

ภาคผนวก ก
การวิเคราะห์ทางเคมี

1. การคำนวณค่า Retention Index (RI)

$$RI = 100 N + 100 n \frac{t_{Ra} - t_{RN}}{t_{R(N+n)} - t_{RN}}$$

- เมื่อ N = จำนวนอะตอมของคาร์บอนในสารมาตรฐานอัลเคนที่มีคาร์บอนน้อยกว่าตัวอย่าง
- n = ความแตกต่างระหว่างจำนวนอะตอมของคาร์บอนในสารมาตรฐานอัลเคน 2 ตัวที่ค่า retention time (RT) ของตัวอย่างอยู่ระหว่างกลาง
- t_{Ra} = RT ของตัวอย่างสารระเหยที่ต้องการวิเคราะห์ค่า RI
- t_{RN} = RT ของสารมาตรฐานอัลเคนที่มีคาร์บอนน้อยกว่าตัวอย่าง
- $t_{R(N+n)}$ = RT ของสารมาตรฐานอัลเคนที่มีคาร์บอนมากกว่าตัวอย่าง

2. การคำนวณความเข้มข้นสัมพัทธ์ของสารระเหย

$$C_s = \frac{C_I \times A_s \times V_I \times r}{A_I \times W_s}$$

- เมื่อ C_s = ความเข้มข้นสัมพัทธ์ของตัวอย่าง (นาโนกรัม/มิลลิลิตร ตัวอย่าง หรือ ppb)
- C_I = ความเข้มข้นของ internal standard (มิลลิกรัม/มิลลิลิตร)
- A_s = พื้นที่ใต้พีคของตัวอย่าง
- A_I = พื้นที่ใต้พีคของ internal standard
- V_I = ปริมาตรของ internal standard ที่ใช้ (ไมโครลิตร)
- W_s = ปริมาตรของตัวอย่างที่ใช้วิเคราะห์ (มิลลิลิตร)
- r = response factor ของสารระเหยที่คำนวณจากกราฟมาตรฐานนั้นๆ โดย r ของ ethyl decanoate, 2-undecanone, delta-decalactone และ delta-undecalactone เท่ากับ 0.8, 1.1, 0.9 และ 1.1 ตามลำดับ และกำหนดให้ r ของสารระเหยอื่นๆ เท่ากับ 1.0

3. การทำกราฟมาตรฐานของสารระเหยมาตรฐาน

เตรียมสารระเหยของสารระเหยมาตรฐาน ethyl decanoate, 2-undecanone, δ -decalactone และ δ -undecalactone ที่ระดับความเข้มข้นต่าง ๆ กัน โดยเติมสารละลายผสมของสารระเหยมาตรฐาน (ความเข้มข้นอย่างละ 100 มิลลิกรัม/มิลลิลิตรใน diethyl ether) 1, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 100, 500 และ 1,000 ไมโครลิตร ตามลำดับ ลงในขวดเตรียมสารที่มีสารละลายของ internal standard (2-methyl-3-heptanone, 6-undecanone และ 2-ethylbutyric acid อย่างละ 20 มิลลิกรัม/มิลลิลิตร ในตัวทำละลาย diethyl ether) 1 มิลลิลิตร ปรับปริมาตรให้ได้ 10 มิลลิลิตร แล้ววิเคราะห์ตัวอย่าง 1 ไมโครลิตร ด้วยเครื่อง GC-MS เพื่อหาพื้นที่ใต้พีคของสารระเหยมาตรฐานแต่ละชนิดกับ internal standard คำนวณอัตราส่วนของพื้นที่ใต้พีคและน้ำหนักของสารระเหยมาตรฐานต่อ internal standard ที่แต่ละระดับการเจือจาง แล้วสร้างกราฟมาตรฐาน ดังภาพผนวกที่ 1 เพื่อหาค่าความชัน แล้วคำนวณเป็น response factor (1/ความชันจากกราฟมาตรฐาน