

**MTEP paslaugų teikimo sutarties
(2024 m. gegužės 23 d. Nr. 2024-PR-00040)**

Lakiųjų aromatinių junginių analizė

ATASKAITA

Temos vadovė: prof. Dr. Elena Bartkienė (elena.bartkiene@lsmu.lt; 860135837)

Temos vykdytojai: inž. Ernestas Mockus, dr. Dovilė Klupšaitė, dr. Vytautė Starkutė

Kaunas, 2024

Turinys

1. Techninė užduotis	3
2. Tyrimų objektai	3
3. Tyrimų metodai	3
4. Tyrimų rezultatai	4
Apibendrinimas	9
Priedai	10

1. Techninė užduotis

Ištirti Užsakovo pateiktus mėginius (6 vnt):

1. Identifikuoti pateiktų mėginių aromatinius junginius;
2. Pateikti ataskaitą.

2. Tyrimų objektai

Tyrimo objektai

Užsakovo pateikti mėginiai (fermentuoti avižiniai gėrimai).

Mėginių kodavimas:

- avizu_gerimas_1
- avizu_gerimas_2
- avizu_gerimas_3
- avizu_gerimas_4
- avizu_gerimas_5

3. Tyrimų metodai

Aromatinių junginių tyrimo metodika

Lakieji junginiai buvo nustatyti dujų chromatografijos – masių spektrometrijos instrumentu (GCMS-QP2010 (Shimadzu, Japonija)). Viršerdvėje išsiskyre junginiai buvo adsorbuoti kietafazės mikroekstrakcijos prietaisu (Stableflex™ medžiaga, padengta 85 μm PDMS -Carboxen™ sluoksniu (Supelco, JAV)). Du gramai mėginio buvo praskiesti su 10 mL 1M fosfatinio buferio ir 50 μl 9,3 mg/ml pentanoinės rūgšties tirpalo (vidiniu standartu) 20 ml chromatografiniame buteliuke. Gautas mišinys buvo termostatuojamas 60°C temperatūroje 30 minučių, po to, išsiskyre lakieji junginiai buvo adsorbuojami kietafazės mikroekstrakcijos prietaisu 10 minučių ir desorbuojami į dujų chromatografo mėginio įvedimo sistemą 2 minutes. Analizės sąlygos: injektoriaus temperatūra 250°C, jonų šaltinio temperatūra 220°C, bei sąsajos tarp masių spektrometro ir dujų chromatografo temperatūra 260°C. Judančioji faze – helis, tiekiamas 0,65 ml/min srautu. Junginių atskyrimui naudota Stabilwax™-DA kapiliarinė kolonėlė (Restek, JAV) (ilgis 30 m, stacionariosios fazės storis 0,25 μm-φ, vidinis diametras 0,25 mm-φ). Temperatūrinis kolonėlės gradientas: 40°C (3 min laikymas), 40 iki 250°C (5°C/min) (5 min laikymas). Junginiai identifikuoti naudojant masių spektrų bibliotekas (NIST11, FFNSC2).

Statistinė analizė

Statistinė duomenų analizė atlikta, naudojant IBM SPSS statistinį paketą. Rezultatai interpretuoti, kaip patikimi, kai $p < 0,05$.

4. Rezultatai

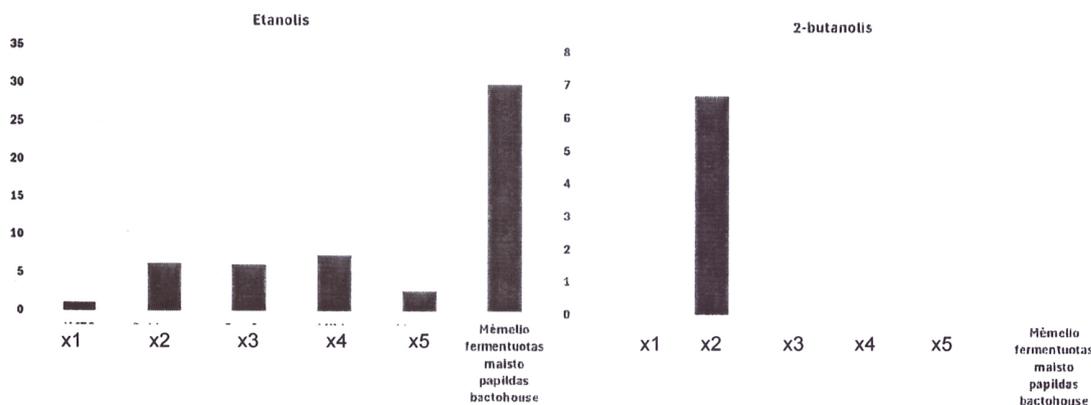
Mėginių aromatinių junginių profilis

Mėginių aromatinių junginių skaitinės reikšmės ir chromatogramos pateiktos, atitinkamai, I lentelėje 1 priede.

1 paveiksle pavaizduoti aromatiniai junginiai, identifikuoti tirtuose mėginiuose (procentais nuo bendro identifikuotų junginių kiekio).

Lyginant mėginių aromatiniame profilyje etanolio kiekį (1 pav. a), didžiausias etanolio kiekis nustatytas Nr. 5 mėginyje (30,02 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Mažiausias etanolio kiekis nustatytas mėginių Nr. 1 aromatinių junginių profilyje (1,17 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Mėginiuose Nr. 2; 3; 4 etanolio aromatiniame profilyje nustatyta, vidutiniškai, 6,63 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). O mėginyje Nr. 4 etanolio kiekis nustatytas 2,76 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio. Iš esmės etanolio aromatas apibūdinamas, kaip stiprus, alkoholinis, eterinis, medicininis.

2-Butanolio aptikta tik mėginyje Nr. 2 (6,70 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). 2-Butanolio aromatas apibūdinamas, kaip saldus, abrikosų (1 pav. b).

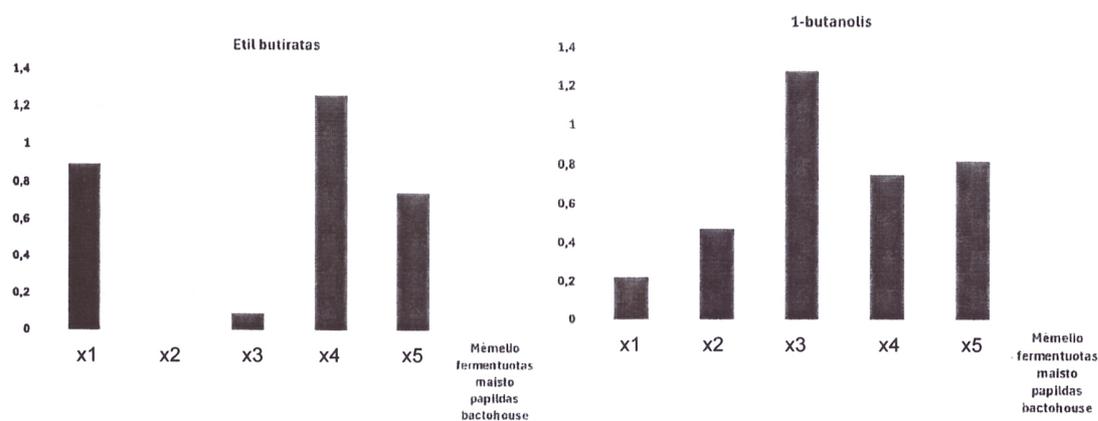


a)

b)

Etil butiratas natūraliai susidaro alkoholiniuose gėrimuose, dėl mielių fermentacijos (pvz., jo nustatoma daugelyje alaus rūšių). Taip pat jo gali susidaryti dėl netinkamos higienos, nes etil butiratą gamina įvairūs mikroorganizmai, ne tik technologiniai. Etil butirato aromatą gali sustiprinti sviesto rūgštis, dažniausiai, dėl prastos higienos. Tačiau, etil butiratas yra ir skirtingų vaisių aromatų dalis, tokių kaip abrikosai, bananai, ananasai ir melionai, šis junginys susidaro brandimo proceso metu. Jis yra labai lakus, todėl didesnė jo koncentracija aromatiniame profilyje gali sukelti „vėmalų“ kvapą. Jo aromatas buvo apibūdinamas ir kaip eterinis, vaisinis, žalias, riešutinis, lazdyno riešutų, sėklinis, makadamijos riešutų minkštimo. Etil butirato kiekis mėginių aromatinių junginių profilyje

pavaizduotas **1 pav. c.** Etil butirato nenustatyta Nr. 2 ir Nr. 5 mėginiuose. Mėginiuose Nr. 1 ir Nr. 4 jo koncentracija buvo, vidutiniškai, 0,842 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Didžiausias etil butirato kiekis nustatytas Nr. 3 mėginio aromatiniam profilyje (1,26 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Mažiausias (nelyginant su tais mėginiais, kuriuose nenustatyta) – Nr. 4 mėginyje (0,093 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). 1-Butanolio nustatyta visuose mėginiuose, išskyrus Nr. 6 (**1 pav. d**). 1-Butanolio aromatas apibūdinamas, kaip fuzelio, aliejaus, saldus, balzaminis, viskio. Dažnu atveju, jis susidaro *Clostridium* sp. fermentuojant sudėtingus sacharidus, tokius, kaip pentozės ir heksozės.



c)

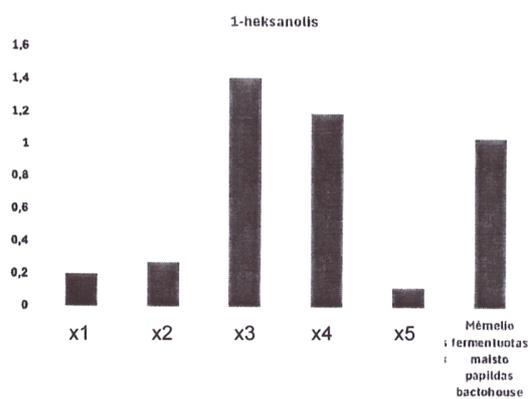
d)

1-heksanolio (**1 pav. e**) nustatyta visuose mėginiuose, o didžiausias jo kiekis identifikuotas Nr. 4 mėginyje (1,41 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). 1-heksanolio aromatas apibūdinamas, kaip citrusinių vaisių, šviežių gėlių, riebiai saldus. Mažiausias šio junginio kiekis sudarė mėginių Nr. 1; 2; 5 aromatinis profilius (vidutiniškai, 0,201 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Didžiausias acto rūgšties (**1 pav. e**) kiekis nustatytas Nr. 6 mėginių aromatiniam profilyje (60,6 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Acto rūgšties aromatas apibūdinamas, kaip aštrus, aitrus, rūgštus. Mėginio Nr. 4 aromatinių junginių profilyje acto rūgšties kiekis nustatytas 1,7 karto mažesnis, nei Nr. 6. Mažiausias acto rūgšties kiekis identifikuotas Nr. 5 mėginyje (13,0 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio).

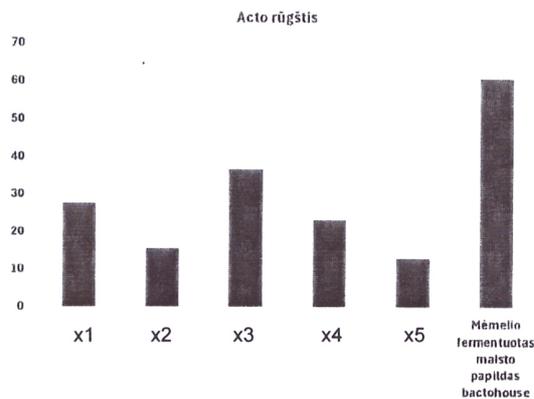
2-Etil-1-heksanolio nustatyta visų mėginių aromatinuose profilyuose (**1 pav. g**). Tai bespalvis skystis, turintis švelnų gėlių kvapą, jis natūraliai randamas maiste. Mažiausias šio junginio kiekis nustatytas mėginio Nr. 5 aromatiniam profilyje (0,525 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio). Kituose tirtuose mėginiuose šio junginio nustatyta nuo 2,14 karto (mėginiuose Nr. 3 ir Nr. 4) iki 3,3 karto (mėginyje Nr. 2) daugiau.

Butano rūgšties mažiausias kiekis nustatytas mėginio Nr. 6 aromatiniam profilyje (4,18 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (**1 pav. h**). Kituose analizuotuose mėginiuose butano rūgšties kiekis varijavo nuo 81,5 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio

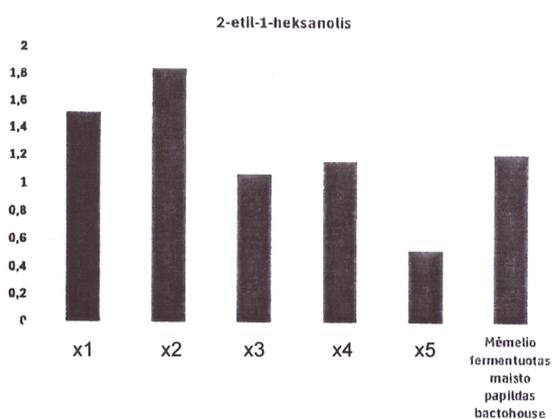
(mėginyje Nr. 5) iki 51,9 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio (mėginyje Nr. 4). Butano rūgšties aromatas apibūdinamas, kaip aštrus, panašus į pienišką, sūrus, sviestinis su vaisių niuansu. Butano rūgšties skonio standartas pasitelkiamas išmokyti profesionalius degustatorius atpažinti gėrimų sviesto aromato savybių stiprumą. Butano rūgšties sukiamas kvapas, tai gėrimų pašalinis kvapas, dažnai atsirandantis, dėl gėrimų gamybai naudojamų cukrų sirupų bakterinės taršos. Butano rūgštis yra svarbus aromato junginys, aptinkamas daugelyje maisto produktų bei fermentuotų gėrimų. Tačiau, kai šio junginio koncentracija viršija būdingo aromato atitinkamam produktui slenkstį, jis sukelia „sūrio“ arba kitą pašalinį aromatą. Butano rūgšties nebūdingai didelės koncentracijos gali susidaryti, dėl anaerobinių sporas formuojančių *Clostridium* genties bakterijų. Dažnai šiomis bakterijomis užteršiama per gliukozės ir cukranendrių cukraus sirupus, kurie gėrimų gamyboje naudojami kaip priedai. Dažniausiai tai nutinka sirupo gamybos metu, nesilaikant krakmolo tvarkymo higienos, gaminant gliukozės ar cukranendrių cukraus sirupą



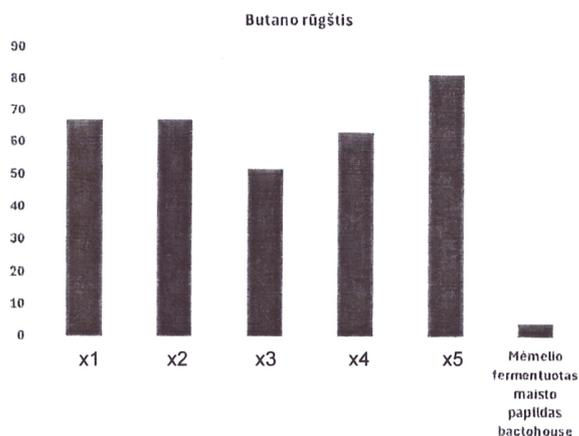
e)



f)

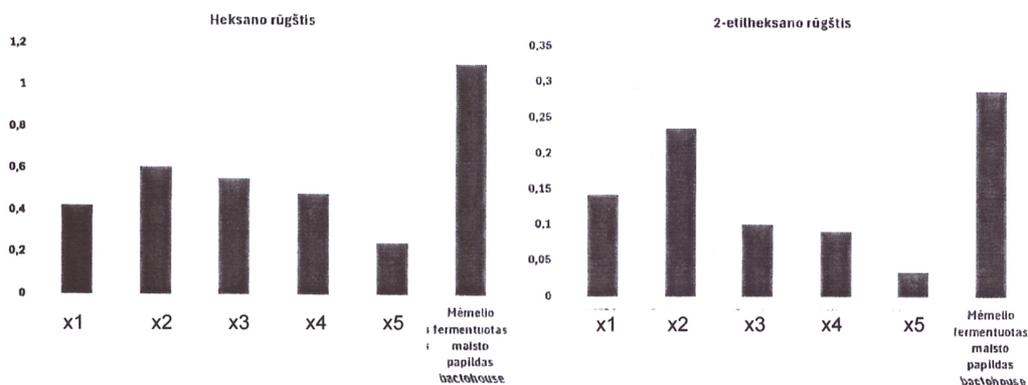


g)



h)

Didžiausias heksano rūgštis kiekis nustatytas mėginio Nr. 6 aromatiname profilyje (1,11 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (1 pav. i). Šio junginio aromatas aprašomas, kaip vėmalų, prakaito, aštrus, sūrus, riebus. Tačiau, visuose mėginiuose šio junginio kiekis, nuo bendro identifikuotų junginių kiekio, nustatytas mažesnis, nei 1,2 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio. Mėginyje Nr. 6 nustatytas didžiausias ir 2-etilheksano kiekis aromatinių junginių profilyje (0,288 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (1 pav. j). Tačiau nei viename mėginyje šio junginio nenustatyta daugiau nei 1 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio. Šis junginys apibūdinamas, kaip švelniu kvapu pasižymintis, tačiau detaliau kvapas nėra aprašomas.

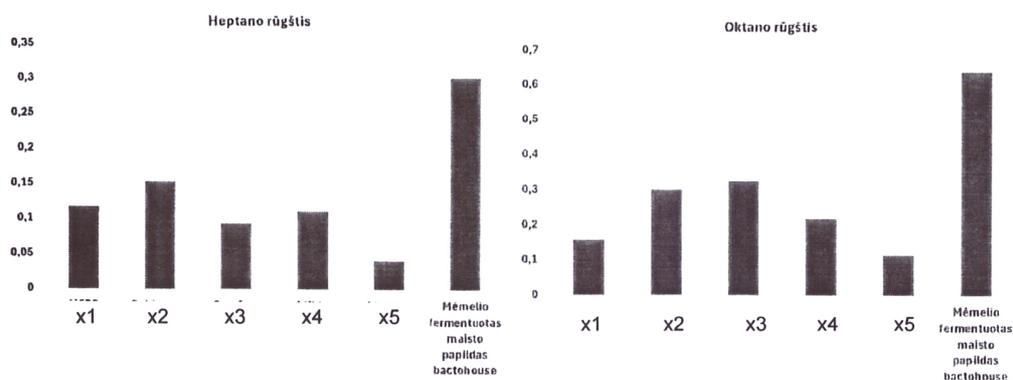


i)

j)

Didžiausias heptano kiekis nustatytas Nr. 6 mėginių profilyje (0,302 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (1 pav. k). Tačiau nei viename mėginyje šio junginio nenustatyta daugiau nei 1 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio. Šio junginio aromatas aprašomas, kaip sūrio, vaškinis, prakaito, fermentuotas, ananasinis ir vaisinis.

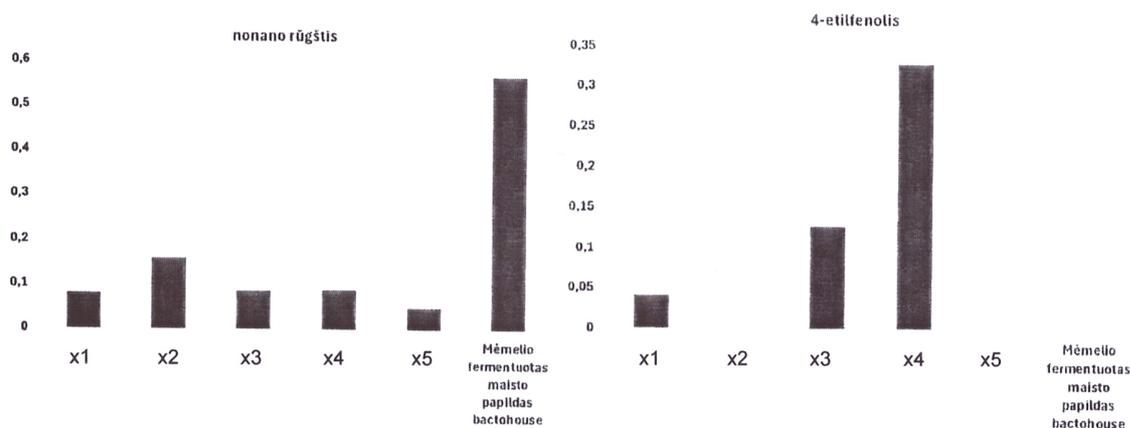
Oktano aromatas aprašomas, kaip riebus, vaškinis, apkatusio aliejaus, augalinis, sūrio. Didžiausias šio junginio kiekis identifikuotas mėginio Nr. 6 aromatiname profilyje (0,638 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (1 pav. k). Tačiau nei viename mėginyje šio junginio nenustatyta daugiau nei 1 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio.



k)

Didžiausias nonano rūgšties kiekis nustatytas taip pat Nr. 6 mėginių profilyje (0,567 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio) (1 pav. m). Tačiau nei viename mėginyje šio junginio nenustatyta daugiau nei 1 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio. Šio junginio aromatas aprašomas, kaip vaškinis, purvinas ir sūrio su pienišku niuansu.

4-etilfenolio nustatyta 3 iš 6 analizuotų mėginių. Šio junginio kvapas aprašomas, kaip dūminis, fenolio, pikantiškas. Nei viename mėginyje šio junginio nenustatyta daugiau nei 1 proc. nuo bendro identifikuotų aromatinių junginių kiekio.



m)

n)

Įvertinus mėginio, kaip veiksnio įtaką identifikuotų aromatinių junginių kiekiui, nustatyta, kad visais atvejais, mėginys buvo reikšmingas veiksnys visų aromatinių junginių kiekiui mėginiuose (1 lentelė).

1 lentelė. Mėginio įtaka analizuotų mėginių aromatinių junginių kiekiui procentais nuo bendro (100 proc.) kiekio.

Veiksny	Identifikuoti aromatiniai junginiai	p
Mėginys	Etanolis	<0,001
	2-butanolis	<0,001
	Etil butiratas	<0,001
	1-butanolis	<0,001
	1-heksanolis	<0,001
	Acto rūgštis	<0,001
	2-etil-1-heksanolis	<0,001
	Butano rūgštis	<0,001
	Heksano rūgštis	<0,001
	2-etilheksano rūgštis	<0,001
	Heptano rūgštis	<0,001
	Oktano rūgštis	<0,001
	nonano rūgštis	<0,001
	4-etilfenolis	<0,001

Mėginys buvo reikšmingas veiksnys aromatinio junginio kiekiui, kai $p < 0,05$

Apibendrinimas

Įvertinus tai, kad mėginys buvo reikšmingas veiksnys visų aromatinių junginių kiekiui mėginių aromato profilyje, galima tik numanyti, kad fermentacijos procesas nevisuomet yra sėkmingai kontroliuojamas. Nežinant konkrečių receptūrų, galima tik kelti hipotezę, kad mėginiuose, kuriuose susidarė didelė butano rūgšties koncentracija, receptūroje naudojami cukrų sirupai, su kuriais ir papuola mikrobinė tarša, dėl kurios fermentacija tampa nekontroliuojama. Tačiau, nežinant konkrečios receptūros, tai tik prielaida. Kitos žaliavos taip pat gali tapti taršos, o tuo pačiu, ir nepageidaujamų aromatinių junginių susidarymo šaltiniu.

1 priedas

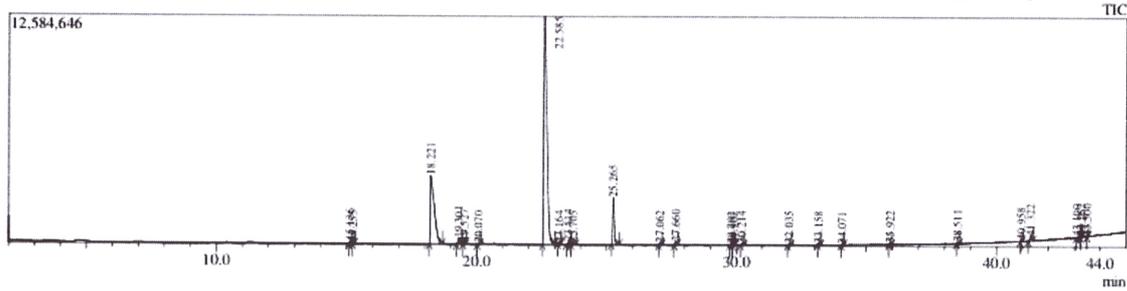
1 pav. Aromatiniai junginiai, identifikuoti tirtuose mėginiuose (procentais nuo bendro identifikuotų junginių kiekio).

RT	Aromatinis junginys	x1	x2	x3	x4	x5	Mėmelio fermentuotas maisto papildas bactohouse
4,66	Etanolis	1.17 ± 0.12a	6.30 ± 0.34c	7.45 ± 0.12c	6.14 ± 0.34c	2.76 ± 0.05b	30.0 ± 1.30d
6,625	2-butanolis	0 ± 0a	6.70 ± 0.19b	0 ± 0a	0 ± 0a	0 ± 0a	0 ± 0a
6,96	Etilbutiratas	0.901 ± 0.045b	0 ± 0a	1.26 ± 0.15c	0.093 ± 0.009a	0.749 ± 0.095b	0 ± 0a
9,84	1-butanolis	0.224 ± 0.028b	0.475 ± 0.038c	0.752 ± 0.032d	1.28 ± 0.032e	0.821 ± 0.045d	0 ± 0a
15,695	1-heksanolis	0.202 ± 0.021a	0.277 ± 0.012a	1.195 ± 0.179b	1.41 ± 0.036c	0.124 ± 0.017a	1.044 ± 0.012b
18,27	Actorūgštis	27.6 ± 0.80d	15.7 ± 0.37b	23.39 ± 0.79c	36.8 ± 0.25e	13.0 ± 0.364a	60.6 ± 1.76f
19,295	2-etil-1-heksanolis	1.52 ± 0.19cd	1.85 ± 0.15d	1.17 ± 0.09b	1.08 ± 0.051b	0.525 ± 0.025a	1.22 ± 0.18bc
22,61	Butanorūgštis	67.4 ± 0.66d	67.3 ± 0.39d	63.47 ± 0.493c	51.9 ± 0.49b	81.5 ± 0.20e	4.18 ± 0.59a
27,645	Heksanorūgštis	0.426 ± 0.047b	0.609 ± 0.07c	0.484 ± 0.019bc	0.553 ± 0.030bc	0.246 ± 0.026a	1.11 ± 0.11d
29,78	2-etilheksanorūgštis	0.142 ± 0.017b	0.235 ± 0.028c	0.091 ± 0.006ab	0.101 ± 0.004b	0.034 ± 0.002a	0.288 ± 0.039c
29,885	Heptanorūgštis	0.118 ± 0.016bc	0.153 ± 0.013c	0.112 ± 0.006bc	0.093 ± 0.012b	0.041 ± 0.001a	0.302 ± 0.039d
32,025	Oktanorūgštis	0.158 ± 0.007ab	0.301 ± 0.028c	0.218 ± 0.015b	0.325 ± 0.018c	0.114 ± 0.008a	0.638 ± 0.042d
34,06	nonanorūgštis	0.082 ± 0.012a	0.159 ± 0.014a	0.090 ± 0.009ab	0.087 ± 0.012ab	0.049 ± 0.001b	0.566 ± 0.061c
34,41	4-etilfenolis	0.042 ± 0.003a	0 ± 0a	0.329 ± 0.048c	0.128 ± 0.013b	0 ± 0a	0 ± 0a

Sample Information

Analyzed by : Adman
 Analyzed : 5/30/2024 2:48:47 PM
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 Sample Name : avizu_gerimas_1kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_buPH3_CAR_PDMS
 Sample ID : avizu_gerimas_1kk_2g+50ul va sp
 IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 11
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_1kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_buPH3_CAR_PDMS_25_
 Org Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_1kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_buPH3_CAR_PDMS_25_
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\HS_SPME 2022 stabilwax_reprocess.qgm
 Org Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\HS_SPME 2022 stabilwax.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System1\Tune1\2024-05-27.qgt
 Modified by :
 Modified : 6/26/2024 9:27:07 AM

2g+50ul va spiked+10ml fost_buPH3_CAR_PDMS C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_1kk_2g+50ul va spiked+10ml fos



Quantitative Result Table

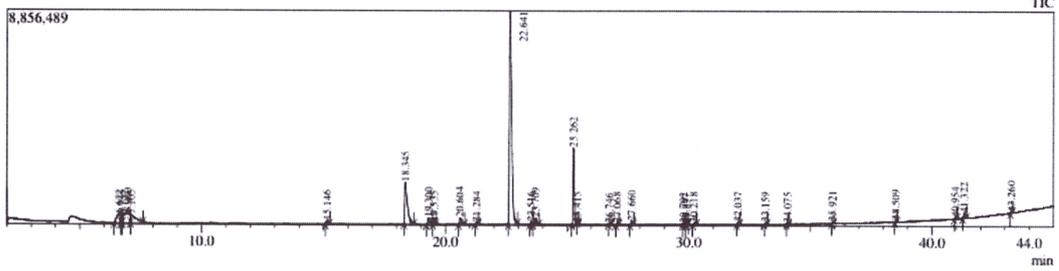
ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	Ethanol	4.671	TIC	1828002	83060	0.000	ppm	0
2	Butan-2-ol	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
3	Butyrate <ethyl->	6.956	TIC	1246583	41622	0.000	ppm	0
4	1-Butanol	9.859	TIC	308248	24693	0.000	ppm	0
5	Cyclopentasiloxane, dodecamethyl-	10.367	TIC	190014	48249	0.000	ppm	0
6	Methanesulfonyl chloride	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
7	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.136	TIC	623106	124503	0.000	ppm	0
8	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.254	TIC	130947	38340	0.000	ppm	0
9	1-Hexanol	15.703	TIC	260941	36596	0.000	ppm	0
10	Acetic acid	18.221	TIC	40273859	3784603	0.000	ppm	0
11	1-Hexanol, 2-ethyl-	19.301	TIC	1928422	315414	0.000	ppm	0
12	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	19.527	TIC	530177	119669	0.000	ppm	0
13	RT:20.065	20.076	TIC	150160	32889	0.000	ppm	0
14	Butanoic acid	22.585	TIC	99104982	12522051	0.000	ppm	0
15	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	23.514	TIC	601291	124725	0.000	ppm	0
16	Pentanoic acid	25.265	TIC	10072245	2547836	1.000	ppm	0
17	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	27.062	TIC	350682	96113	0.000	ppm	0
18	Hexanoic acid	27.660	TIC	544461	143320	0.000	ppm	0
19	Hexanoic acid <2-ethyl->	29.792	TIC	160985	39622	0.000	ppm	0
20	Heptanoic acid	29.902	TIC	146636	36095	0.000	ppm	0
21	Creosol	-	TIC	-	-	N.D.(Ref)	ppm	0
22	Octanoic acid <n->	32.035	TIC	228572	66857	0.000	ppm	0
23	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	33.158	TIC	198737	66420	0.000	ppm	0
24	Nonanoic acid	34.071	TIC	96538	30853	0.000	ppm	0
25	Phenol, 4-ethyl-	34.426	TIC	61239	18267	0.000	ppm	0
26	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	35.922	TIC	196079	73351	0.000	ppm	0
27	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	38.511	TIC	145033	60899	0.000	ppm	0
28	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	40.958	TIC	162751	59486	0.000	ppm	0
29	RT:41.310	41.322	TIC	888167	229066	0.000	ppm	0
30	RT:42.770	42.785	TIC	85971	24907	0.000	ppm	0
31	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	43.262	TIC	119226	48885	0.000	ppm	0
32	Tentatively Identified Compound	23.705	TIC	504400	81155	0.047		0
33	Tentatively Identified Compound	30.214	TIC	267647	69536	0.025		0
34	Tentatively Identified Compound	23.164	TIC	154061	44732	0.014		0
35	Tentatively Identified Compound	43.100	TIC	31814	11117	0.003		0
36	Tentatively Identified Compound	43.500	TIC	16244	6634	0.002		0
37	Tentatively Identified Compound	11.285	TIC	1058879	54036	0.105		0

ID# Name R.Time m/z Area Height Conc. Conc.Unit R.Index

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Analyzed : 5/30/2024 4:36:23 PM
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 Sample Name : avizu_gerimas_2kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS
 Sample ID : avizu_gerimas_2kk_2g+50ul va sp
 IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 12
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_2kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_27_...
 Org Data File : C:\GCMSolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_2kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_27_...
 Method File : C:\GCMSolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\HS_SPME 2022 stabilwax_reprocess.qgm
 Org Method File : C:\GCMSolution\Data\Project\1\HS-SPME\HS_SPME 2022 stabilwax.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSolution\System\Tune\1\2024-05-27.qgt
 Modified by :
 Modified : 6/26/2024 9:27:08 AM

2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS C:\GCMSolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_2kk_2g+50ul va spiked+10ml fos



Quantitative Result Table

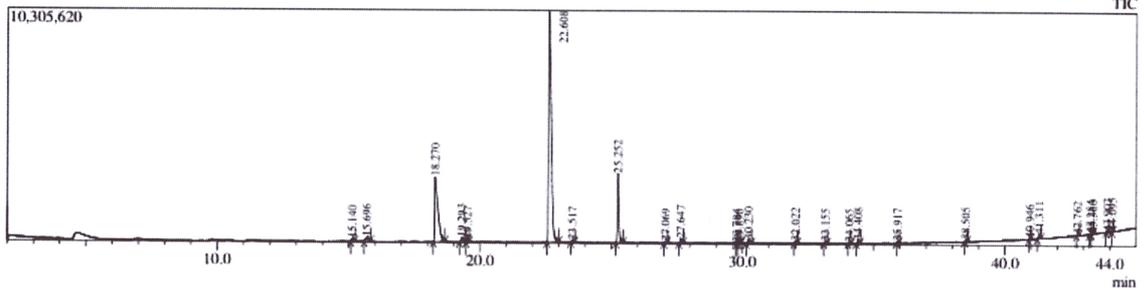
ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc. Unit	R.Index
1	Ethanol	4.675	TIC	5129111	217602	0.000	ppm	0
2	Butan-2-ol	6.622	TIC	5464641	332078	0.000	ppm	0
3	Butyrate -cethyl->	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
4	1-Butanol	9.831	TIC	364947	29973	0.000	ppm	0
5	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	10.378	TIC	201185	51161	0.000	ppm	0
6	Methanesulfonyl chloride	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
7	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.146	TIC	679099	133834	0.000	ppm	0
8	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.295	TIC	95064	24577	0.000	ppm	0
9	1-Hexanol	15.729	TIC	222107	30343	0.000	ppm	0
10	Acetic acid	18.345	TIC	13063536	1732497	0.000	ppm	0
11	1-Hexanol, 2-ethyl-	19.300	TIC	1381654	255609	0.000	ppm	0
12	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	19.535	TIC	467671	116070	0.000	ppm	0
13	RT:20.065	20.086	TIC	208726	36591	0.000	ppm	0
14	Butanoic acid	22.641	TIC	54438696	8782310	0.000	ppm	0
15	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	23.510	TIC	404446	73645	0.000	ppm	0
16	Pentanoic acid	25.262	TIC	13155640	3164479	1.000	ppm	0
17	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	27.068	TIC	215084	62559	0.000	ppm	0
18	Hexanoic acid	27.660	TIC	434725	129515	0.000	ppm	0
19	Hexanoic acid <2-ethyl->	29.792	TIC	148400	42271	0.000	ppm	0
20	Heptanoic acid	29.897	TIC	113252	30846	0.000	ppm	0
21	Creosol	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
22	Octanoic acid <n->	32.037	TIC	237270	70041	0.000	ppm	0
23	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	33.159	TIC	198260	66045	0.000	ppm	0
24	Nonanoic acid	34.075	TIC	115693	38579	0.000	ppm	0
25	Phenol, 4-ethyl-	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
26	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	35.921	TIC	182227	70575	0.000	ppm	0
27	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	38.509	TIC	146643	60515	0.000	ppm	0
28	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	40.954	TIC	181236	62017	0.000	ppm	0
29	RT:41.310	41.322	TIC	842245	208010	0.000	ppm	0
30	RT:42.770	42.776	TIC	256115	42858	0.000	ppm	0
31	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	43.260	TIC	130877	49013	0.000	ppm	0
32	Tentatively Identified Compound	7.105	TIC	4436068	324548	0.339		0
33	Tentatively Identified Compound	20.604	TIC	1424104	272309	0.109		0
34	Tentatively Identified Compound	23.709	TIC	1223302	256031	0.094		0
35	Tentatively Identified Compound	6.735	TIC	1078328	300101	0.082		0
36	Tentatively Identified Compound	21.284	TIC	264633	69436	0.020		0
37	Tentatively Identified Compound	26.746	TIC	93025	30052	0.007		0
38	Tentatively Identified Compound	25.415	TIC	14363	12422	0.001		0

ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc. Unit	R.Index
39	Tentatively Identified Compound	6.960	TIC	10843105	379061	0.824		0
40	Tentatively Identified Compound	11.357	TIC	861454	37877	0.065		0

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Analyzed : 5/30/2024 9:59:13 PM
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 Sample Name : avizu_gerimas_3kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS
 Sample ID : avizu_gerimas_3kk_2g+50ul va sp
 IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 15
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_3kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_33_
 Org Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_3kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_33_
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\HS_SPME 2022 stabilwax_reprocess.qgm
 Org Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\HS_SPME 2022 stabilwax.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System\Tune\1\2024-05-27.qgt
 Modified by :
 Modified : 6/26/2024 9:27:10 AM

2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS C:\GCMSsolution\Data\Project1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_3kk_2g+50ul va spiked+10ml fos



Quantitative Result Table

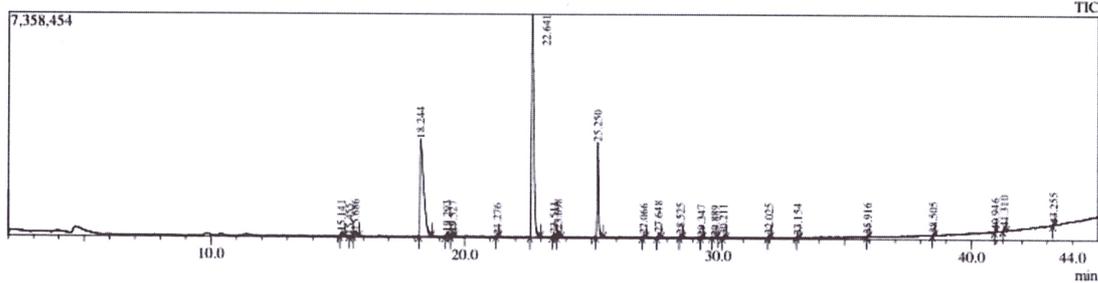
ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	Ethanol	4.654	TIC	8637863	277858	0.000	ppm	0
2	Butan-2-ol	-	TIC	-	-	N.D.(Ref)	ppm	0
3	Butyrate <ethyl->	7.007	TIC	1630056	60294	0.000	ppm	0
4	1-Butanol	9.825	TIC	897956	60491	0.000	ppm	0
5	Cyclopentasiloxane, dodecamethyl-	10.360	TIC	162776	47889	0.000	ppm	0
6	Methanesulfonyl chloride	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
7	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.140	TIC	640436	122778	0.000	ppm	0
8	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.270	TIC	91607	30222	0.000	ppm	0
9	1-Hexanol	15.696	TIC	1580059	192868	0.000	ppm	0
10	Acetic acid	18.270	TIC	25863857	2853050	0.000	ppm	0
11	1-Hexanol, 2-ethyl-	19.293	TIC	1217627	198744	0.000	ppm	0
12	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	19.527	TIC	477520	120310	0.000	ppm	0
13	RT:20.065	20.065	TIC	316794	58589	0.000	ppm	0
14	Butanoic acid	22.608	TIC	72353716	10233100	0.000	ppm	0
15	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	23.517	TIC	417173	87536	0.000	ppm	0
16	Pentanoic acid	25.252	TIC	11775846	3004523	1.000	ppm	0
17	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	27.069	TIC	221102	53878	0.000	ppm	0
18	Hexanoic acid	27.647	TIC	574762	170660	0.000	ppm	0
19	Hexanoic acid <2-ethyl->	29.784	TIC	108252	31793	0.000	ppm	0
20	Heptanoic acid	29.890	TIC	135438	34686	0.000	ppm	0
21	Creosol	30.230	TIC	614426	134802	0.000	ppm	0
22	Octanoic acid <n->	32.022	TIC	258727	83178	0.000	ppm	0
23	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	33.155	TIC	170623	55826	0.000	ppm	0
24	Nonanoic acid	34.065	TIC	113704	34131	0.000	ppm	0
25	Phenol, 4-ethyl-	34.408	TIC	406091	117073	0.000	ppm	0
26	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	35.917	TIC	164291	58714	0.000	ppm	0
27	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	38.505	TIC	148198	58889	0.000	ppm	0
28	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	40.946	TIC	118610	45920	0.000	ppm	0
29	RT:41.310	41.311	TIC	691798	173783	0.000	ppm	0
30	RT:42.770	42.762	TIC	221168	49945	0.000	ppm	0
31	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	43.254	TIC	79228	33833	0.000	ppm	0
32	Tentatively Identified Compound	43.360	TIC	52298	14776	0.004	ppm	0
33	Tentatively Identified Compound	43.902	TIC	46539	16381	0.004	ppm	0
34	Tentatively Identified Compound	44.095	TIC	10662	5784	0.001	ppm	0
35	Tentatively Identified Compound	44.290	TIC	987017	43133	0.084	ppm	0

ID# Name R.Time m/z Area Height Conc. Conc.Unit R.Index

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Analyzed : 5/31/2024 3:22:03 AM
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 Sample Name : avizu_gerimas_4kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS
 Sample ID : avizu_gerimas_4kk_2g+50ul va sp
 IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 18
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project\I\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_4kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_39_
 Org Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project\I\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_4kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS_39_
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project\I\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\HS-SPME 2022 stabilwax_reprocess.qgm
 Org Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project\I\HS-SPME\HS-SPME 2022 stabilwax.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System\Tune\1\2024-05-27.qgt
 Modified by :
 Modified : 6/26/2024 9:27:09 AM

2g+50ul va spiked+10ml fost_bufpH3_CAR_PDMS C:\GCMSsolution\Data\Project\I\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\5302024_avizu_gerimas_4kk_2g+50ul va spiked+10ml fos



Quantitative Result Table

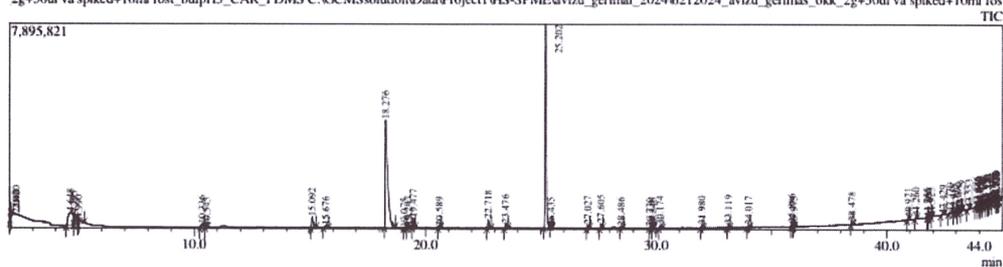
ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	Ethanol	4.639	TIC	5155507	200512	0.000	ppm	0
2	Butan-2-ol	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
3	Butyrate <ethyl->	6.925	TIC	99200	12412	0.000	ppm	0
4	1-Butanol	9.816	TIC	1117150	76260	0.000	ppm	0
5	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	10.392	TIC	290892	54913	0.000	ppm	0
6	Methanesulfonyl chloride	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
7	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.141	TIC	733265	134865	0.000	ppm	0
8	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.285	TIC	74858	25179	0.000	ppm	0
9	1-Hexanol	15.686	TIC	1247297	169539	0.000	ppm	0
10	Acetic acid	18.244	TIC	31880503	3200661	0.000	ppm	0
11	1-Hexanol, 2-ethyl-	19.293	TIC	879074	139038	0.000	ppm	0
12	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	19.527	TIC	513163	130827	0.000	ppm	0
13	RT:20.065	20.067	TIC	272555	42483	0.000	ppm	0
14	Butanoic acid	22.641	TIC	44725855	7302021	0.000	ppm	0
15	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	23.505	TIC	465822	91761	0.000	ppm	0
16	Pentanoic acid	25.250	TIC	12554914	3095730	1.000	ppm	0
17	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	27.066	TIC	326775	73227	0.000	ppm	0
18	Hexanoic acid	27.648	TIC	504730	146834	0.000	ppm	0
19	Hexanoic acid <2-ethyl->	29.776	TIC	90417	25634	0.000	ppm	0
20	Heptanoic acid	29.889	TIC	84395	24741	0.000	ppm	0
21	Cresol	30.211	TIC	309083	66752	0.000	ppm	0
22	Octanoic acid <n->	32.025	TIC	298062	88828	0.000	ppm	0
23	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	33.154	TIC	186081	59992	0.000	ppm	0
24	Nonanoic acid	34.064	TIC	89446	28230	0.000	ppm	0
25	Phenol, 4-ethyl-	34.418	TIC	88427	23628	0.000	ppm	0
26	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	35.916	TIC	166919	63495	0.000	ppm	0
27	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	38.505	TIC	152096	58902	0.000	ppm	0
28	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	40.946	TIC	143341	55250	0.000	ppm	0
29	RT:41.310	41.310	TIC	488845	122812	0.000	ppm	0
30	RT:42.770	42.771	TIC	197450	38618	0.000	ppm	0
31	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	43.255	TIC	119640	41645	0.000	ppm	0
32	Tentatively Identified Compound	23.698	TIC	882575	199954	0.067		0
33	Tentatively Identified Compound	28.525	TIC	339641	84458	0.026		0
34	Tentatively Identified Compound	21.276	TIC	104262	31974	0.008		0
35	Tentatively Identified Compound	29.347	TIC	97575	32026	0.007		0
36	Tentatively Identified Compound	15.455	TIC	91879	16300	0.007		0
37	Tentatively Identified Compound	11.401	TIC	1045834	43787	0.083		0

ID# Name R.Time m/z Area Height Conc. Conc.Unit R.Index

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Analyzed : 6/21/2024 2:02:54 PM
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 Sample Name : avizu_gerimas_6kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bupfH3_CAR_PDMS
 Sample ID : avizu_gerimas_6kk_2g+50ul va sp
 IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 6
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\6212024_avizu_gerimas_6kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bupfH3_CAR_PDMS_15_...
 Org Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\6212024_avizu_gerimas_6kk_2g+50ul va spiked+10ml fost_bupfH3_CAR_PDMS_15_...
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\HS_SPME 2022 stabilwax_reprocess.qgm
 Org Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project\1\HS-SPME\HS_SPME 2022 stabilwax.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System\Tune\1\2024-06-20.qgt
 Modified by : Admin
 Modified : 6/26/2024 9:34:20 AM

2g+50ul va spiked+10ml fost_bupfH3_CAR_PDMS C:\GCMSsolution\Data\Project\1\HS-SPME\avizu_gerimai_2024\6212024_avizu_gerimas_6kk_2g+50ul va spiked+10ml fos



ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	Ethanol	4.648	TIC	15684637	511856	0.000	ppm	0
2	Butan-2-ol	-	TIC	-	-	N.D.(Ref)	ppm	0
3	Butyrate <ethyl->	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
4	1-Butanol	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
5	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	10.336	TIC	1577604	112747	0.000	ppm	0
6	Methanesulfonyl chloride	-	TIC	-	-	N.D.	ppm	0
7	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	15.092	TIC	2248795	407050	0.000	ppm	0
8	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	-	TIC	-	-	N.D.(Ref)	ppm	0
9	1-Hexanol	15.676	TIC	522119	72784	0.000	ppm	0
10	Acetic acid	18.276	TIC	30456458	4146092	0.000	ppm	0
11	1-Hexanol, 2-ethyl-	19.247	TIC	574107	89473	0.000	ppm	0
12	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	19.477	TIC	1650029	377132	0.000	ppm	0
13	RT:20.065	20.026	TIC	241907	34534	0.000	ppm	0
14	Butanoic acid	22.718	TIC	1467752	328112	0.000	ppm	0
15	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	23.476	TIC	792248	163457	0.000	ppm	0
16	Pentanoic acid	25.202	TIC	30405531	7835278	1.000	ppm	0
17	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	27.027	TIC	423903	113067	0.000	ppm	0
18	Hexanoic acid	27.605	TIC	547288	162535	0.000	ppm	0
19	Hexanoic acid <2-ethyl->	29.730	TIC	136221	30044	0.000	ppm	0
20	Heptanoic acid	29.846	TIC	126525	34264	0.000	ppm	0
21	Cresol	30.174	TIC	408808	107399	0.000	ppm	0
22	Octanoic acid <n->	31.980	TIC	346606	99387	0.000	ppm	0
23	Cyclotetrasiloxane, hexadecamethyl-	33.119	TIC	335741	116009	0.000	ppm	0
24	Nonanoic acid	34.017	TIC	240333	74247	0.000	ppm	0
25	Phenol, 4-ethyl-	-	TIC	-	-	N.D.(W/B)	ppm	0
26	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	35.886	TIC	368571	131948	0.000	ppm	0
27	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	38.478	TIC	288367	113072	0.000	ppm	0
28	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	40.921	TIC	338095	95447	0.000	ppm	0
29	RT:41.310	41.260	TIC	438061	98422	0.000	ppm	0
30	RT:42.770	42.742	TIC	108430	19820	0.000	ppm	0
31	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	43.229	TIC	196480	67648	0.000	ppm	0
32	Tentatively Identified Compound	4.795	TIC	3503728	380680	0.116		0
33	Tentatively Identified Compound	4.990	TIC	1430911	183239	0.047		0
34	Tentatively Identified Compound	22.718	TIC	1313342	320248	0.043		0
35	Tentatively Identified Compound	2.020	TIC	376525	416681	0.012		0
36	Tentatively Identified Compound	44.605	TIC	274350	44705	0.009		0
37	Tentatively Identified Compound	28.486	TIC	230632	57662	0.008		0
38	Tentatively Identified Compound	43.886	TIC	218019	43562	0.007		0
39	Tentatively Identified Compound	10.545	TIC	216626	26527	0.007		0
40	Tentatively Identified Compound	20.589	TIC	215278	55063	0.007		0
41	Tentatively Identified Compound	42.429	TIC	138863	24420	0.005		0
42	Tentatively Identified Compound	2.040	TIC	137704	111040	0.005		0
43	Tentatively Identified Compound	44.150	TIC	132956	32758	0.004		0
44	Tentatively Identified Compound	44.370	TIC	132702	32802	0.004		0
45	Tentatively Identified Compound	44.050	TIC	127829	17866	0.004		0
46	Tentatively Identified Compound	43.070	TIC	120496	21715	0.004		0
47	Tentatively Identified Compound	44.435	TIC	119935	32902	0.004		0
48	Tentatively Identified Compound	44.880	TIC	117927	34095	0.004		0
49	Tentatively Identified Compound	43.553	TIC	114252	30433	0.004		0
50	Tentatively Identified Compound	42.915	TIC	107292	12538	0.004		0
51	Tentatively Identified Compound	35.975	TIC	77878	25573	0.003		0