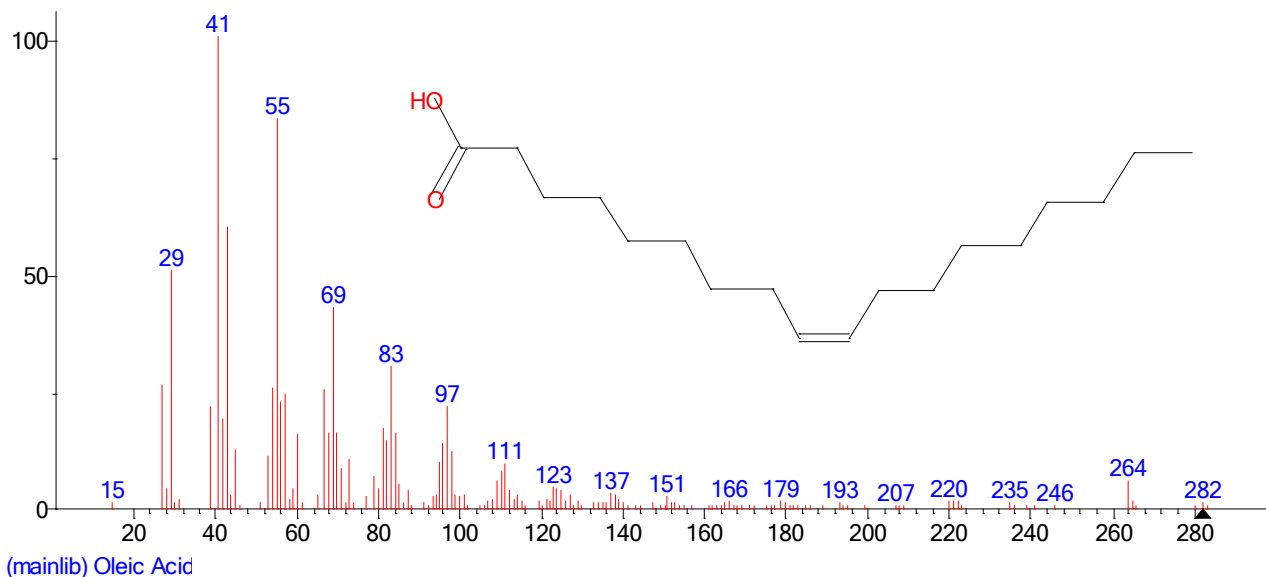


(wiley9) TETRADECANOIC ACID

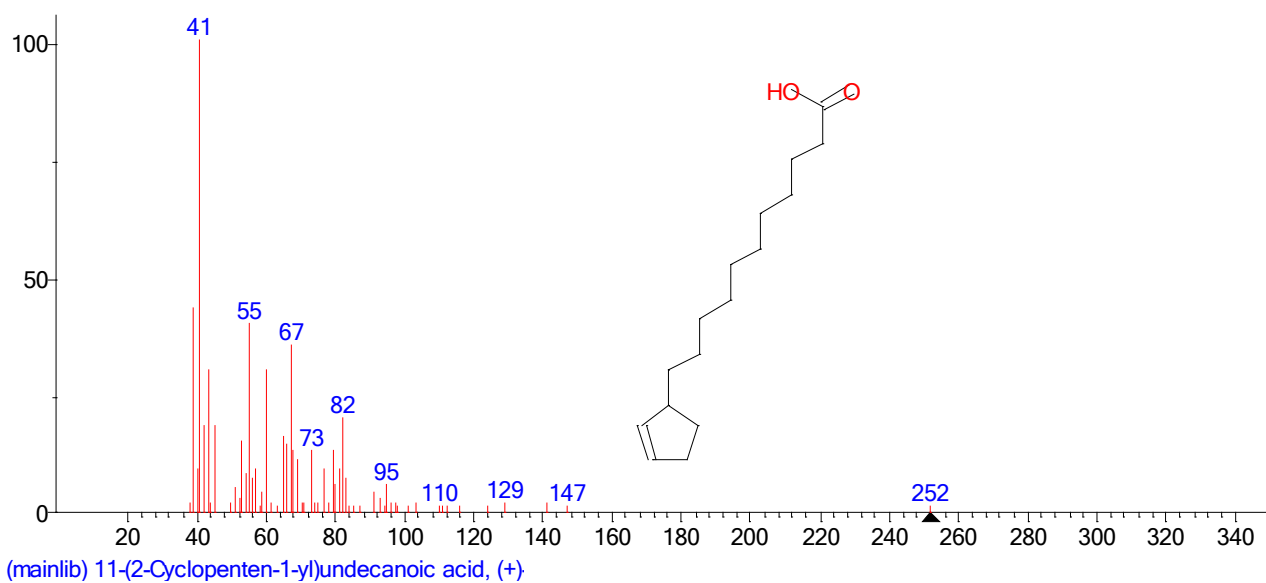
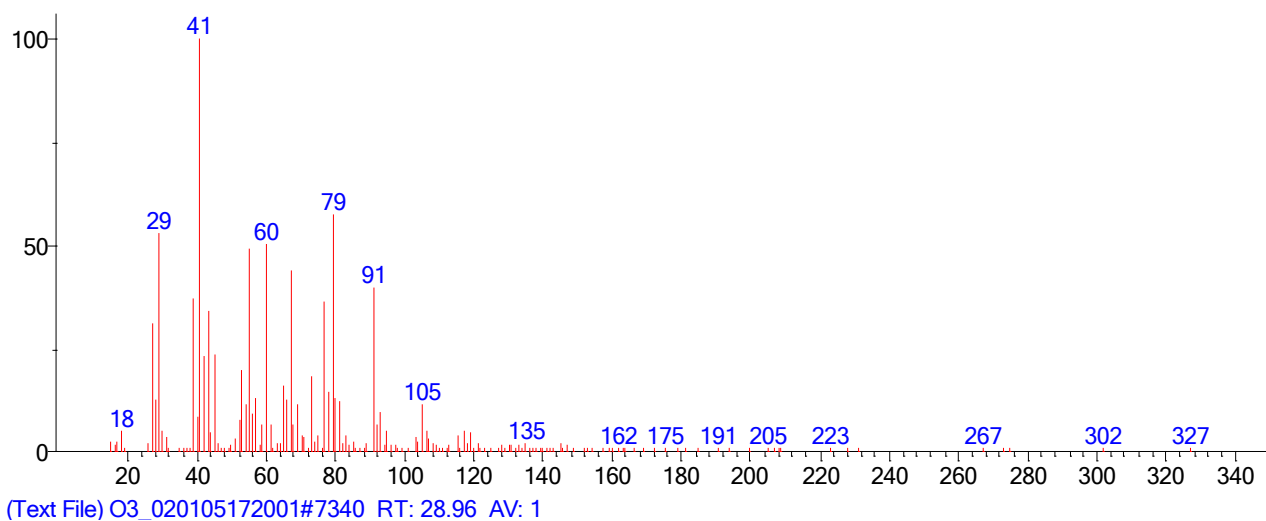
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 27.30



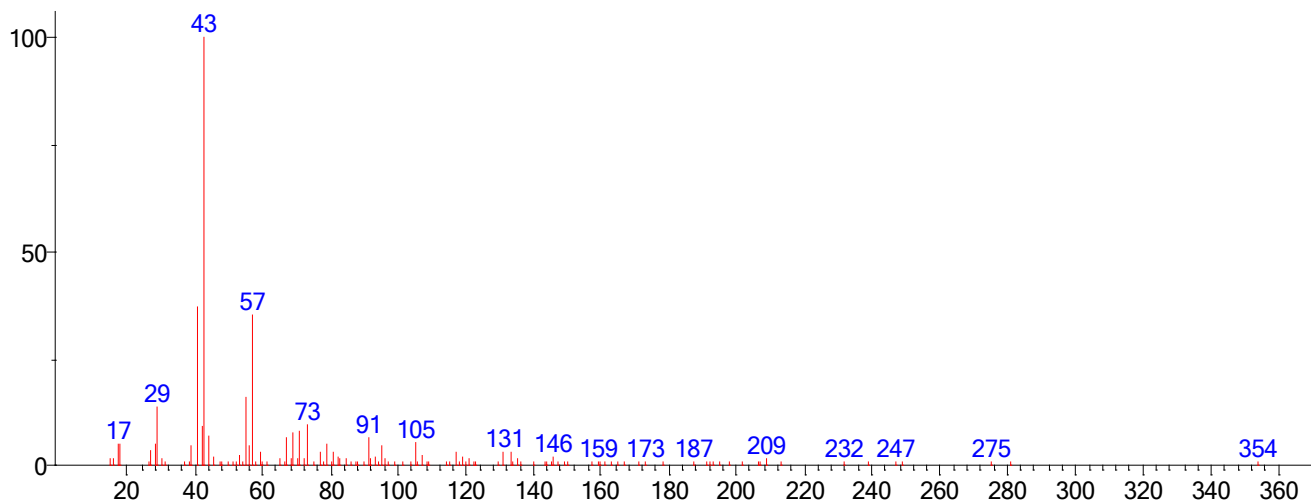
(Text File) O3_020105172001#6849 RT: 27.29 AV: 1



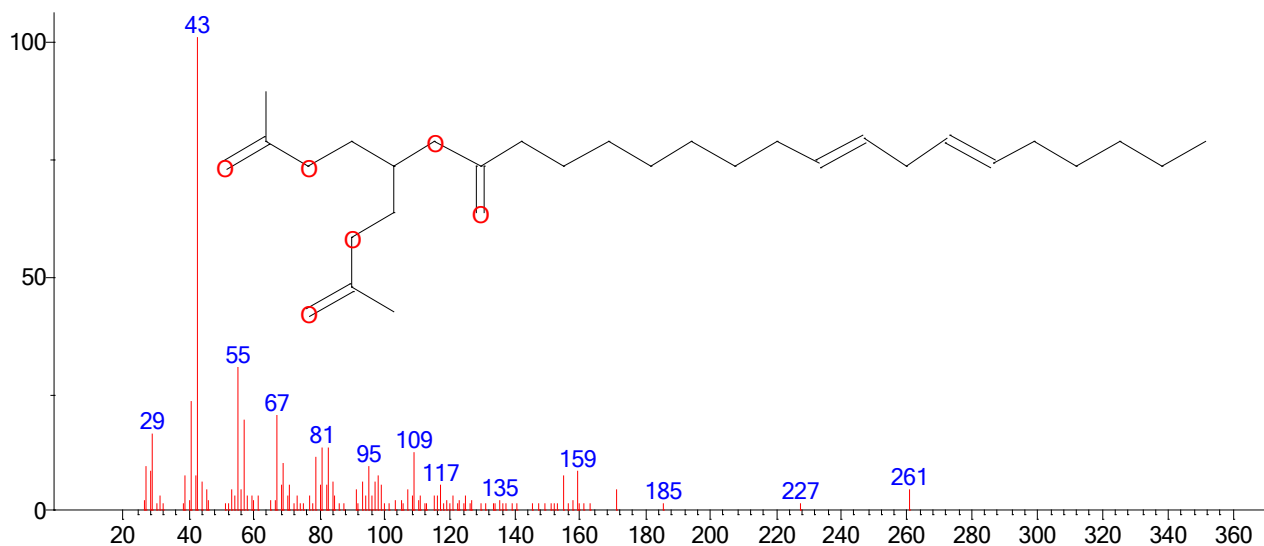
Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 28.97



Идентификация по масс-спектру пика на времени выхода: 49.70



(Text File) O3_020105172001#13440 RT: 49.70 AV: 1



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

Выводы:

В образце Э-31-18/2020 в ходе МС-анализа были обнаружены и идентифицированы следующие группы компонентов:

- кислородсодержащие соединения (ангидрид, кетоны, гидроксикетоны);
- азотсодержащие соединения (амин, гидроксиамин, 2-пиперидинон)
- жирные кислоты (C13-C18);
- глицерид.