

Экспрессные методы пробоподготовки
при анализе сложных матриц и
определении летучих ядов.

Хроматографическая идентификация
маркеров гнилостных изменений

Савчук С.А. 2018

ГХ-МС и ВЭЖХ-МС/МС
исследование биообъектов на наличие лекарственных,
сильнодействующих веществ и летучих ядов

Задача исследования: провести исследование тканей мозга, печени и почки крови от трупа Ч-на С.И. 7-ми лет на наличие наркотических средств, психотропных веществ, сильнодействующих или ядовитых летучих веществ, а также лекарственных средств методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС) и методом жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС/МС).

ОПИСАНИЕ ОБЪЕКТА

- На исследование поступили образцы :
 1. Фрагменты головного мозга в пластиковой банке (фото 1).
 2. Фрагменты печени в пластиковой банке (фото 2).
 3. Фрагменты почки в пластиковой банке (фото 3).
- Образцы поступили частично размороженными без видимых гнилостных изменений. Сразу при поступлении были отобраны пробы для анализа, после чего образцы были заморожены и хранились при -20°C .

Внешний вид объектов от трупа Ч-на, поступивших на исследование



Фото 1. Ткани
мозга.



Фото 2.
Фрагменты
печени



Фото 3.
Фрагменты
почки

ПРОБОПОДГОТОВКА (общие замечания)

- Ткани мозга, печени, почки замораживали, выдерживали в течение ночи, размораживали. Для анализа использовали межклеточную и внутриклеточную жидкость образующуюся в результате лизиса после замораживания размораживания образцов. После отбора проб биожидкостей пробы были немедленно заморожены.
- Отобранные для анализа биологические жидкости исследовали на наличие летучих ядов методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием на полярных колонках методом равновесной парогазовой фазы и на наличие лекарственных и психоактивных препаратов методами газовой и жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием.

Подготовка проб межклеточной и внутриклеточной жидкости печени, почки и мозга для исследования на летучие яды

Пробы образцов тканей печени, почки и мозга для парофазного анализа готовили следующим образом. Предварительно образец мышечной ткани выдерживали в морозильной камере в течение 8 ч при -20°C , после чего его размораживали при комнатной температуре. Межклеточную и внутриклеточную жидкость, образовавшуюся в результате разрушения стенок клеточных мембран, собирали и анализировали. Для этого в стандартную хроматографическую виалу вместимостью 2 мл помещали 1 мл межклеточной жидкости и проводили обзорный анализ состава летучих веществ методом анализа равновесной парогазовой фазы. При обзорном анализе внутренний стандарт в пробу не добавляли. При обнаружении этанола в исследуемом образце в концентрации выше 0.2 промилле выполняли повторный количественный анализ с использованием внутреннего стандарта. Внутренний стандарт выбирали таким образом, чтобы он не давал наложений на имеющиеся в пробе летучие вещества.

Подготовка проб межклеточной и внутриклеточной жидкости печени, почки и мозга для исследования на лекарственные и психоактивные вещества

- При проведении ненаправленного анализа из исследуемого объекта необходимо извлекать как неполярные, слабополярные гидрофобные вещества, так и полярные гидрофильные, к которым относится большинство метаболитов/маркеров целевых веществ.
- Для этого использовали две методики жидкость-жидкостной экстракции, отличающиеся тем, что в первом случае в качестве экстрагента использовали бутилацетат – слабополярный эффективный растворитель не смешивающийся в водой. Во втором случае в качестве экстрагента использовали ацетонитрил – полярный растворитель с хорошей извлекающей способностью, смешивающийся в водой в любых соотношениях. Во втором случае для разделения водного и органического слоя, а также для удаления воды и липидов из ацетонитрильного экстракта к пробе добавляли хлорид натрия.

Подготовка проб межклеточной и внутриклеточной жидкости печени, почки и мозга для исследования на лекарственные и психоактивные вещества

- **Извлечение в ацетонитрил.** 800 мкл исследуемых биологических жидкостей помещали в пластиковую пробирку «эппендорф», вместимостью 2 мл, добавляли 300 мг хлорида натрия, 800 мкл ацетонитрила, интенсивно встряхивали на вибромиксере, центрифугировали при 15 тыс. об/мин., отделяли органический слой, упаривали его досуха в токе азота, добавляли 150 мкл ацетонитрила и хроматографировали.
-
- **Извлечение в бутилацетат.** в стандартную стеклянную виалу вместимостью 2000 мкл помещали 1700 мкл исследуемых биологических жидкостей и 270 мкл бутилацетата, встряхивали на вибромиксере 1 мин, центрифугировали при 3000 об/мин в течение 3-х минут и 1 мкл экстракта вводили в хроматограф. При использовании автосамплера иглу шприца позиционировали для отбора инжектируемой пробы из верхнего органического слоя.

АППАРАТУРА ГХ-МС И МЕТОДЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ЭТАНОЛ И ЛЕТУЧИЕ ЯДЫ

Аппаратура ГХ-МС для анализа на этанол и другие летучие вещества:

Скрининговый анализ выполняли на хроматографе масс-селективным детектором «Маэстро» Agilent Technologies 7820/5975N с колонкой HP-FFAP длиной 50 м, внутренним диаметром 0.32 мм, толщиной пленки неподвижной фазы 0.52 мкм.

Условия хроматографирования:

Газ-носитель – гелий марки А, постоянный поток через колонку - 1.3 мл/мин, ввод парогазовой пробы объемом 50 мкл с делением потока 1/20. Температура инжектора - 180°C, интерфейса - 190°C. Программа термостата колонок: 60°C (4 мин) 100°C/мин 190°C (30 мин).

Условия масс-спектрометрического детектирования:

Анализ выполняли в режиме сканирования по полному ионному току (SCAN), температура источника ионов - 230°C, температура анализатора - 150°C. Диапазон масс - m/z 29-350 а.е.м. Напряжение на умножителе: результат, полученный при автоматической настройке по перфторбутиламину в режиме ATUNE + 100 кВ.

АППАРАТУРА И МЕТОДЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ПСИХОАКТИВНЫЕ И ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ВЕЩЕСТВА

Аппаратура ГХ-МС: Скрининговый анализ выполняли на хроматографе с масс-селективным детектором мод. «Маэстро» Agilent Technologies 7820/5975N с колонками HP-5MS.

Условия анализа: газ-носитель гелий, скорость потока через колонку 2 мл/мин. Программа: 50°C (0.5мин) 99°C /мин 100°C (1мин) 15°C/мин 280°C (30 мин). Режим ввода пробы: splitless (без деления потока).

Условия масс-спектрометрического детектирования:

Анализ в режиме сканирования по полному ионному току (SCAN)

Температура источника ионов 230°C

Температура анализатора 150°C

Диапазон масс m/z 29-650 а. е. м.

Напряжение на умножителе: результат, полученный при автоматической настройке по перфторбутиламину в режиме ATUNE + 100 кВ.

В режиме скринингового анализа выполняли определение 780 наркотических и сильнодействующих веществ.

Условия хроматографирования: хроматограф газовый Agilent 7890A с масс-селективным детектором Agilent 5975C, капиллярная кварцевая колонка HP-5MS 30m, 0.25 mm, 0.25 μ m, газ-носитель - гелий марки А, постоянный поток 1,2 мл/мин. Объем вводимого образца 1 мкл, без разделения потока. Температура инжектора 270°C, интерфейса 280°C. Программа термостата колонок: 0.5 минут при 50°C, подъем температуры до 100°C со скоростью 70 град/мин, выдержка 0.8 минут при 100°C, подъем температуры до 280°C со скоростью 15 град/мин, выдержка 30 минут при 280°C. Задержка на пик растворителя 3 мин. Регистрация масс-спектров в режиме сканирования полного сканирования (TIC).

Идентификацию проводили с помощью программы AMDIS, библиотеки масс-спектров MPW2011, SUDMED_2444_AMDISLIB_20182444

АППАРАТУРА ВЭЖХ-МС/МС И МЕТОД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ПСИХОАКТИВНЫЕ И ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ВЕЩЕСТВА

ВЭЖХ-МС/МС Toxtuper Bruker. Детектор - трехмерная ионная ловушка с жидкостным хроматографом Dionex Ultimate 3000, унифицированным методическим обеспечением, библиотекой масс-спектров MS1, MS2, MS3 и времен удерживания целевых соединений на 1200 веществ.

Таблица 1. Параметры и условия ВЭЖХ

Хроматографическая система LC-System	Dionex Ultimate 3000 RS Pump, HPG-3200RS
Хроматографическая колонка (Column)	Acclaim® RSLC 120 C18 2.2 µm, 120A 2.1 x 100 mm (Dionex)
Температура колонки (°C)	40
Растворитель А (Eluent A)	Деионизованная вода (HPLC grade), 0.1 % муравьиной кислоты, 2 mM формиата аммония, 1 % ацетонитрил.
Растворитель В (Eluent B)	Ацетонитрил (HPLC grade), 0.1 % муравьиной кислоты, 2 mM формиата аммония, 1 % деионизованной воды
Тип ввода (Injection Type)	Needle Wash
Объем вводимой пробы, мм3 (мкл, Injection Volume, µl)	5

АППАРАТУРА ВЭЖХ-МС/МС И МЕТОД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ПСИХОАКТИВНЫЕ И ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ВЕЩЕСТВА

ВЭЖХ-МС/МС Toxtuper Bruker. Детектор - трехмерная ионная ловушка с жидкостным хроматографом Dionex Ultimate 3000, унифицированным методическим обеспечением, библиотекой масс-спектров MS1, MS2, MS3 и времен удерживания целевых соединений на 1200 веществ.

Таблица 2. Условия градиентного режима подачи элюента

Время, мин	Скорость потока элюента, см ³ /мин	Содержание элюента В, %
0	0,5	1
1	0,5	1
8	0,5	99
9	0,5	99
9.06	0,5	1
11	0,5	1

АППАРАТУРА ВЭЖХ-МС/МС И МЕТОДЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ПСИХОАКТИВНЫЕ И ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ВЕЩЕСТВА

Таблица 3. Параметры и условия масс-спектрометрического детектирования

Параметры источника (Source Parameters)	Значение при детектировании положительных ионов	Значение при детектировании отрицательных ионов
Dry Temp (°C)	320	320
Gas Flow (l/min)	8	8
Nebulizer (bar)	2	2
Capillary (V)	4500	4500
End Plate Offset (V)	500	500
MS/MS Frag Amp (V)	0.8	0.8
Режим детектирования 1 (pos/neg)*	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 a.e.m. Method: Toxtuper.M (регистрация только в окнах поиска целевых веществ) в режиме регистрации положительных ионов	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 a.e.m. Method: Toxtuper.M (регистрация только в окнах поиска целевых веществ) в режиме регистрации отрицательных ионов
Режим детектирования 2 (pos)	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 a.e.m. Method: Toxtuper_positive.M (регистрация в окнах поиска целевых веществ и в режиме Auto MSn для нецелевых компонентов) в режиме регистрации только положительных ионов	
Режим детектирования 3 (neg)		MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 a.e.m. Method: Toxtuper_positive.M (регистрация в окнах поиска целевых веществ и в режиме Auto MSn для нецелевых компонентов) в режиме регистрации только отрицательных ионов

Результаты ГХ-МС анализа на наличие летучих ядов (проб не измененных гниением)

Почка (биожидкость)

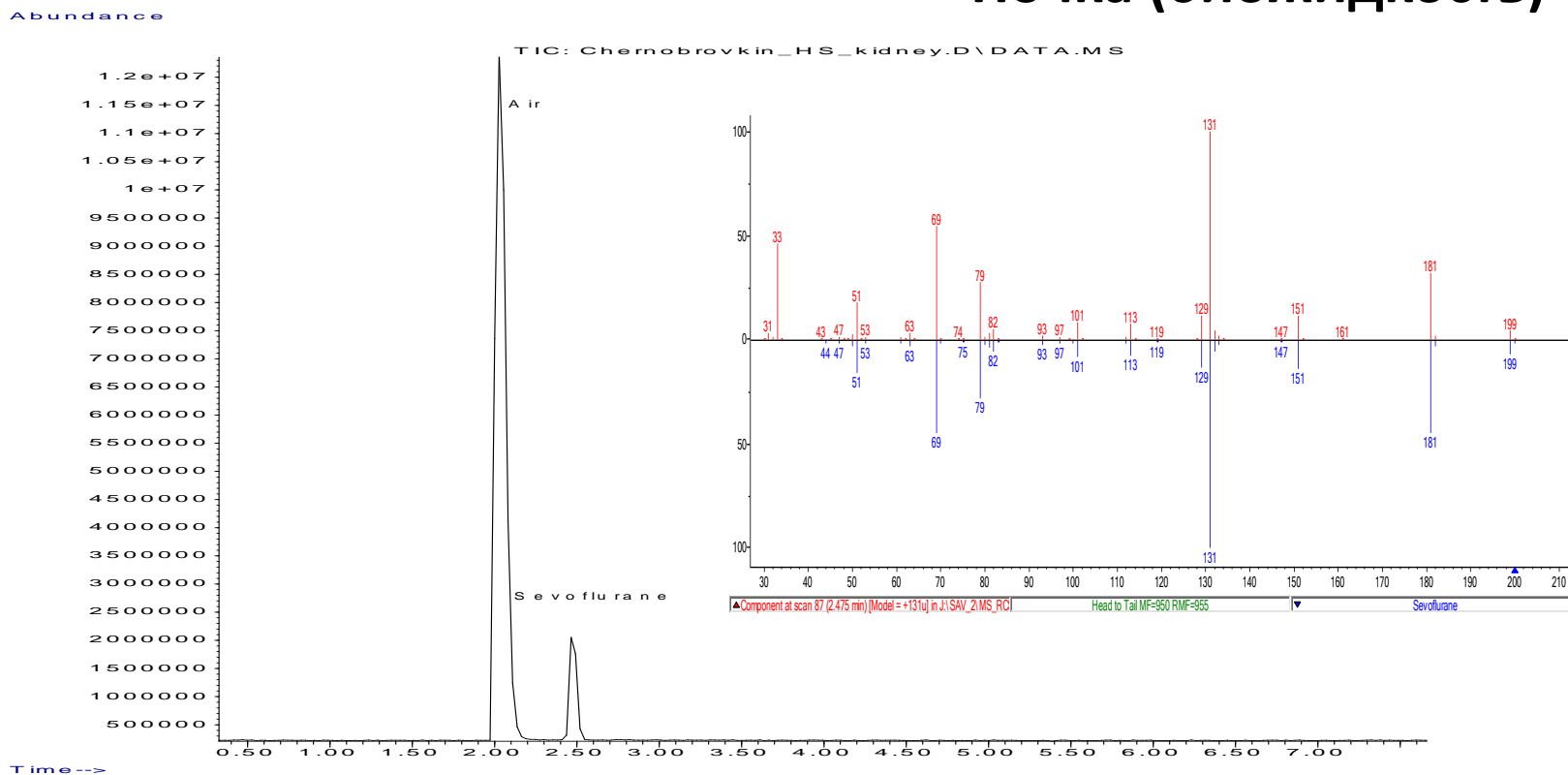
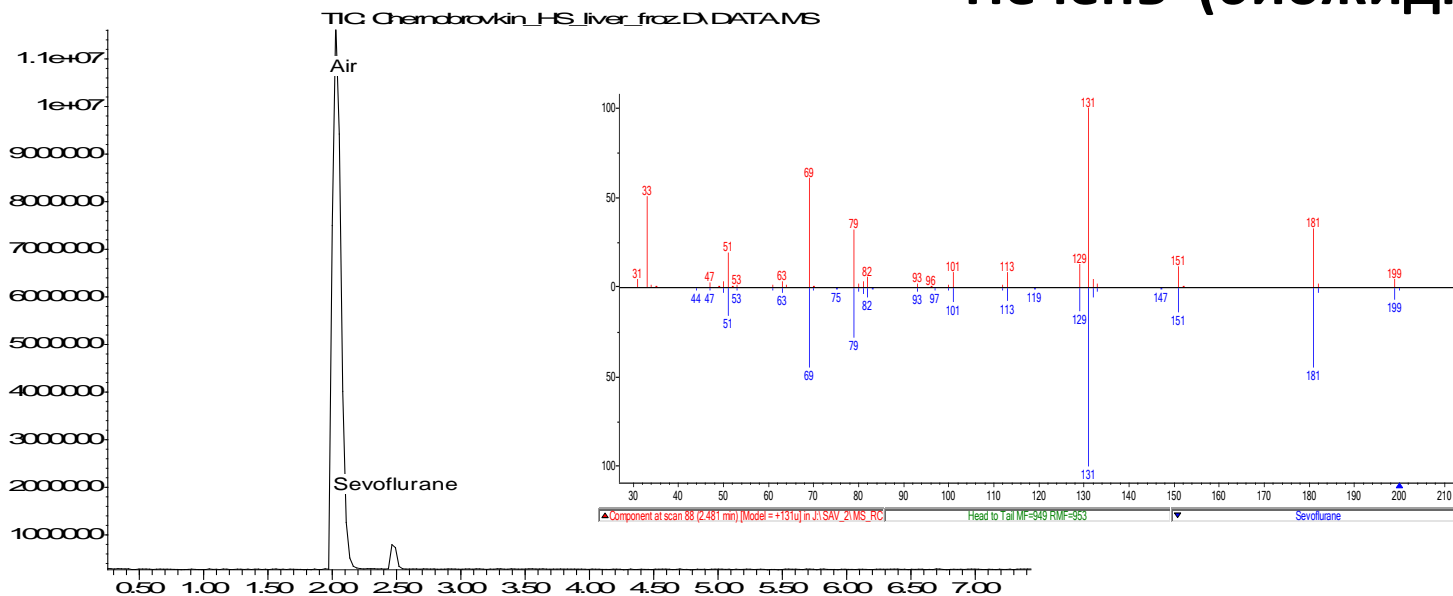


Рис.1. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования парогазовой фазы межклеточной и внутриклеточной жидкости почки от трупа Ч-на. Пик с временем удерживания 2.49 мин – севофлуран.

Результаты ГХ-МС анализа на наличие летучих ядов (проб не измененных гниением)

Abundance



Печень (биожидакость)

Рис.1. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования парогазовой фазы межклеточной и внутриклеточной жидкости печени от трупа Ч-на. Пик с временем удерживания 2.49 мин – **севофлуран**.

Результаты ГХ-МС анализа на наличие летучих ядов (проб не измененных гниением)



Рис.1. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования парогазовой фазы межклеточной и внутриклеточной жидкости тканей мозга от трупа Ч-на. Пик с временем удерживания 2.49 мин – севофлуран.

Содержание севофлурана в тканях мозга было в **6** раз меньше чем в почке печени и **20** раз меньше чем в почке.

Микробные маркеры как критерий гнилостных изменений в биологических материалах

Возможности ГХ-МС анализа для идентификации микробных маркеров.

Химический состав мембраны бактериальной стенки микроорганизмов характеризуется большим разнообразием жирных кислот, альдегидов и стеринов. В настоящее время их насчитывается более двухсот пятидесяти. В то время как в организме человека насчитывается около двадцати пяти. Это обстоятельство определяет возможность родового или видового анализа инфекций и дисбиозов на преобладающем фоне биологического объекта непосредственно в клиническом материале. Наиболее часто встречающиеся в клинических пробах жирные кислоты, альдегиды и стерины перечислены в табл. 1 с отнесением к вероятным таксонам микроорганизмов [1-2].

Подготовка пробы и метод ГХ-МС анализа. В основе количественного определения микроорганизмов (клеток/грамм) использовали масс-спектрометрический метод микробных маркеров: при подготовке к хромато-масс-спектрометрическому анализу пробу подвергали кислоте метанолизу в 1M HCl в метаноле. Метанолиз проводили в 0,4 мл реактива на 10–15 мг сухого остатка в течение 1 ч при 80 °С. На этой стадии происходило освобождение жирных кислот и альдегидов из сложных липидов микроорганизмов и других клеток жидкости в виде метиловых эфиров и диметилацеталей. Эти компоненты экстрагировали гексаном (400 мкл) в течение 5 мин, гексановый экстракт высушивали, а сухой остаток обрабатывали 20 мкл N,O-бис(триметил-силил)-трифторацетамида в течение 15 мин при 80 °С для получения триметилсилильных эфиров окси-кислот и стеролов. К реакционной смеси эфиров добавляли 80 мкл гексана, и 1-2 мкл раствора вводили в инжектор ГХ-МС системы.

Высшие жирные кислоты в составе клеточной стенки с отнесением к микроорганизмам:

№	Обозначение	Название	Микроорганизмы
Жирные кислоты			
1	C10	Декановая	Streptococcus
2	i11	Изоундекановая	Stenotrophomonas,
3	C12:0	Лауриновая	Arcobacter,
4	iC12	Изолауриновая	Peptostreptococcus anaerobius
5	iC13	Изотридекановая	Stenotrophomonas maltophilia, Bacillus subtilis,
6	a13	Антеизотридекановая	Bacillus cereus, Brevibacterium
7	13:0	Тридекановая	Selenomonas
8	i14	Изомиристиновая	Streptomyces, Bacillus, актинобактерии
9	14:1Δ9	9,10-тетрадеценовая	Clostridium, Streptococcus pneumonia
10	14:1Δ11	11,12-тетрадеценовая	Simonsiella, Nocardia, Kingella kingae
11	14:0	Миристиновая	Lactobacillus, Helicobacter, Campylobacter, Streptococcus, Clostridium
12	2Me14	2-метил-тетрадекановая	Mycobacterium gordonae
13	i15:1	Изопентадеценовая	Flavobacterium
14	15:1Δ9	9,10-пентадеценовая	Clostridium propionicum, Bacteroides hypermegas
15	i15	Изопентадекановая	Propionibacterium, Bacteroides
16	a15	Антеизопентадекановая	Staphylococcus, Bacillus, коринеформные бактерии
17	15:0	Пентадекановая	Большинство видов микроорганизмов, минорный компонент, Selenomonas, Clostridium sporogenes, Bacteroides succinogenes, Bact. ruminicola, Pseudomonas stutzeri

Высшие жирные кислоты в составе клеточной стенки с отнесением к микроорганизмам (продолжение таблицы):

17	15:0	Пентадекановая	Большинство видов микроорганизмов, минорный компонент, <i>Selenomonas</i> , <i>Clostridium sporogenes</i> , <i>Bacteroides succinogenes</i> , <i>Bact. ruminicola</i> , <i>Pseudomonas stutzeri</i>
18	i16:1	Изогексадеценная	<i>Desulfovibrio</i>
19	16:1Δ7	7,8-гексадеценная	<i>Clostridium ramosum</i> , <i>Streptococcus</i>
20	16:1Δ9	9,10-гексадеценная	Большинство видов микроорганизмов
21	16:1Δ11	11,12-гексадеценная	<i>Ruminococcus</i>
22	i16:0	Изопальмитиновая	<i>Streptomyces</i> , <i>Nocardiosis</i> ,
23	10Me16	10-метилгексадекановая	<i>Rhodococcus</i>
24	16:0	Пальмитиновая	Большинство видов микроорганизмов
25	i17:1	Изопентадеценная	<i>Campylobacter mucosales</i>
26	17:1	Гептадеценная	<i>Mycobacterium</i> , <i>Candida albicans</i>
27	i17:0	Изогептадекановая	<i>Bacillus</i> , <i>Propionibacterium</i> , <i>Prevotella</i>
28	a17:0	Антеизогептадекановая	<i>Corynebacterium</i> , <i>Bacteroides</i> , <i>Nocardiosis</i> , <i>Nocardia</i>
29	17сус	Циклогептадекановая	сем. <i>Enterobacteriaceae</i>
30	17:0	Гептадекановая	Большинство видов микроорганизмов, минорный компонент
31	18:4	Октадекатетраеновая	Некоторые грибы и дрожжи
32	18:3	Линоленовая	Грибы и дрожжи
33	18:2	Линолевая	Грибы, дрожжи, простейшие
34	18:1Δ9	Олеиновая	Все организмы
35	i18:1 Н		<i>Enterococcus faecalis</i>
36	18:1Δ11	Цис-вакценная	<i>Lactobacillus</i> , <i>Streptococcus</i> , <i>Pseudomonas</i> , <i>Cardiobacterium hominis</i>
37	18:0	Стеариновая	Многие микроорганизмы

Состав и количество микроорганизмов в образцах тканей печени и почки от трупа Ч-на (почка и печень) до и после развития гнилостных изменений (по данным ГХ-МС анализа)

Кислоты – маркеры микроорганизмов		Микроорганизмы	Количество микроорганизмов в образцах ткани, 10 ⁵ клеток/грамм			
			почка		печень	
			неизмен	измен	неизмен	измен
Антеизотридекановая	a13:0	Bacillus cereus	0	0	0	0
Антеизопентадекановая	a15:0	Bacillus megaterium	0	0	0	0
11,12-Эйкозеновая	20:1Δ11	Streptococcus mutans (анаэробные)	1 390	19916	3 157	19 340
Изононадекановая	i19:0	Staphylococcus epidermidis	0	0	0	0
3-гидрокси-изогептадекановая	3hi17	Bacteroides fragilis	0	783	0	675
Изооктадекановая	i18:0	Clostridium difficile	0	0	0	0
9,10-тетрадеценовая	14:1Δ9	Cl. hystolyticum/Str. pneumonia	311	961	514	287
Копростанол		Eubacterium spp.	898	1528	734	3 232
3-гидрокси пальметиновая	3h16	Fusobacterium spp	0	3036	0	5 539
Изопентадекановый	i15a	Propionibacterium acnes	0	307	0	1 546

Контроль постмортального этилглюкуронида в биологических жидкостях, извлеченных из тканей мозга, почки, печени, подвергшихся гнилоственному изменению с образованием этанола 0.5-1.2 г/л

Condition of determination of Ethyl Glucuronide in blood by HPLC-MS/MS (IT)Toxyper Bruker

MS/MS detector: Amazon Speed Ion Trap Bruker

HPLC: Dionex Ultimate 3000 with column Acclaim[®] RSLC 120 C18 2.2 μ m, 120A 2.1 \times 100 mm (Dionex).

HPLC conditions were the same for both HPLC-MS/MS systems Toxyper and Impact

Eluent A: deionized water (HPLC grade), 0.1% formic acid, 2 mM ammonium formate, 1% acetonitrile.

Eluent B: Acetonitrile (HPLC grade), 0.1% formic acid, 2 mM ammonium formate, 1% deionized water.

Isocratic mode 5 % eluent B.

Column flow 0.3 ml/min, temperature of the column thermostat 40 ° C.

Injected volume 5 μ l.

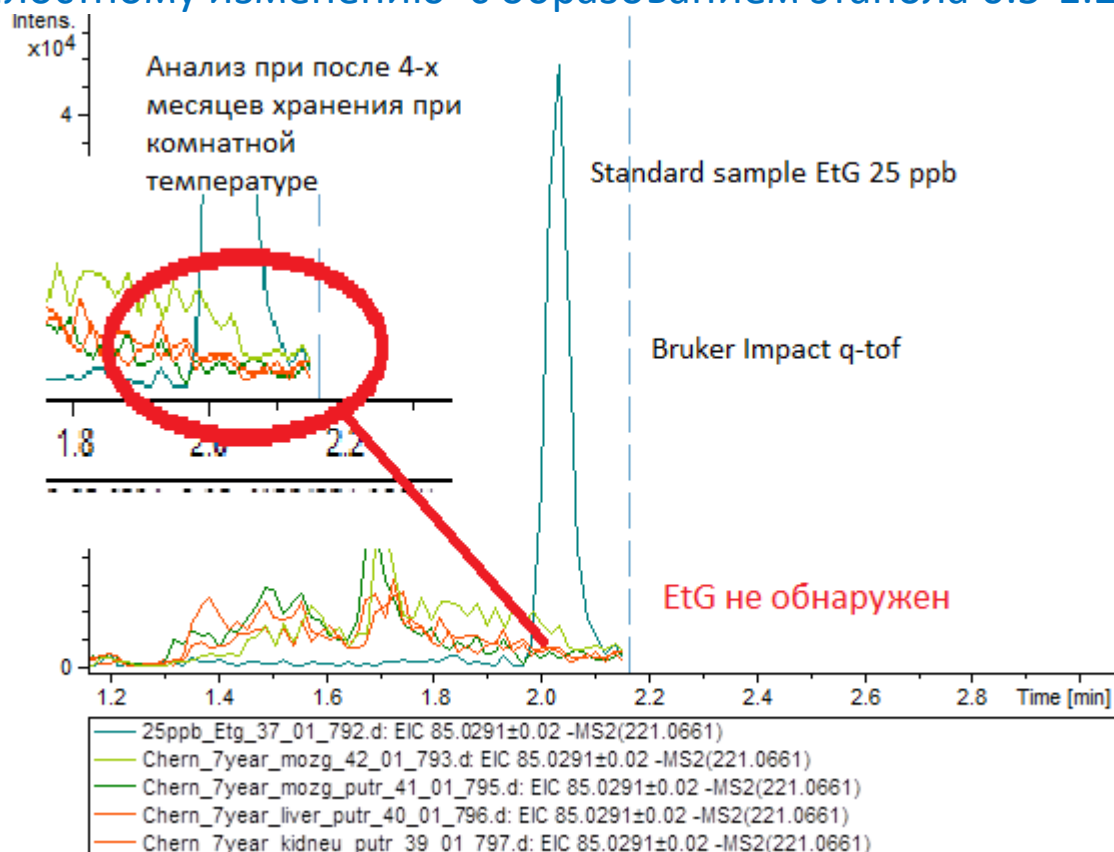
MS/MS condition (Toxyper):

Detection of MS2 spectra in the negative MRM mode. Precursor ions - m/z 221 - 85.

Source Parameters: Dry Temp - 156⁰C , vaporizer temp 350⁰C Gas Flow - 3.0 l/min + shears gas, Nebulizer pressure - 2.0 bar.

Для q-tof Impact Bruker Maxis II: Precursor ions - m/z 221.0661- 85.0291, negative mode

Контроль постмортального этилглюкуронида m/z 221.0661 в биологических жидкостях, извлеченных из тканей мозга, почки, печени, подвергшихся гнилоственному изменению с образованием этанола 0.5-1.2 г/л



Биологические жидкости из тканей мозга, почки, печени, подвергшихся гнилоственному изменению, анализировали после 1-го, 2-х, 3-х и 4-х месяцев хранения при комнатной температуре на приборах Bruker Toxtyper, Impact Maxis
Этилглюкуронид не был обнаружен ни в одном из исследованных случаев

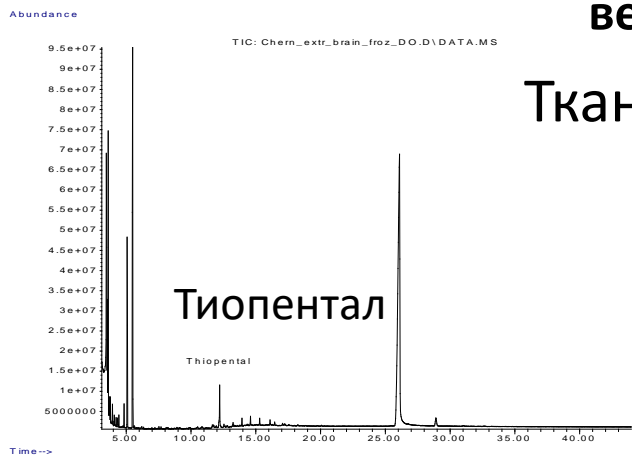
Выводы по результатам определения летучих веществ

- В биологических жидкостях, извлеченных из тканей мозга, печени и почки обнаружен севофлюран. Других летучих веществ, в том числе этанола, не обнаружено.
- При повторном анализе, выполненном после хранения аликвот извлеченных биожидкостей в течение 8 часов при комнатной температуре и последующих 36 часов в холодильнике во всех пробах был обнаружен этанол в концентрации от 0.5 до 1.2 промилле.
- На основании первых результатов анализа неизмененных тканей, а наличия маркеров микробиальной активности и отсутствия этилглюкуронида в исследуемых пробах можно утверждать, что обнаруженный в пробах этанол образовался при ненадлежащем хранении проб

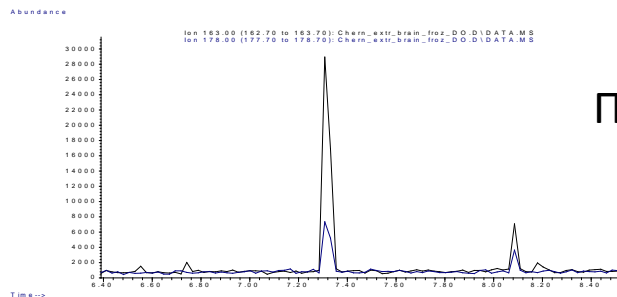
Результаты ГХ-МС анализа на наличие психоактивных и лекарственных веществ FULL SCAN, DOAS

Ткани мозга

Тиопентал



Пропофол



Тиопентал

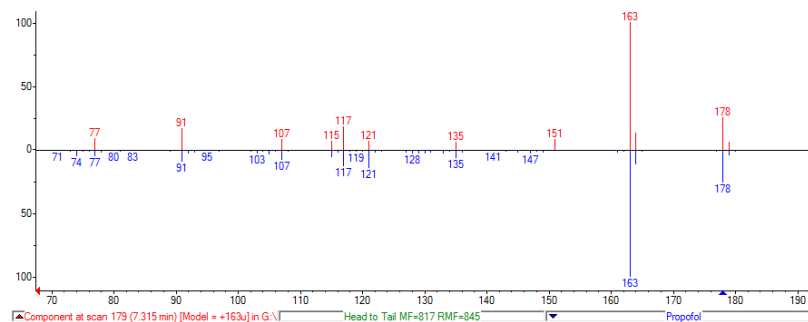
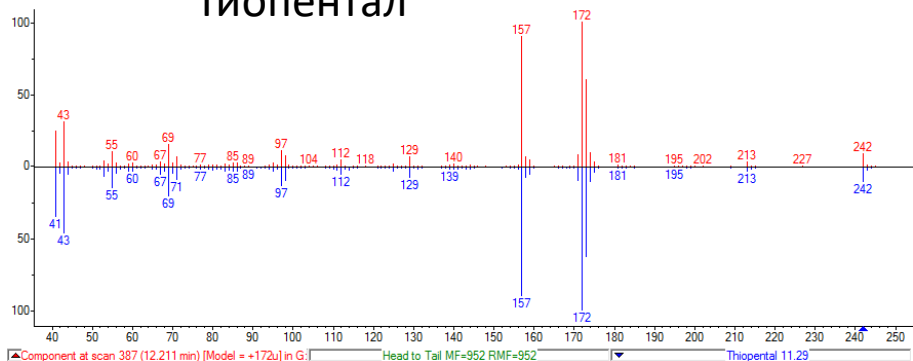


Рис.4. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования экстракта межклеточной и внутриклеточной жидкости тканей мозга от трупа Ч-на.

В пробе обнаружены: тиопентал и пропофол с метаболитами

Пробоподготовка: первая аликвота -экстракция бутилацетатом, вторая аликвота – экстракция ацетонитрилом с высаливанием

Результаты ГХ-МС анализа на наличие психоактивных и лекарственных веществ FULL SCAN, DOAS

Ткани печени

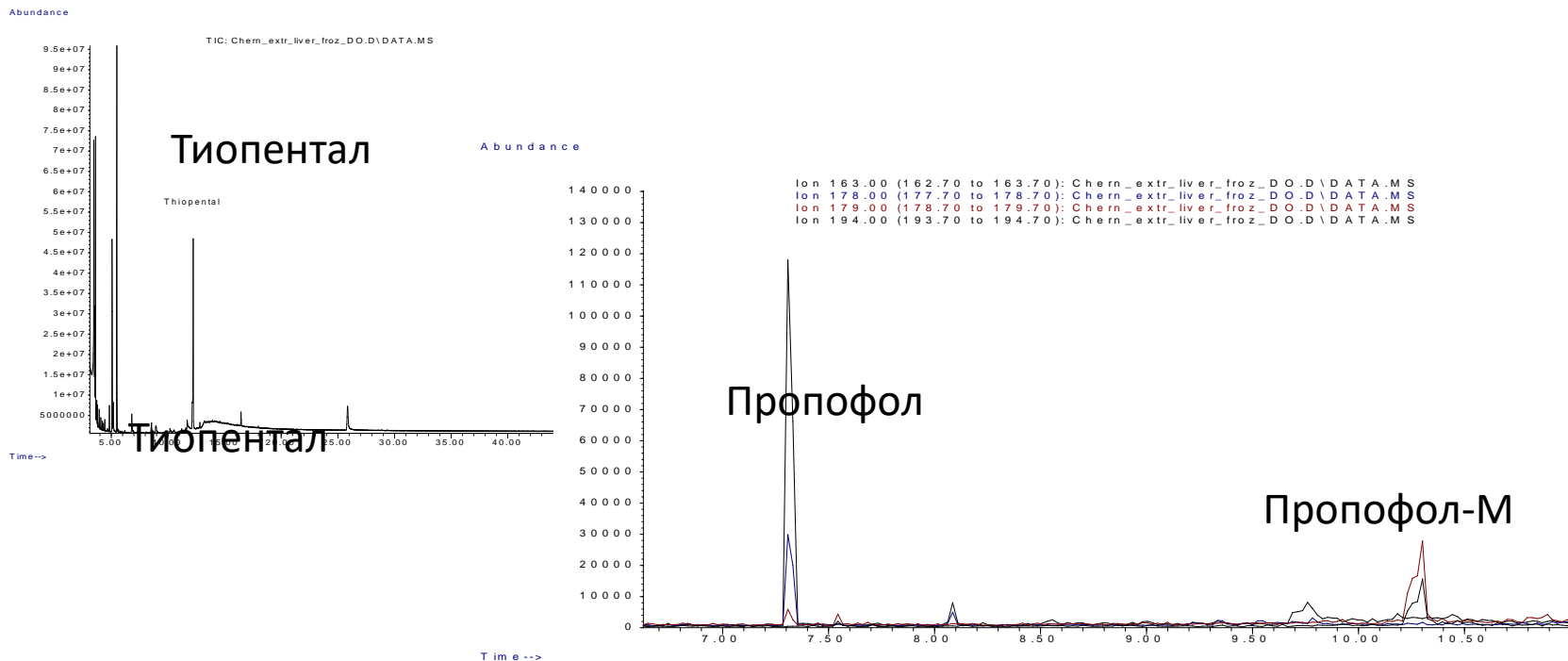


Рис.5. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования экстракта межклеточной и внутриклеточной жидкости тканей печени от трупа Ч-на. В пробе обнаружены: тиопентал и пропофол

Пробоподготовка: первая аликвота -экстракция бутилацетатом, вторая аликвота – экстракция ацетонитрилом с высаливанием

Результаты ГХ-МС анализа на наличие психоактивных и лекарственных веществ FULL SCAN, DOAS

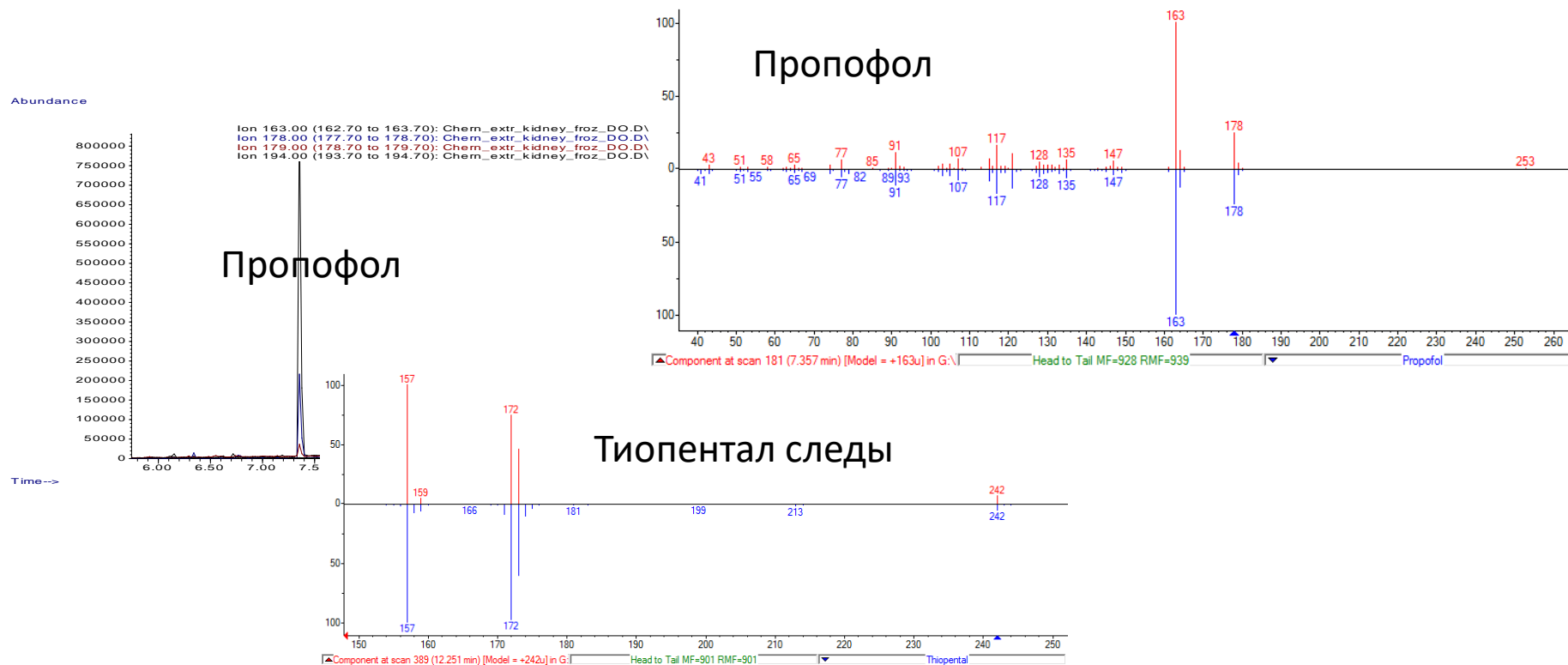


Рис.5. Хроматограмма ГХ-МС в режиме полного сканирования экстракта межклеточной и внутриклеточной жидкости тканей почки от трупа Ч-на.

В пробе обнаружены: тиопентал и пропофол

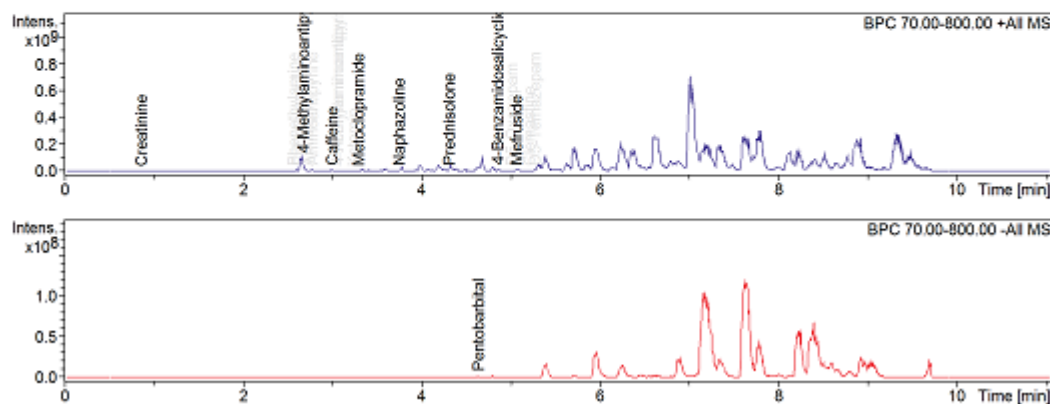
Пробоподготовка: первая аликвота -экстракция бутилацетатом, вторая аликвота – экстракция ацетонитрилом с высаливанием

Результаты ВЭЖХ-МС/МС анализа на наличие психоактивных и лекарственных веществ

Toxtyper Analysis Report

Sample-ID	Station
Submitter	Method toxtyper_custom
Analysis Name Ch liver_5 ml_RE8_01_7120.D	Acquisition Date 6/11/2018 1:38:08 PM
Sample Description	

Base Peak Chromatogram



Library Search Results

Cmp Name	cmp #	Purity	RT [min]	d RT	m/z [Da]	d m/z	Intensity	ID	Comment
4-Methylaminoantipyrine	4	972	2.67	-0.02	217.95	0.05	1.0 E8	MS2	
Aminoantipyrine	6	980	2.77	-0.02	203.89	0.11	1.4 E7	MS2	
Prednisolone	13	970	4.30	-0.12	361.08	0.12	9.2 E6	MS2	
Caffeine	7	996	3.00	-0.09	194.95	-0.03	8.3 E6	MS2/MS3	
Paracetamol	3	998	2.61	0.02	151.87	0.04	7.8 E6	MS2/MS3	
Clemastine	18	934	5.20	-0.18	344.10	-0.14	6.2 E6	MS2	
4-Benzamidosalicylic acid	15	981	4.85	0.02	258.17	-0.27	5.1 E6	tentative	MS2 unspecific
Metoprolamide	11	997	3.29	-0.13	300.07	-0.16	4.5 E6	MS2/MS3	
Phenethylamine	2	994	2.56	-0.01	122.00	-0.05	1.5 E6	MS2/MS3	MS2 unspecific
4-Formylaminoantipyrine	8	998	3.06	-0.08	231.93	0.08	1.2 E6	MS2	
D5-Temazepam	19	890	5.26	-0.23	306.19	-0.21	8.9 E5	MS2	
Naphazoline	12	843	3.74	0.27	211.00	-0.10	8.1 E5	MS2	
4-Acetylaminoantipyrine	9	966	3.06	-0.09	245.98	0.05	6.4 E5	MS2/MS3	MS2 unspecific
Mefruside	17	887	5.06	-0.12	383.04	-0.20	6.1 E5	tentative	
Ketamin	10	974	3.23	-0.07	237.96	0.05	5.5 E5	MS2	
Amidopyrine	5	893	2.72	-0.05	231.95	-0.05	4.8 E5	MS2	
D5-Oxazepam	16	925	5.01	-0.03	292.21	-0.29	3.3 E5	MS2	
Amobarbital	14	996	4.63	-0.29	225.01	0.03	1.5 E5	MS2	
Pentobarbital		939	4.63	-0.13	225.01	-0.01	1.5 E5	MS2	
Creatinine	1	718	0.86	0.33	113.99	0.11	4.5 E4	MS2	

Ткани печени