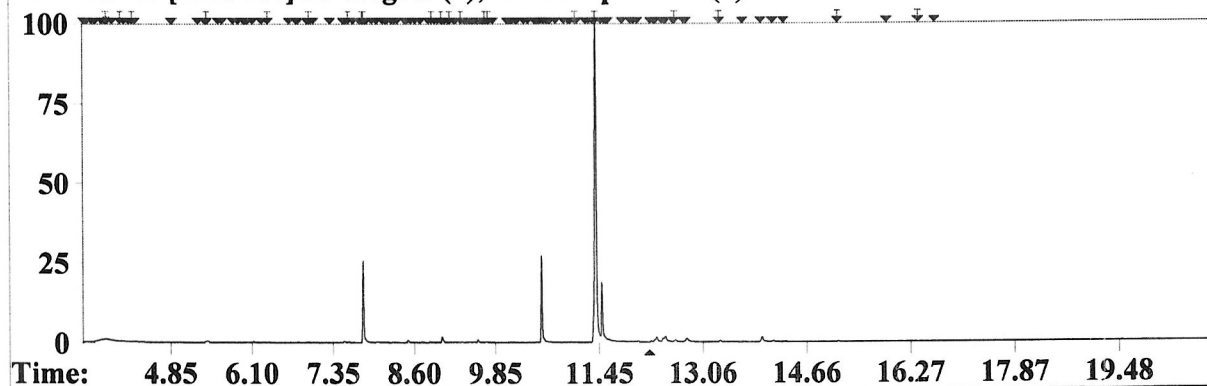


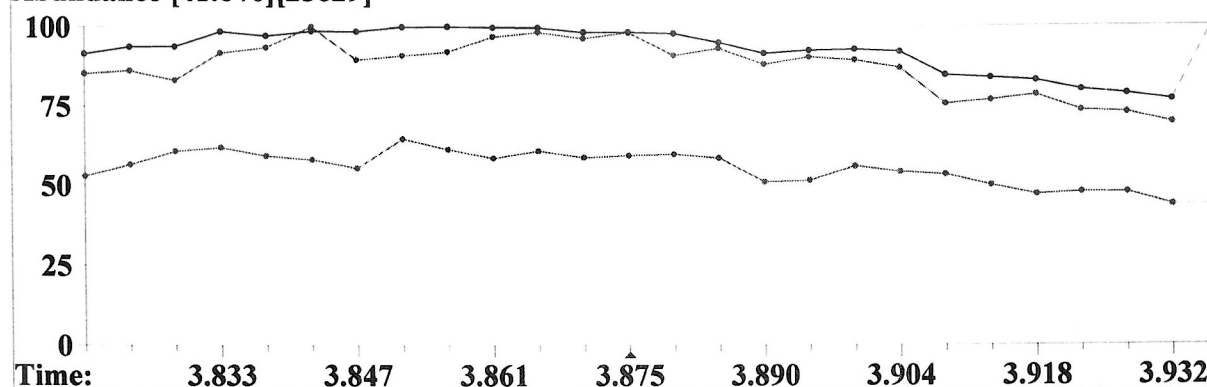
Abundance [2265714] 23 targets (-), 191 components (-)

TIC



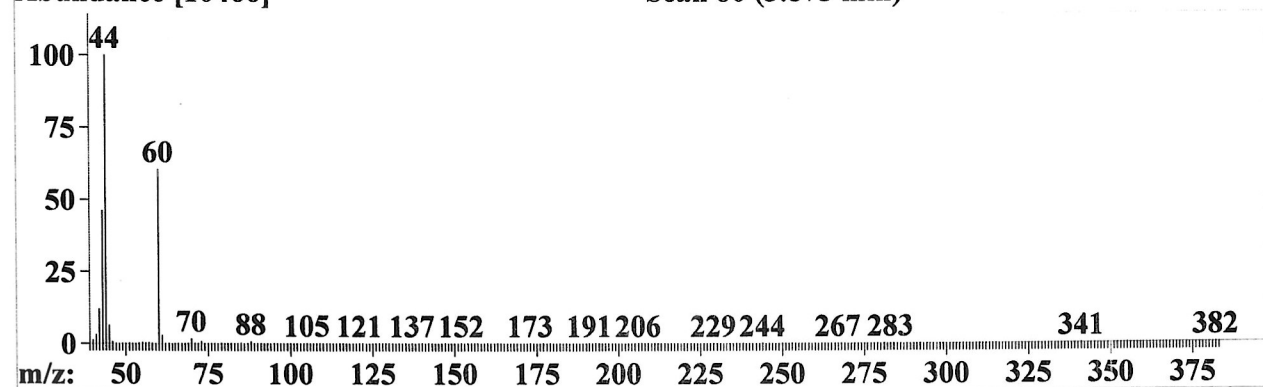
Abundance [41.6%][25629]

TIC

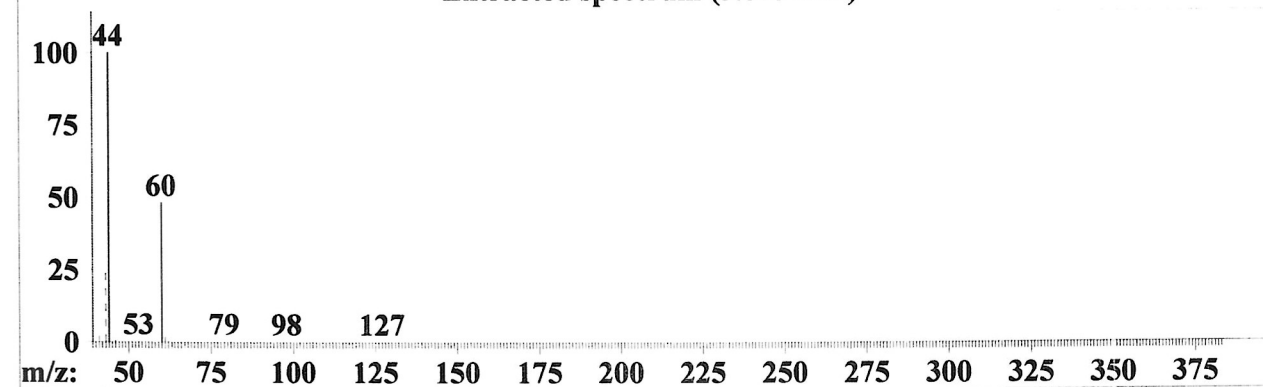


Abundance [10466]

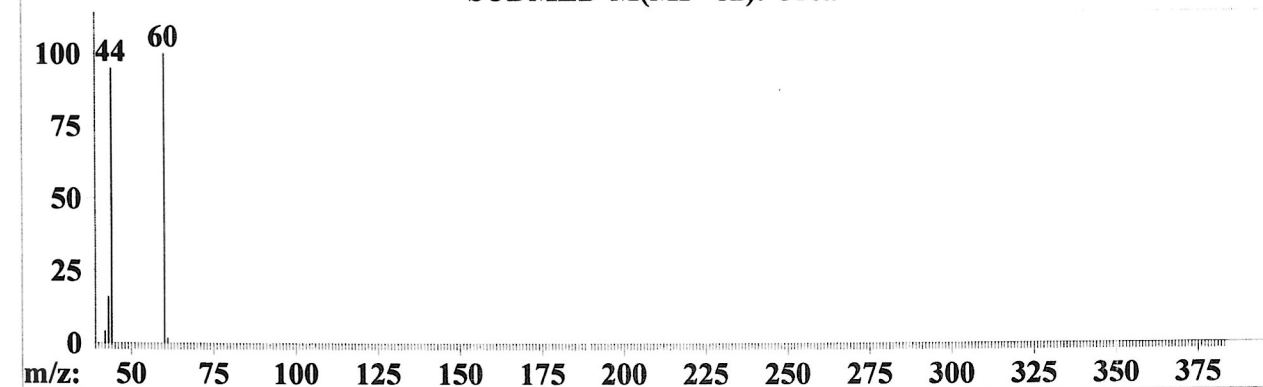
Scan 80 (3.875 min)



Extracted spectrum (3.873 min)



SUDMED-M(MF=82): Urea



AMDIS GC/MS Analysis Report

Data: 2023-04-21 17-08-41 2809 000067.CDF

Library: C:\NIST20\AMDIS32\LIB\SUDMED-MS_3285_AMDISLIB_20220601.MSP

Number of Identifications: 23

<u>RT(min)</u>	<u>Hits</u>	<u>Chemical Name</u>
3.8730		Urea (ID#:57-13-6)
4.0920		?? Furanamine, N-Acetyl- (ID#:0-00-0)
4.2715	2	?? N-Allylmephedrone (ID#:16142-17-0) ?? N-Allylmethylone (ID#:18452-47-0)
5.4191		?? MEPROBAMATE artefact 1 7.788 min (ID#:0-00-0)
6.3544	11	? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4) ? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4) ? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2) ? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5) ? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9) ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3) ? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5) ?? Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9) ?? Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3) ?? Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3) ?? Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
6.9904	6	?? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5) ?? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2) ?? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4) ?? Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9) ?? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3) ?? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
7.5946	17	Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3) Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9) Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4) Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5) Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4) Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)

		? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
		? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
		? Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
		? Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
		? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9)
		? Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
		? Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
		?? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
		?? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
		?? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
		?? Heptane ## C7H16 (ID#:142-82-5)
7.5951	17	Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
		Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
		Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
		Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
		Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
		Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
		? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9)
		? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
		? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
		? Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
		? Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
		? Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
		? Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
		?? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
		?? Heptane ## C7H16 (ID#:142-82-5)
		?? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
		?? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
7.8112	4	Diphenylamine (ID#:122-39-4)
		Diphenylamine Ac (ID#:519-87-9)
		Pheniramine (ID#:86-21-5)
		?? Varenicline (ID#:0-00-0)
7.8283		?? Furanamine, N-Acetone- (ID#:0-00-0)
8.8776		? Skatol ## Indole, 3-methyl- (ID#:83-34-1)
9.0258		Caffeine (ID#:58-08-2)
9.1583	3	? 1,7-DIMETHYLBXANTINE 11.415 MIN (ID#:611-59-6)
		? DOXYLAMINE MET (-C4H11NO) 8.900 D (ID#:15271-81-0)
		?? Theobromine 11.220 (ID#:83-67-0)
9.3355	3	?? PHexP M (Oxo=, HO-, dihydro-) Me, Ac (ID#:24353-33-0)
		?? PHexP-M (oxo) ## 1-(1-benzoylpentyl)pyrrolidin-2-one (ID#:20952-59-0)

?? PHexP M (Oxo=, dihydro-) isomer1 PFP (ID#:19304-07-0)

9.6974 ?? Mepivacaine 6.00 (ID#:0-00-0)

9.7511 2 Phenobarbital (ID#:50-06-6)
 ? Fluoxetine PrO (ID#:23653-65-0)

11.0939 8 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ?? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ?? Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 ?? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ?? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ?? Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
 ?? Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 ?? Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)

11.4050 Oleamide (ID#:301-02-0)

12.6339 26 Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
 Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
 Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
 Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 Hexacosane ## C26H54 (ID#:630-01-3)
 ? Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
 ? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
 ? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
 ? Pentacosane ## C25H52 (ID#:629-99-2)
 ? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ? Octacosane ## C28H58 (ID#:630-02-4)
 ? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ? Nonacosane ## C29H60 (ID#:630-03-5)
 ? Triacontane ## C30H62 (ID#:638-68-6)
 ?? Heptacosane ## C27H56 (ID#:593-49-7)
 ?? Tetracosane ## C24H50 (ID#:646-31-1)
 ?? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
 ?? Tritriacontane ## C33H68 (ID#:630-05-7)
 ?? Dotriacontane ## C32H66 (ID#:544-85-4)
 ?? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
 ?? Tetratriacontane ## C34H70 (ID#:14167-59-0)
 ?? Hentriacontane ## C31H64 (ID#:630-04-6)

13.3212 27 Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)

Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
 Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
 Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
 Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
 ? Heptacosane ## C27H56 (ID#:593-49-7)
 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
 ? Pentacosane ## C25H52 (ID#:629-99-2)
 ? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
 ? Hexacosane ## C26H54 (ID#:630-01-3)
 ? Nonacosane ## C29H60 (ID#:630-03-5)
 ? Triacontane ## C30H62 (ID#:638-68-6)
 ? Octacosane ## C28H58 (ID#:630-02-4)
 ?? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
 ?? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
 ?? Tetracosane ## C24H50 (ID#:646-31-1)
 ?? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9)
 ?? Tritriacontane ## C33H68 (ID#:630-05-7)
 ?? Hentriacontane ## C31H64 (ID#:630-04-6)
 ?? Dotriacontane ## C32H66 (ID#:544-85-4)
 ?? Tetratriacontane ## C34H70 (ID#:14167-59-0)

13.3217

26 Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
 Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
 Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
 Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
 ? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
 ? Heptacosane ## C27H56 (ID#:593-49-7)
 ? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ? Pentacosane ## C25H52 (ID#:629-99-2)
 ? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
 ? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ? Hexacosane ## C26H54 (ID#:630-01-3)
 ? Triacontane ## C30H62 (ID#:638-68-6)
 ? Octacosane ## C28H58 (ID#:630-02-4)
 ? Nonacosane ## C29H60 (ID#:630-03-5)
 ?? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ?? Tritriacontane ## C33H68 (ID#:630-05-7)
 ?? Tetracosane ## C24H50 (ID#:646-31-1)

?? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
 ?? Dotriacontane ## C32H66 (ID#:544-85-4)
 ?? Hentriacontane ## C31H64 (ID#:630-04-6)
 ?? Tetratriacontane ## C34H70 (ID#:14167-59-0)
 ?? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)

15.1533

25 Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
 Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
 Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
 Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
 ? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)
 ? Pentacosane ## C25H52 (ID#:629-99-2)
 ? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
 ? Octacosane ## C28H58 (ID#:630-02-4)
 ?? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
 ?? Hexacosane ## C26H54 (ID#:630-01-3)
 ?? Nonacosane ## C29H60 (ID#:630-03-5)
 ?? Triacontane ## C30H62 (ID#:638-68-6)
 ?? Heptacosane ## C27H56 (ID#:593-49-7)
 ?? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
 ?? Tritriacontane ## C33H68 (ID#:630-05-7)
 ?? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9)
 ?? Tetracosane ## C24H50 (ID#:646-31-1)
 ?? Dotriacontane ## C32H66 (ID#:544-85-4)

16.3968

22 ? Octane ## C8H18 (ID#:111-65-9)
 ? Octadecane ## C18H38 (ID#:593-45-3)
 ? Undecane ## C11H24 (ID#:1120-21-4)
 ? Pentadecane ## C15H32 (ID#:629-62-9)
 ? Heptadecane ## C17H36 (ID#:629-78-7)
 ? Decane ## C10H22 (ID#:124-18-5)
 ? Tridecane ## C13H28 (ID#:629-50-5)
 ? Tetradecane ## C14H30 (ID#:629-59-4)
 ? Heneicosane ## C21H44 (ID#:629-94-7)
 ? Nonane ## C9H20 (ID#:111-84-2)
 ? Dodecane ## C12H26 (ID#:112-40-3)
 ? Hexadecane ## C16H34 (ID#:544-76-3)
 ? Nonadecane ## C19H40 (ID#:629-92-5)
 ? Tricosane ## C23H48 (ID#:638-67-5)
 ?? Docosane ## C22H46 (ID#:629-97-0)

?? Eicosane ## C20H42 (ID#:112-95-8)
?? Pentacosane ## C25H52 (ID#:629-99-2)
?? Octacosane ## C28H58 (ID#:630-02-4)
?? Heptane ## C7H16 (ID#:142-82-5)
?? Hexacosane ## C26H54 (ID#:630-01-3)
?? Triacontane ## C30H62 (ID#:638-68-6)
?? Nonacosane ## C29H60 (ID#:630-03-5)

QA/QC:

Instrument type: Quadrupole

Scan Direction None

High noise level. Median Signal(Noise Level)/Threshold=115.9.

Background (low vs. high retention time):

median low RT S/N=76, high RT S/N=49

Solvent Tailing (m/z 84). Run begins at 3.50 min. Solvent falls below:

S/N=1 before run

Column Bleed (m/z 207):

median low RT S/N=3, high RT S/N=12

This report consists of 6 pages

Отчёт анализа

Паспорт хроматограммы

Оператор:
Хроматограмма: №2809 2023-04-21 17:08:41
Файл: C:\Analytic 3\Projects\2021\2052605_МСД_2060009\chromatograms\2023-04-21 17-08-41 2809.chrx
Хроматограф: Хроматэк-Кристалл 5000 №: 2052605 Версия прошивки: v 03.21.17.689
Метод: C:\ProgramData\Chromatec\Chromatec.Panel.UI\TempMethods\Screen_f096b8a308814a2ab73806e68fc271b9.chrx
Последовательность:
Проба: 000067
Объём пробы: 0.5
Разведение: 1
Колонка:
Плотность пробы, кг/м³: 720
Комментарии:

Режим анализа

Инструментальный метод: Screen.mthx

Настройки = Текущая настройка

Канал старта - 1

Время анализа, мин: 21

Время продувки, мин: 0

Время стабилизации, мин: 0

Термостат колонок - 1

Температура, °C: (80; 1) (20; 280; 10)

Порт ввода - 1

Режим ввода пробы: Без деления, с экономией газа

Предстарт: Выкл

Расход сбросной, мл/мин: (0; 1) (0; 30; 3) (0; 10; 0,0)

Обдув мембраны, мл/мин: (0; 1) (0; 3; 0,0)

Температура, °C: 250,0

Колонка - 1

Режим газа-носителя: Постоянный поток

Поток, мл/мин: 1,000

Клапан - 1

Предстарт: Вкл

Время переключения, мин: (Вкл; 1)

МСД

Время анализа = 21

Температура источника ионов, °C = 230

Температура переходной линии, °C = 280

Калибровочный газ = Выкл.

Тип ионизации = Электронная ионизация

Тип регистрации данных = Центроид

Количество сегментов = 1

Номер сегмента = 1

Время начала, мин = 3.5

Катод = Вкл.

Ток эмиссии = 20

Усиление = 100000

Количество сканов (в сегменте) = 1

Номер скана = 1

Тип сканирования = Диапазон масс

Массы = 40 - 400

Длительность сканирования = 0.27

[ДАЖ-3]

Шприц: 10 мкл (узел дозирования с иглой 43 мм)

Виала: 15

Имя режима: (По умолчанию)

Режим промывки: 'Из виал'

Глубина погружения в виалу, мм: '28'

Глубина погружения в испаритель, мм: '29'

Ввод пробы с задержкой в 2 испарителя: 'Нет'

Промывка шприца растворителем [Из виал]

Использовать растворитель А: 'Да'

Использовать растворитель В: 'Нет'

Использовать растворитель С: 'Да'

Использовать растворитель D: 'Нет'

Объём растворителя, мкл: '5'

Количество сливов: '1'

Скорость слива: '8'

Промывка шприца пробой

Количество отборов пробы: '1'

Скорость слива: '8'

Объём пробы, мкл: '5'

Набор пробы

Скорость набора пробы: '1'

Количество прокачек: '5'

Задержка, сек: '1'

Объём пробы, мкл: '0.5'

Ввод пробы в испаритель

Номер испарителя: '1'

Время прогрева перед вводом, сек: '0'

Время прогрева после ввода, сек: '1'

Скорость ввода: '9'

Промывка шприца растворителем [Из виал]

Использовать растворитель А: 'Нет'

Использовать растворитель В: 'Да'

Оператор:

Отчет создан: 2023-07-13 12:43:39

Страница 1 из 4

Использовать растворитель С: 'Нет'

Скорость слива: '8'

Использовать растворитель D: 'Да'

Объем растворителя, мкл: '5'

Количество сливов: '5'

Результат анализа

Компонент	Время (мин)	Площадь (мВ*с)	Высота (мВ)	Концентрация	Ед. измер.	Детектор
	3.880	3356641.853	541834.248		0	МСД-1 : ПС
	4.312	688493.312	135976.606		0	МСД-1 : ПС
	5.419	3054591.951	944013.534		0	МСД-1 : ПС
	6.018	278417.875	123099.027		0	МСД-1 : ПС
	6.046	143748.555	114615.482		0	МСД-1 : ПС
	6.127	510075.794	422697.230		0	МСД-1 : ПС
	6.355	175804.122	194174.765		0	МСД-1 : ПС
	6.683	72206.195	84143.896		0	МСД-1 : ПС
	6.797	116213.763	95258.034		0	МСД-1 : ПС
	6.958	146985.197	89239.044		0	МСД-1 : ПС
	6.991	55519.538	72554.750		0	МСД-1 : ПС
	7.063	148070.070	149658.474		0	МСД-1 : ПС
	7.519	1478588.844	702597.170		0	МСД-1 : ПС
	7.595	526708.418	611112.856		0	МСД-1 : ПС
	7.671	113622.888	81700.266		0	МСД-1 : ПС
	7.813	69942431.506	57754640.513		0	МСД-1 : ПС
	8.036	1894426.151	472916.033		0	МСД-1 : ПС
	8.127	333806.426	213501.182		0	МСД-1 : ПС
	8.169	494744.608	252645.974		0	МСД-1 : ПС
	8.264	287136.531	195057.238		0	МСД-1 : ПС
	8.307	377737.621	217740.781		0	МСД-1 : ПС
	8.355	131069.319	107112.533		0	МСД-1 : ПС
	8.502	2277090.364	1455586.302		0	МСД-1 : ПС
	8.564	196018.893	178470.409		0	МСД-1 : ПС
	8.630	178787.385	167411.666		0	МСД-1 : ПС
	8.706	701590.051	443964.504		0	МСД-1 : ПС
	8.834	594486.832	525475.012		0	МСД-1 : ПС
	8.877	523981.173	284796.887		0	МСД-1 : ПС
	8.929	220106.829	155573.719		0	МСД-1 : ПС
	8.977	197852.227	153201.951		0	МСД-1 : ПС
	9.024	5771086.909	3791221.308		0	МСД-1 : ПС
	9.081	500909.562	328319.205		0	МСД-1 : ПС
	9.157	779621.893	249725.086		0	МСД-1 : ПС
	9.229	1056492.028	305877.789		0	МСД-1 : ПС
	9.338	658587.304	432582.772		0	МСД-1 : ПС
	9.390	150407.553	170923.926		0	МСД-1 : ПС
	9.419	380027.169	255506.475		0	МСД-1 : ПС
	9.461	554759.599	469992.370		0	МСД-1 : ПС
	9.523	945539.643	292646.182		0	МСД-1 : ПС
	9.580	2509720.544	1715202.357		0	МСД-1 : ПС

Результат анализа

Компонент	Время (мин)	Площадь (мВ*с)	Высота (мВ)	Концентрация Ед. измер.	Детектор
	9.637	563793.537	265817.423	0	МСД-1 : ПС
	9.699	1038317.208	396191.226	0	МСД-1 : ПС
	9.756	480267.131	273188.285	0	МСД-1 : ПС
	10.046	76459.768	97923.168	0	МСД-1 : ПС
	10.088	364091.368	285305.384	0	МСД-1 : ПС
	10.126	341344.968	278240.764	0	МСД-1 : ПС
	10.179	116354.631	76020.383	0	МСД-1 : ПС
	10.373	125178.974	98656.283	0	МСД-1 : ПС
	10.492	256344.124	144078.900	0	МСД-1 : ПС
	10.559	70330836.455	61298328.734	0	МСД-1 : ПС
	10.692	719680.607	343024.726	0	МСД-1 : ПС
	10.791	58070.985	68254.061	0	МСД-1 : ПС
	11.019	224514.680	281751.798	0	МСД-1 : ПС
	11.095	329631.569	157643.231	0	МСД-1 : ПС
	11.304	81385.563	52938.246	0	МСД-1 : ПС
	11.404	426349368.207	226110380.809	0	МСД-1 : ПС
	11.494	80667631.884	41892326.489	0	МСД-1 : ПС
	11.817	3436736.428	604087.810	0	МСД-1 : ПС
	12.003	340021.757	178660.924	0	МСД-1 : ПС
	12.055	1059522.422	671414.133	0	МСД-1 : ПС
	12.259	905340.737	701568.713	0	МСД-1 : ПС
	12.340	8975918.919	3130276.980	0	МСД-1 : ПС
	12.473	13902858.605	3502908.503	0	МСД-1 : ПС
	12.634	3323782.986	1226953.554	0	МСД-1 : ПС
	12.805	6804952.678	2066638.584	0	МСД-1 : ПС
	13.323	1471473.503	845570.553	0	МСД-1 : ПС
	13.689	87478.005	59340.937	0	МСД-1 : ПС
	13.969	8490474.752	3270698.526	0	МСД-1 : ПС
	14.145	1691087.068	697803.065	0	МСД-1 : ПС
	14.321	338078.342	183090.780	0	МСД-1 : ПС
	15.152	822514.693	358108.793	0	МСД-1 : ПС
	16.396	366186.467	148733.558	0	МСД-1 : ПС

Хроматограмма

МСД-1 : ТІС

Интервал от 3.500 мин до 20.971 мин

