

### บทที่ 3

#### ผลการทดลอง

#### ผลการทดลองตอนที่ 1

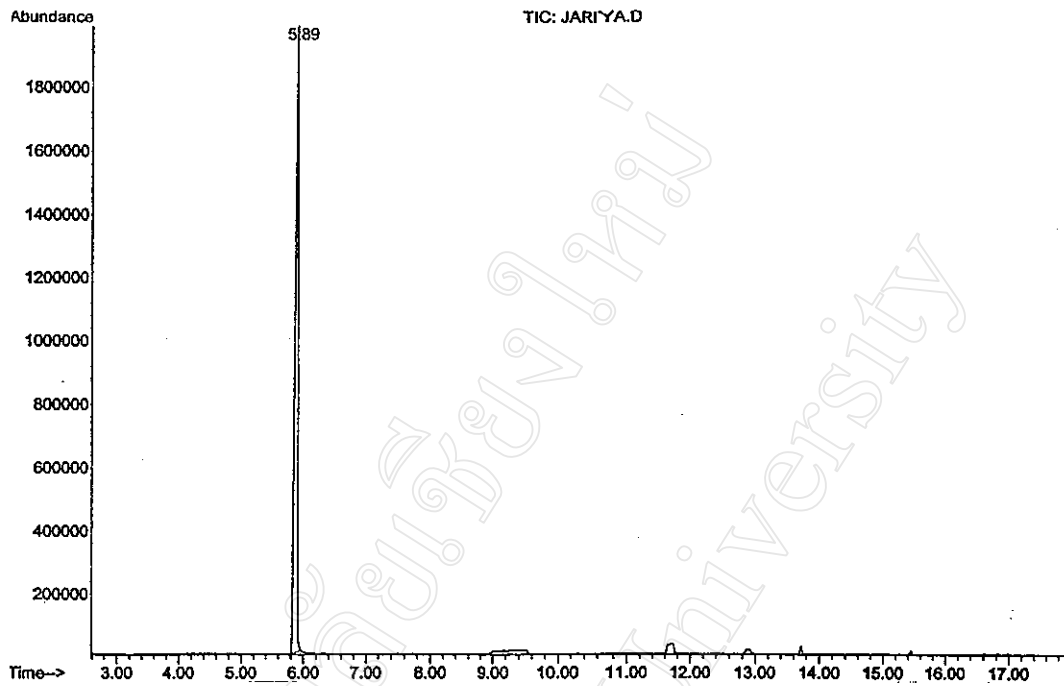
การตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในเมล็ดข้าวโดยอาศัยการเกิดปฏิกิริยาเคมีกับรีเอเจนต์ 2-aminobenzaldehyde

##### 3.1 ผลการสังเคราะห์สารหอม 2-acetyl-1-pyrroline

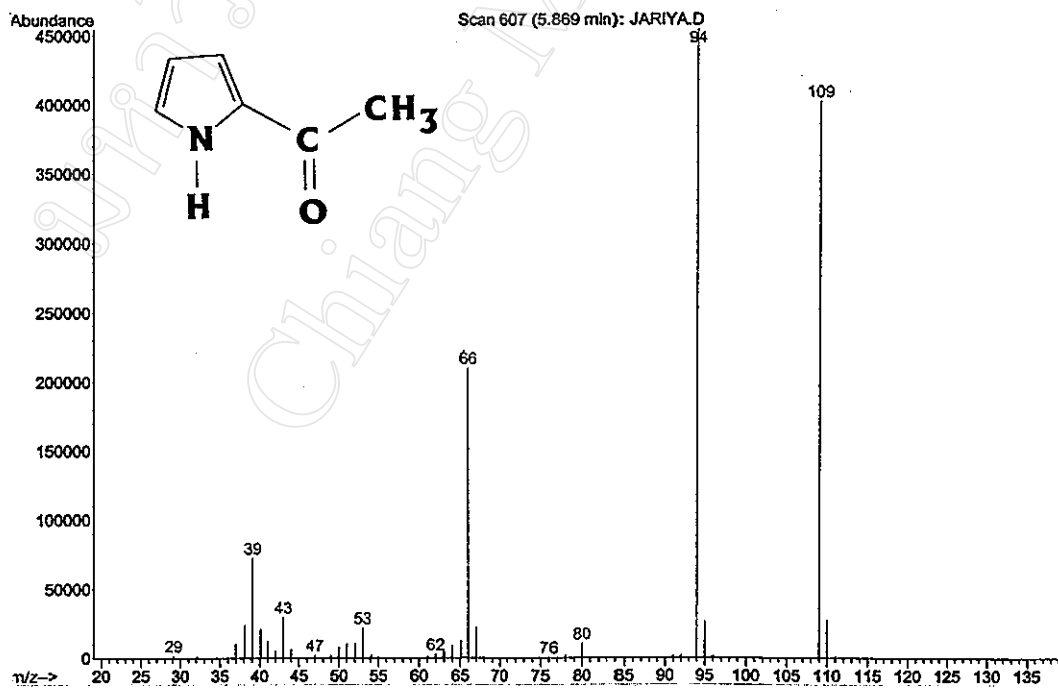
ในการสังเคราะห์สารหอม 2-acetyl-1-pyrroline เพื่อใช้เป็นสารมาตรฐานในการบอกชนิดและปริมาณของสารหอมในตัวอย่างข้าวนั้น สามารถเตรียมโดยนำสารตั้งต้น 2-acetylpyrrole มาทำปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชัน โดยมี 5% rhodium on activated alumina เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาในตัวทำละลายเมทานอล ได้ 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine เป็นผลผลิต และเมื่อนำผลผลิตที่ได้มาระเหยตัวทำละลายออก ได้สารที่มีลักษณะเป็นของเหลวสีเหลืองใส ก่อนข้างหนีด 0.4456 กรัม คิดเป็น % yield เท่ากับ 63.66 จากนั้นนำมาทำปฏิกิริยาออกซิเดชันต่อ โดยมี silver carbonate on celite เป็นตัวออกซิไดซ์ในตัวทำละลายเบนซีน ได้สารหอม 2-acetyl-1-pyrroline เป็นผลผลิตหลักในตัวทำละลายเบนซีน 18.80 มิลลิลิตรซึ่งมีลักษณะเป็นสีน้ำตาลอ่อน โดยมีเปอร์เซ็นต์ความบริสุทธิ์เท่ากับ 83.431 และมีปริมาณสาร 2-acetyl-1-pyrroline เท่ากับ 358.39 มิลลิกรัม คิดเป็น % yield เท่ากับ 80.43 ในตัวทำละลายเบนซีน 18.80 มิลลิลิตร (ดูวิธีการคำนวณในภาคผนวก)

### 3.2 ผลการวิเคราะห์ผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาการสังเคราะห์สารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี

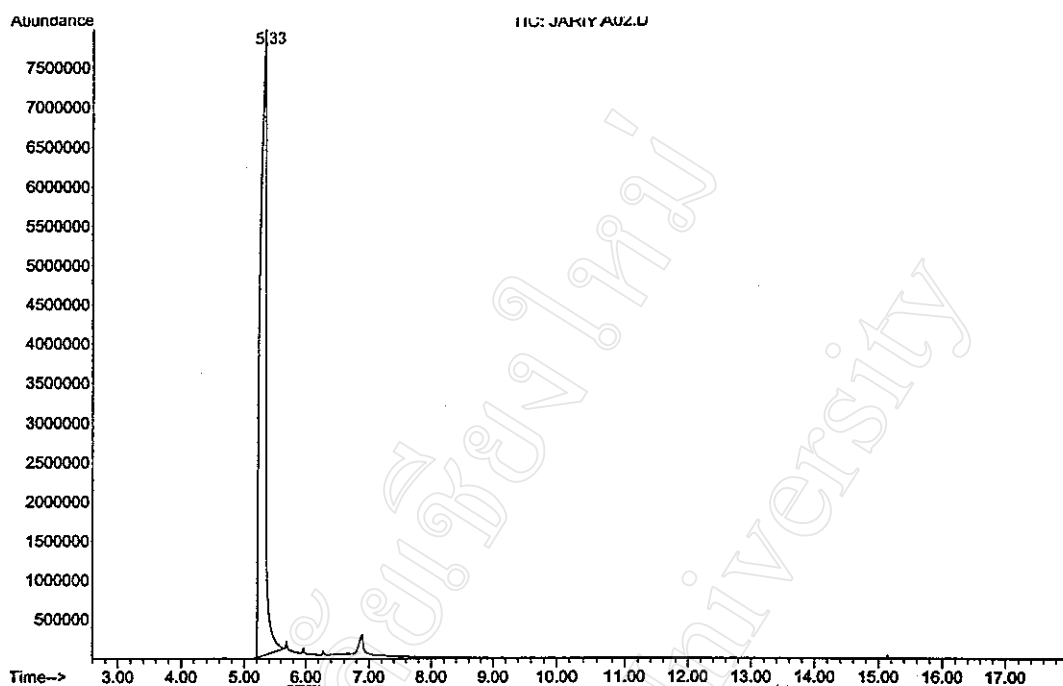
นำสารตั้งต้น 2-acetylpyrrole และผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชัน คือ 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine และผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาออกซิเดชัน คือ 2-acetyl-1-pyrroline ไปวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี โดยใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.3 ได้ total ion chromatogram และแมสสเปกตรัมของสารตั้งต้น 2-acetylpyrrole ผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชัน คือ 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine และผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาออกซิเดชัน คือ 2-acetyl-1-pyrroline แสดงดังรูป 3.1-3.6 และจากการเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเปกตรัมของ 2-acetylpyrrole 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine และ 2-acetyl-1-pyrroline ที่มีรายงานในเอกสารอ้างอิง และเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเปกตรัมกับ The Wiley 275 Mass Spectral Library พบว่าให้ข้อมูลแมสสเปกตรัมที่ตรงกัน



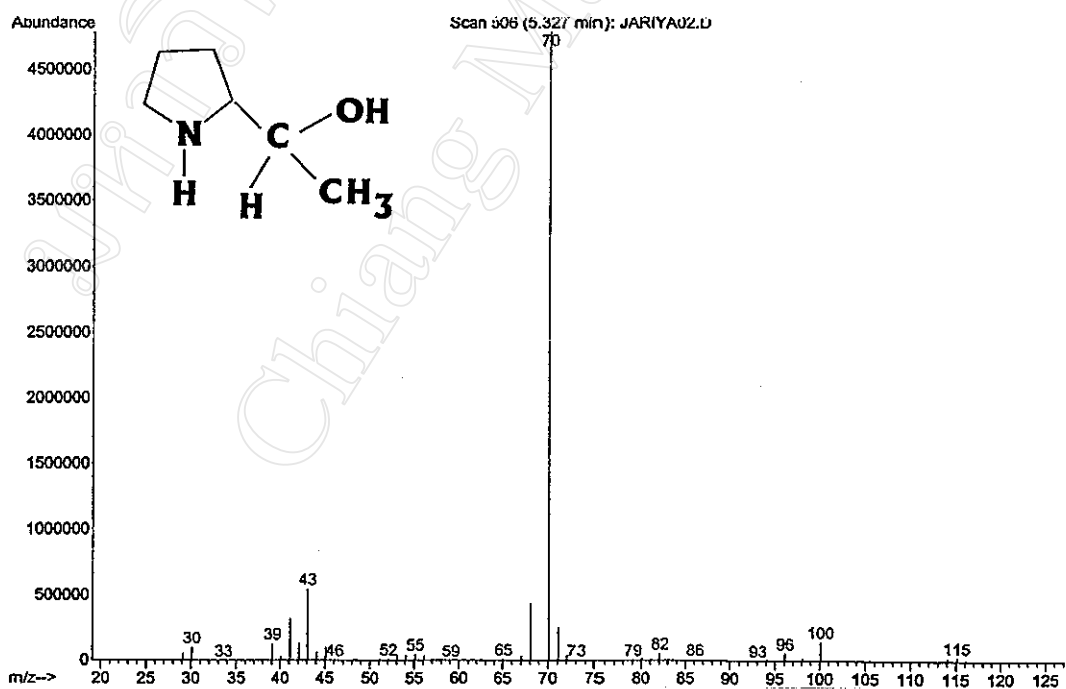
รูปที่ 3.1 Total ion chromatogram ของสารตั้งต้น 2-acetylpyrrole วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



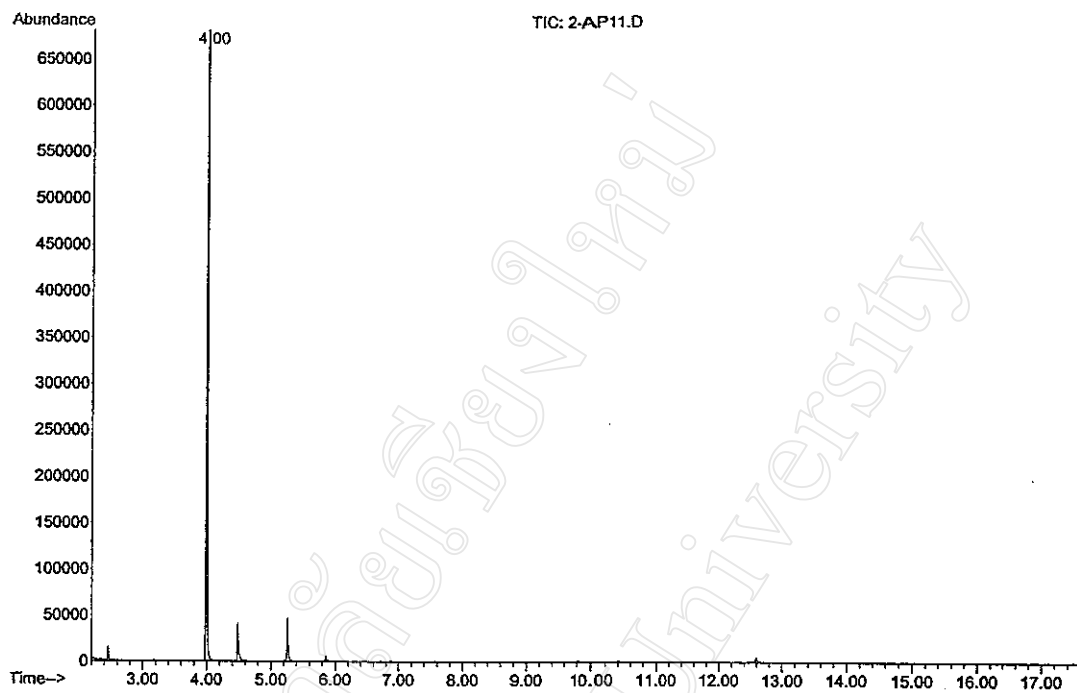
รูปที่ 3.2 แมสสเปกตรัมของสารตั้งต้น 2-acetylpyrrole



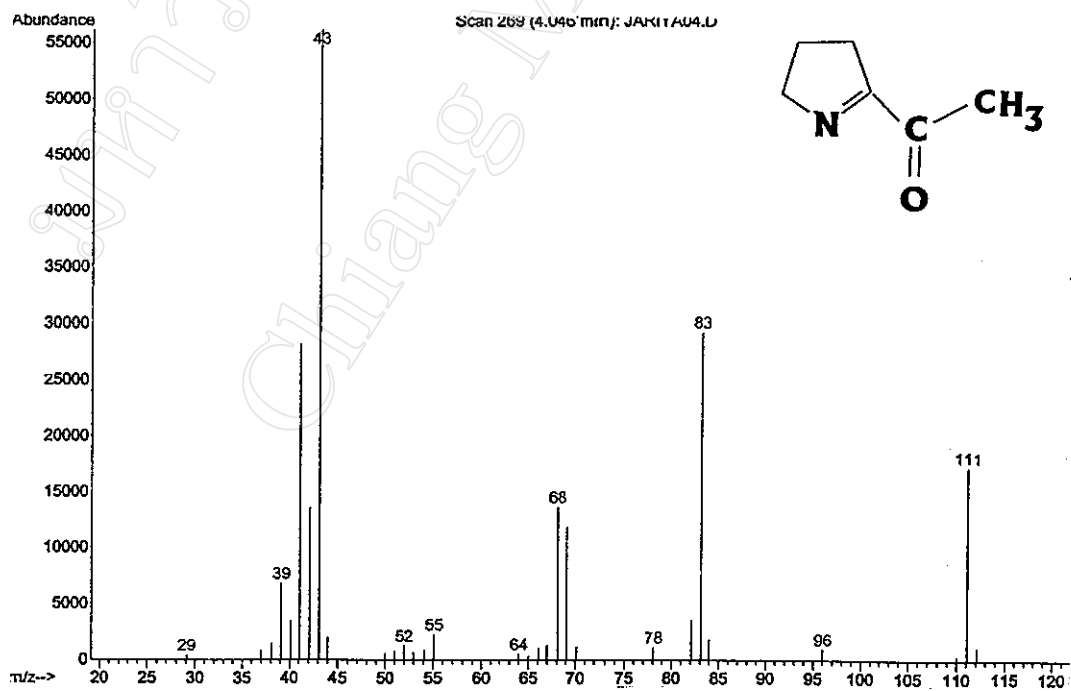
รูปที่ 3.3 Total ion chromatogram ของสาร 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



รูปที่ 3.4 แมสสเปกตรัมของสาร 2-(1-hydroxyethyl) pyrrolidine



รูปที่ 3.5 Total ion chromatogram ของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



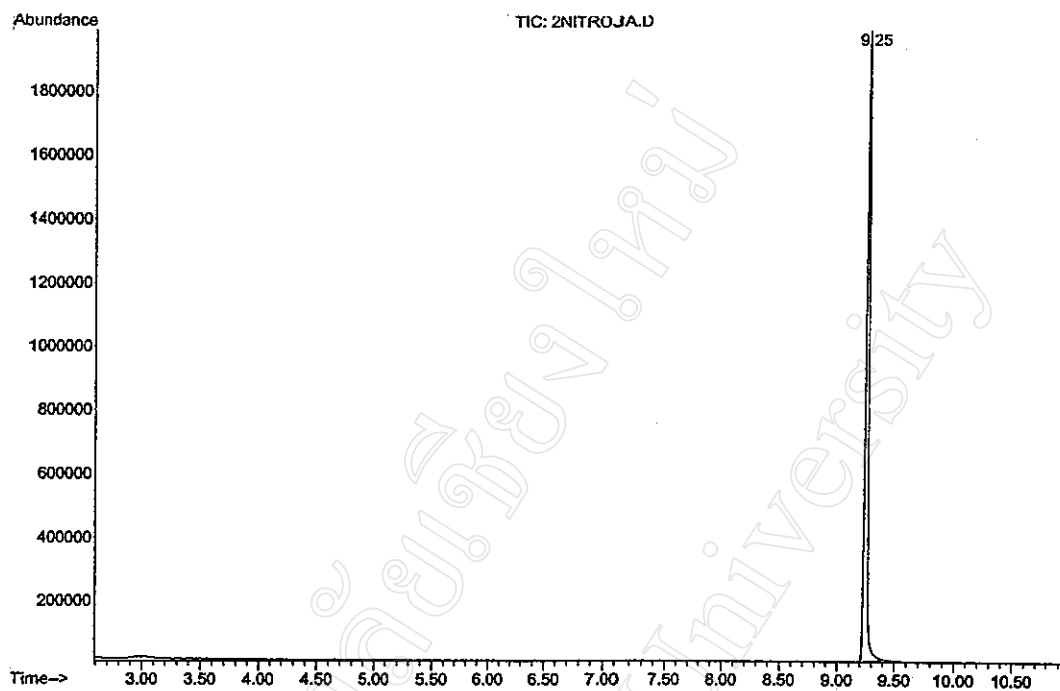
รูปที่ 3.6 แมสสเปกตรัมของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline

### 3.3 ผลการสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde

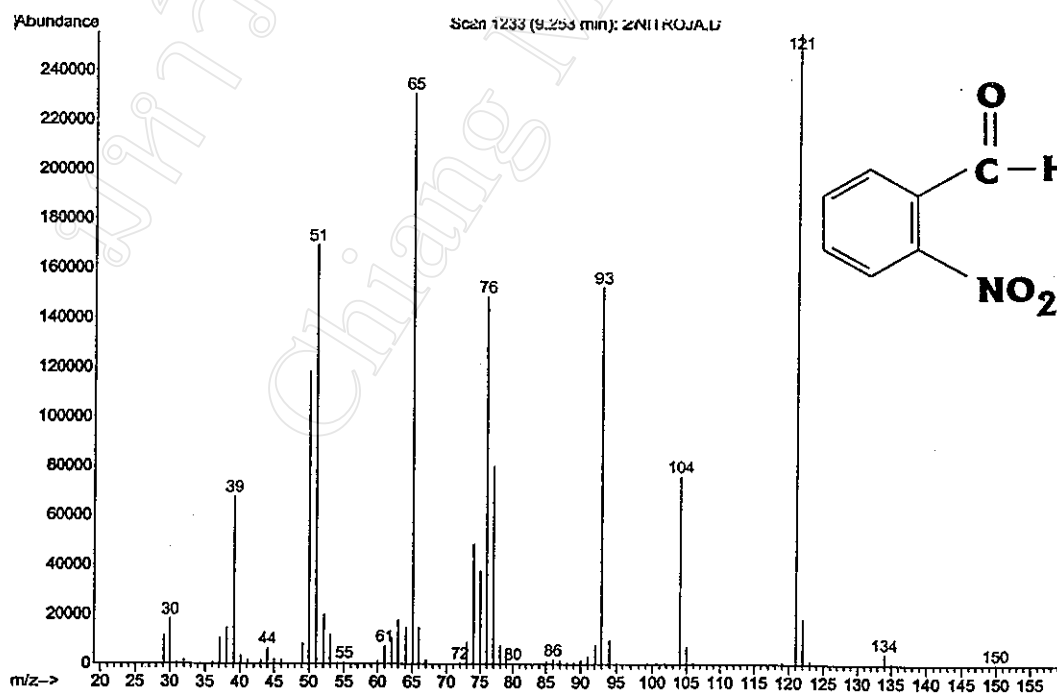
ในการสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde เพื่อใช้เป็นรีเอเจนต์ในการทำปฏิกิริยากับ 2-acetyl-1-pyrroline นั้น สามารถเตรียมได้โดยนำสารตั้งต้น 2-nitrobenzaldehyde มาทำปฏิกิริยารีดักชันในสารละลายที่มีเฟอร์รัสซัลเฟตและแอมโมเนียเข้มข้น ได้ผลผลิต 2-aminobenzaldehyde 0.2013 กรัม คิดเป็น % yield เท่ากับ 20.13 ซึ่งมีลักษณะเป็นของแข็งสีเหลือง และสลายตัวได้ง่ายที่อุณหภูมิห้อง

### 3.4 ผลการวิเคราะห์ผลผลิตจากปฏิกิริยาการสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde

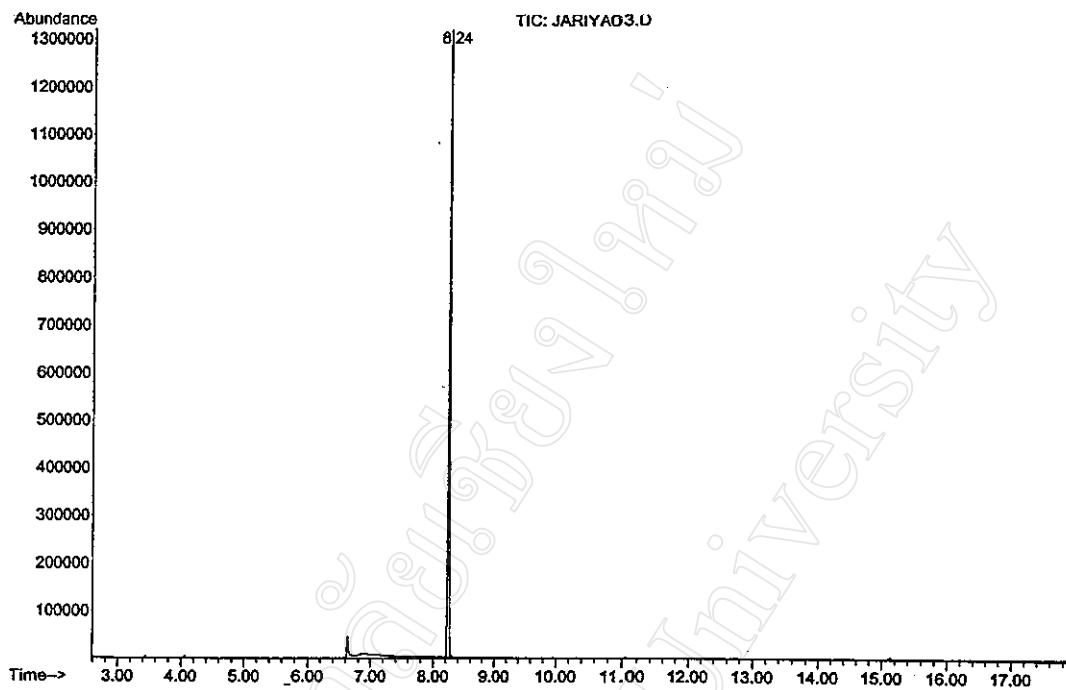
นำสารตั้งต้น 2-nitrobenzaldehyde และผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาการสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี โดยมีสภาวะที่ใช้ในการทดลองดังการทดลองที่ 2.3 total ion chromatogram และแมสสเปกตรัมของสารตั้งต้น 2-nitrobenzaldehyde และผลผลิตที่ได้ คือ 2-aminobenzaldehyde แสดงดังรูปที่ 3.7- 3.10 ตามลำดับ และจากการเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเปกตรัมของ 2-nitrobenzaldehyde กับ The Wiley 275 Mass Spectral Library และจากการเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเปกตรัมของ 2-aminobenzaldehyde ที่มีรายงานในเอกสารอ้างอิง [EI/MS,  $m/z = 121 (M^+, 88), 93(100), 92(34), 84(12), 76(14), 66(92), 65(59), 63(12), 49(23), 39(52)$ ] พบว่าให้ข้อมูลแมสสเปกตรัมที่ตรงกัน



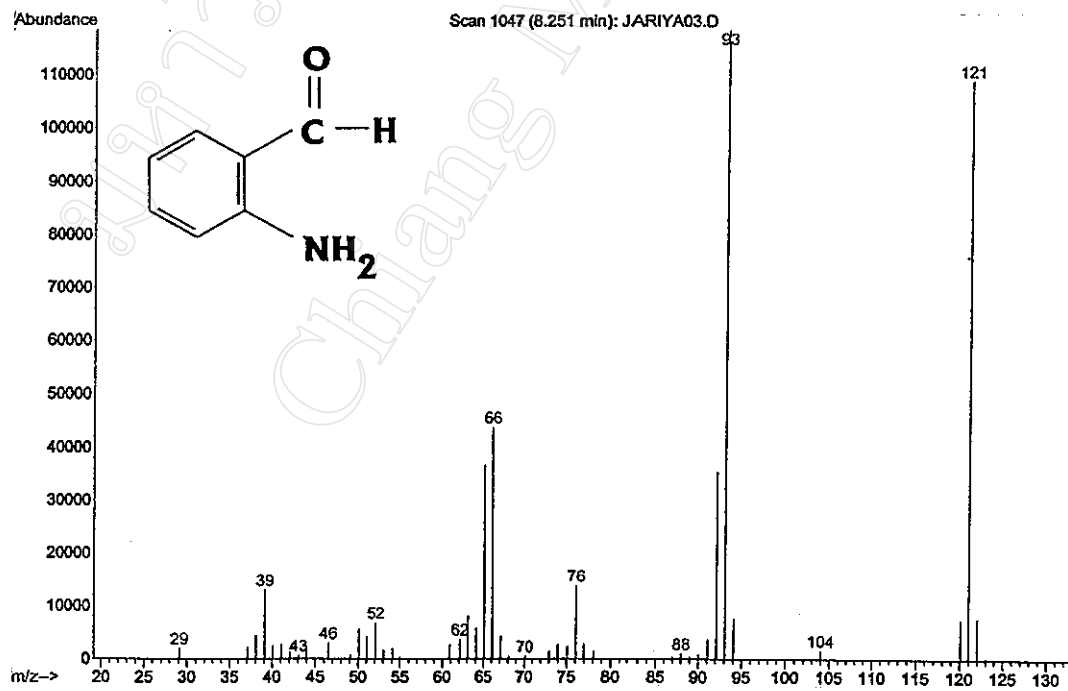
รูปที่ 3.7 Total ion chromatogram ของสารตั้งต้น 2-nitrobenzaldehyde วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



รูปที่ 3.8 แมสสเปกตรัมของสารตั้งต้น 2-nitrobenzaldehyde



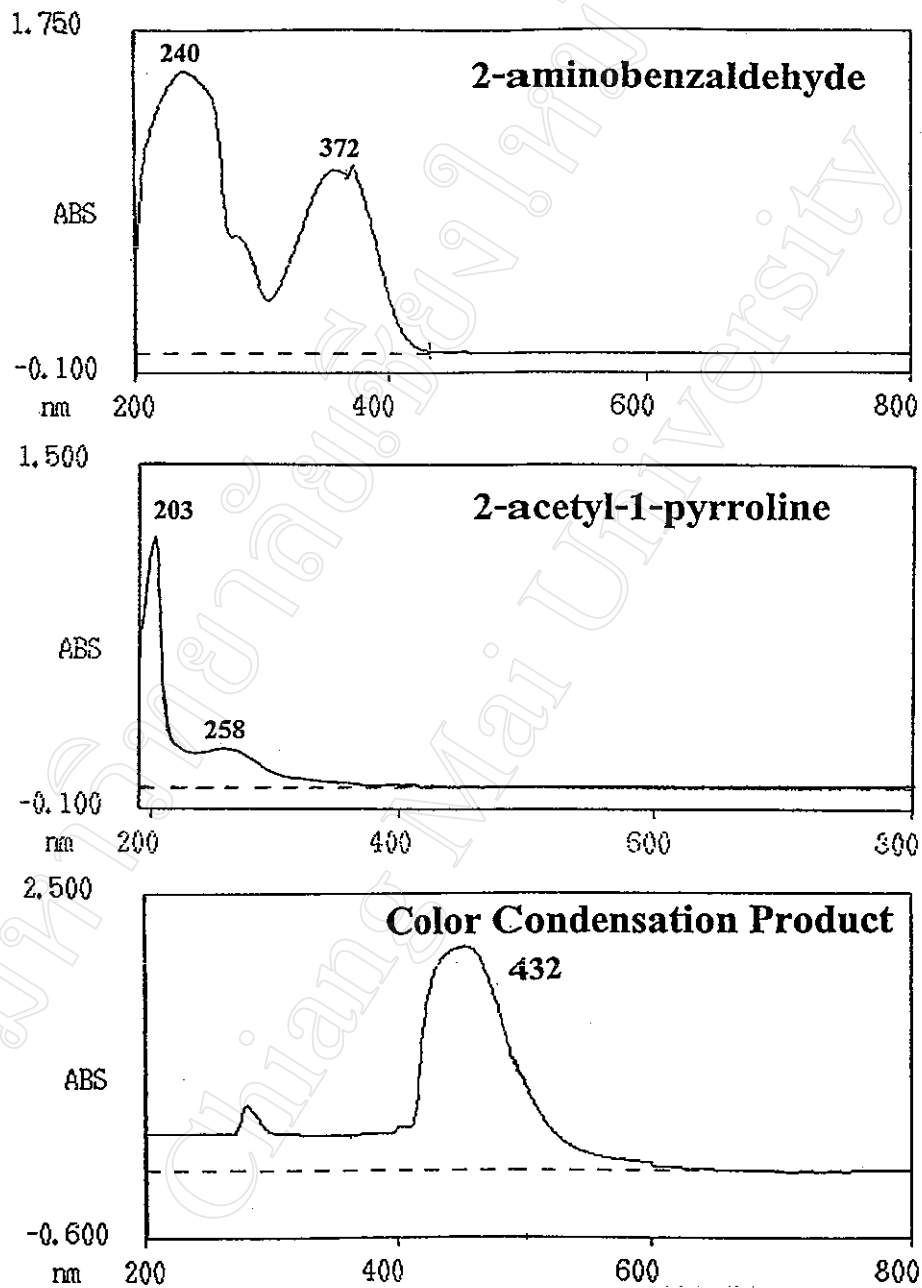
รูปที่ 3.9 Total ion chromatogram ของสารสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



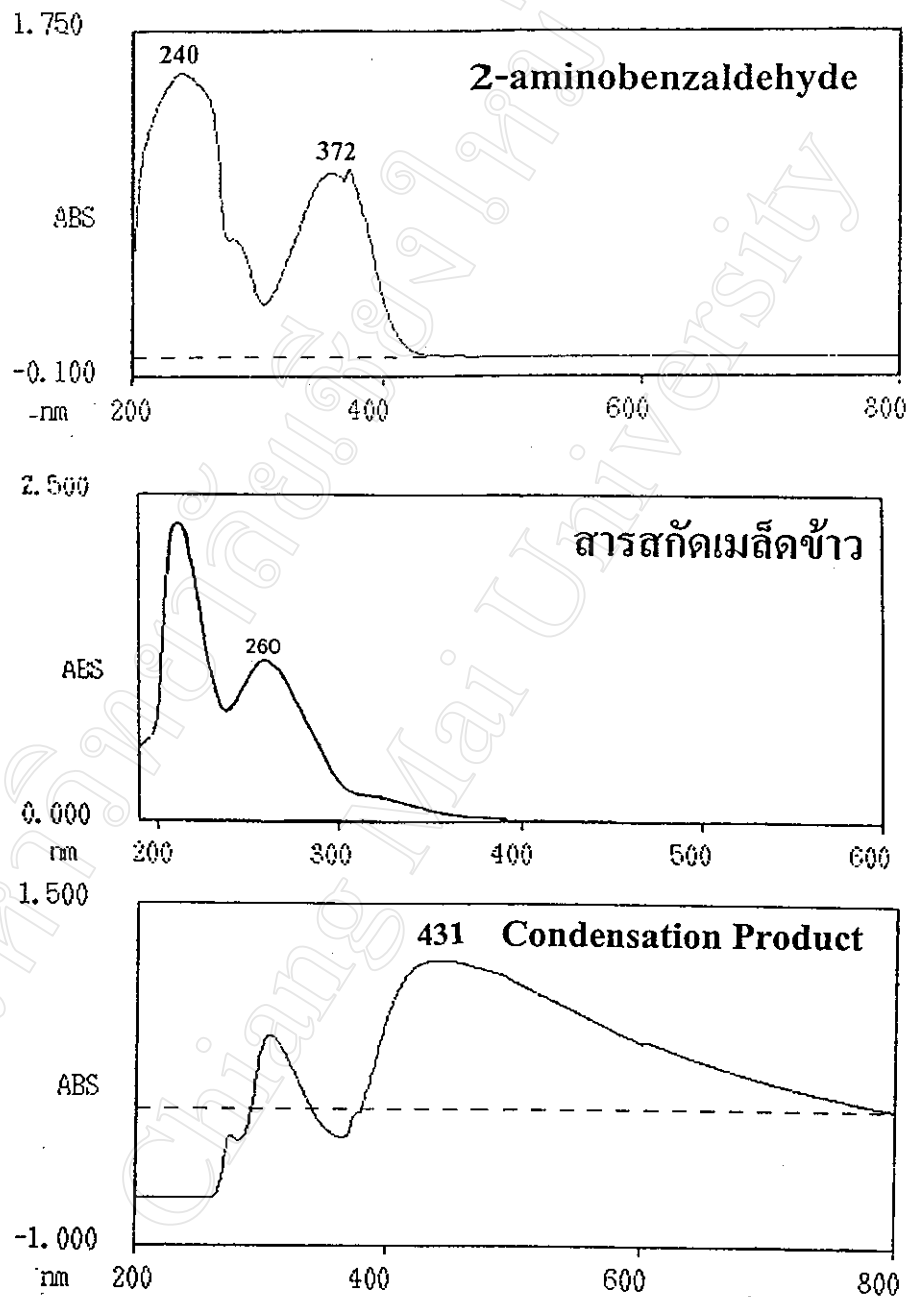
รูปที่ 3.10 แมสสเปกตรัมของสารสังเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde

### 3.5 ผลการวิเคราะห์ผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde โดยใช้เทคนิคยูวีวิชิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตรี

จากการนำสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline มาทำปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde ได้ผลผลิตที่มีสีเหลือง และเมื่อนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline กับ 2-aminobenzaldehyde ไปวัดการดูดกลืนแสงยูวีและวิชิเบิลโดยใช้เทคนิคยูวีวิชิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตรี ดังการทดลองที่ 2.6.3 ได้ยูวีวิชิเบิลสเปกตรัมดังรูปที่ 3.11 และจากการนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างเมล็ดข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 และ 2-aminobenzaldehyde ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริก เข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ไปวัดการดูดกลืนแสงยูวีและวิชิเบิลโดยใช้เทคนิคยูวีวิชิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตรี ดังการทดลองที่ 2.6.4 ได้ยูวีวิชิเบิลสเปกตรัมดังรูปที่ 3.12



รูปที่ 3.11 ยูวีวิซิบิลสเปกตรัมของ 2-aminobenzaldehyde สารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde



รูปที่ 3.12 ยูวีวิซิบิลสเปกตรัมของรีเอเจนต์ 2-aminobenzaldehyde สารสกัดข้าวที่ไม่มีรีเอเจนต์, 2-aminobenzaldehyde และผลิตภัณฑ์ที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างเมล็ดข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 และ 2-aminobenzaldehyde

### 3.6 ผลการหาสภาวะที่เหมาะสมในการเกิดปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

#### 3.6.1 ผลของความเข้มข้นของสารละลายกรดไฮโดรคลอริกต่อการเกิดผลผลิตที่มีสี

จากการนำสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline 250 ppm ทำปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde 2500 ppm ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกความเข้มข้น 0.01, 0.10, 0.50 และ 1.00 โมลต่อลิตร และเมื่อนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ไปวัดการดูดกลืนแสงยูวีและวิสิเบิลโดยใช้เทคนิคยูวีวิสิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตรี ดังการทดลองที่ 2.7.1 ได้ผลการทดลองดังตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 ผลของความเข้มข้นของสารละลายกรดไฮโดรคลอริก (HCl) ต่อการเกิดผลผลิตที่มีสี

| ความเข้มข้นของกรด<br>HCl (โมลต่อลิตร) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 nm ของผลผลิตที่มีสี |            |            |            |        |
|---------------------------------------|---------------------------------------------------------|------------|------------|------------|--------|
|                                       | ครั้งที่ 1                                              | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย |
| 0.01                                  | 0.063                                                   | 0.057      | 0.069      | 0.061      | 0.0625 |
| 0.10                                  | 0.063                                                   | 0.061      | 0.067      | 0.067      | 0.0645 |
| 1.00                                  | 0.054                                                   | 0.051      | 0.061      | 0.058      | 0.056  |
| 5.00                                  | 0.026                                                   | 0.029      | 0.052      | 0.037      | 0.036  |

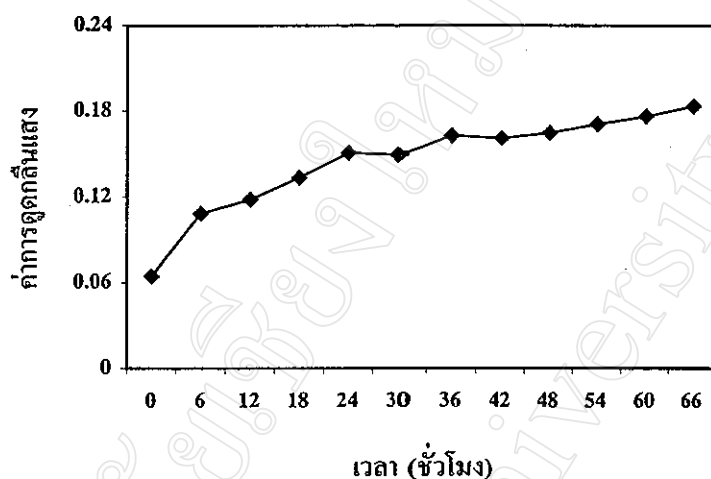
จากตารางที่ 3.1 สรุปได้ว่าปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline 250 ppm และ 2-aminobenzaldehyde 2500 ppm ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ทำให้ได้ผลผลิตที่มีสีที่ให้ค่าการดูดกลืนแสงสูงสุดที่ความยาวคลื่น 432 นาโนเมตร ดังนั้นจึงใช้สารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร เป็นตัวทำละลายในการทำปฏิกิริยาต่อไป

### 3.6.2 ผลของระยะเวลาของการดำเนินไปของปฏิกิริยา

จากการนำสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline 250 ppm ทำปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde 2500 ppm ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกความเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร และนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ไปวัดการดูดกลืนแสงยูวีและวิสิเบิลโดยใช้เทคนิคยูวีวิสิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตริกทุกๆ 6 ชั่วโมง เป็นเวลา 66 ชั่วโมง ดังการทดลองที่ 2.7.2 ได้ผลการทดลองดังตารางที่ 3.2

ตารางที่ 3.2 ค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่เวลาทุก 6 ชม. ของการดำเนินไปของปฏิกิริยา

| เวลา<br>(ชั่วโมง) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 nm ของผลผลิตที่มีสี |            |            |            |        |
|-------------------|---------------------------------------------------------|------------|------------|------------|--------|
|                   | ครั้งที่ 1                                              | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย |
| เริ่มต้น          | 0.063                                                   | 0.061      | 0.067      | 0.067      | 0.0645 |
| 6                 | 0.110                                                   | 0.105      | 0.111      | 0.108      | 0.1085 |
| 12                | 0.121                                                   | 0.113      | 0.120      | 0.118      | 0.1180 |
| 18                | 0.131                                                   | 0.130      | 0.138      | 0.135      | 0.1335 |
| 24                | 0.149                                                   | 0.146      | 0.157      | 0.151      | 0.1507 |
| 30                | 0.142                                                   | 0.148      | 0.156      | 0.152      | 0.1495 |
| 36                | 0.153                                                   | 0.162      | 0.168      | 0.168      | 0.1627 |
| 42                | 0.147                                                   | 0.163      | 0.167      | 0.167      | 0.1610 |
| 48                | 0.145                                                   | 0.167      | 0.173      | 0.174      | 0.1647 |
| 54                | 0.147                                                   | 0.1720     | 0.182      | 0.182      | 0.1707 |
| 60                | 0.148                                                   | 0.180      | 0.188      | 0.190      | 0.1765 |
| 66                | 0.153                                                   | 0.188      | 0.195      | 0.199      | 0.1837 |



รูปที่ 3.13 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะเวลาของการดำเนินไปของปฏิกิริยา และค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

จากการศึกษาระยะเวลาของการดำเนินไปของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde สรุปได้ว่า ผลผลิตจะเกิดขึ้นอย่างต่อเนื่อง

### 3.6.3 ผลของอุณหภูมิต่อการดำเนินไปของปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

จากการนำสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline 350 ppm มาทำปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde 3500 ppm ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกความเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร จากนั้นนำไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 40, 60, 80 และ 100 องศาเซลเซียส และนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ไปวัดการดูดกลืนแสงยูวีและวิซิเบิล ทุกๆ 30 นาที เป็นเวลา 6 ชั่วโมง โดยใช้เทคนิคยูวีวิซิเบิลสเปกโตรโฟโตเมตรี ดังการทดลองที่ 2.7.3 ได้ผลการทดลองดังตารางที่ 3.3-3.6 และดังรูปที่ 3.14

ตารางที่ 3.3      ค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อุณหภูมิ 40 องศาเซลเซียส

| เวลา (นาทื) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 นาโนเมตรของผลผลิต |            |            |            |         |
|-------------|-------------------------------------------------------|------------|------------|------------|---------|
|             | ครั้งที่ 1                                            | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย  |
| เริ่มต้น    | 0.215                                                 | 0.226      | 0.234      | 0.250      | 0.23125 |
| 30          | 0.410                                                 | 0.420      | 0.420      | 0.443      | 0.4232  |
| 60          | 0.535                                                 | 0.546      | 0.541      | 0.561      | 0.5457  |
| 90          | 0.578                                                 | 0.602      | 0.597      | 0.619      | 0.5990  |
| 120         | 0.629                                                 | 0.658      | 0.658      | 0.677      | 0.6555  |
| 150         | 0.694                                                 | 0.672      | 0.686      | 0.711      | 0.6975  |
| 180         | 0.688                                                 | 0.712      | 0.705      | 0.725      | 0.7075  |
| 210         | 0.700                                                 | 0.728      | 0.725      | 0.741      | 0.7235  |
| 240         | 0.729                                                 | 0.749      | 0.742      | 0.761      | 0.7452  |
| 270         | 0.763                                                 | 0.781      | 0.742      | 0.787      | 0.7685  |
| 300         | 0.785                                                 | 0.794      | 0.791      | 0.806      | 0.7940  |
| 330         | 0.801                                                 | 0.809      | 0.805      | 0.817      | 0.8080  |
| 360         | 0.947                                                 | 0.960      | 0.957      | 0.966      | 0.9575  |

ตารางที่ 3.4 ค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อุณหภูมิ 60 องศาเซลเซียส

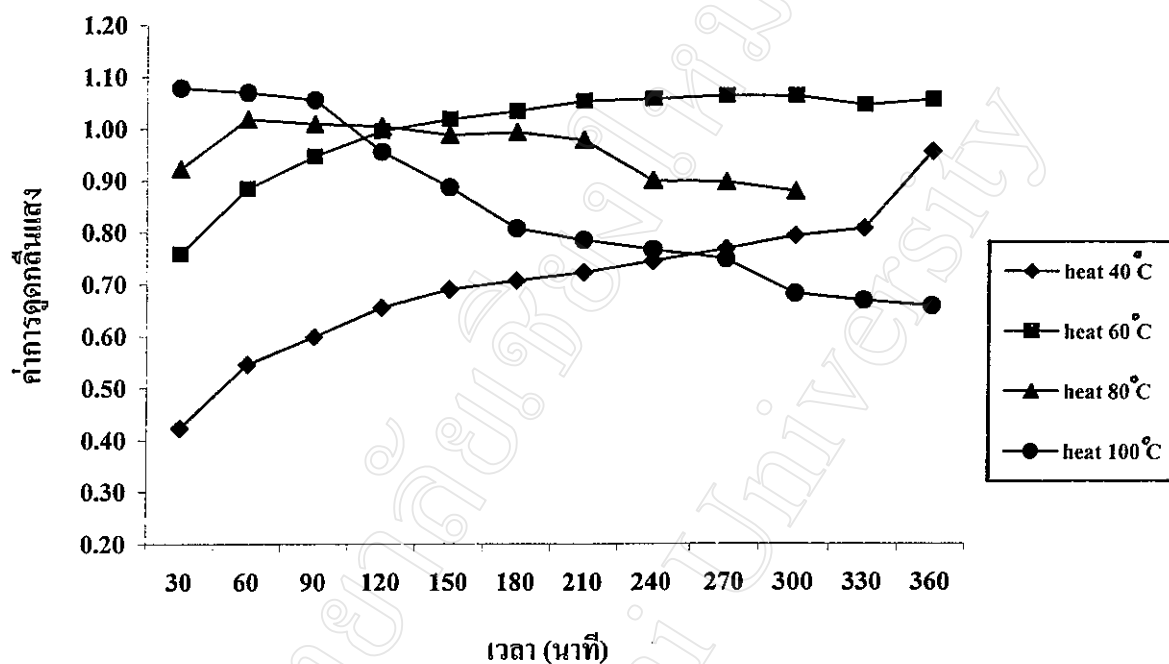
| เวลา (นาที) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 นาโนเมตรของผลผลิต |            |            |            |        |
|-------------|-------------------------------------------------------|------------|------------|------------|--------|
|             | ครั้งที่ 1                                            | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย |
| เริ่มต้น    | 0.264                                                 | 0.301      | 0.286      | 0.315      | 0.2915 |
| 30          | 0.698                                                 | 0.797      | 0.739      | 0.800      | 0.7585 |
| 60          | 0.782                                                 | 0.922      | 0.881      | 0.954      | 0.8847 |
| 90          | 0.834                                                 | 0.993      | 0.992      | 1.021      | 0.9475 |
| 120         | 0.869                                                 | 1.038      | 1.004      | 1.074      | 0.9962 |
| 150         | 0.831                                                 | 1.053      | 1.124      | 1.068      | 1.0190 |
| 180         | 0.827                                                 | 1.073      | 1.085      | 1.155      | 1.0350 |
| 210         | 0.828                                                 | 0.094      | 1.119      | 1.177      | 1.0545 |
| 240         | 0.817                                                 | 1.098      | 1.131      | 1.190      | 1.0590 |
| 270         | 0.809                                                 | 1.103      | 1.193      | 1.151      | 1.0640 |
| 300         | 1.106                                                 | 0.804      | 1.206      | 1.142      | 1.0645 |
| 330         | 0.776                                                 | 1.092      | 1.122      | 1.198      | 1.0470 |
| 360         | 0.772                                                 | 1.099      | 1.138      | 1.222      | 1.0577 |

ตารางที่ 3.5      ค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อุณหภูมิ 80 องศาเซลเซียส

| เวลา (นาที) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 นาโนเมตรของผลผลิต |            |            |            |        |
|-------------|-------------------------------------------------------|------------|------------|------------|--------|
|             | ครั้งที่ 1                                            | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย |
| เริ่มต้น    | 0.320                                                 | 0.334      | 0.357      | 0.364      | 0.3437 |
| 30          | 0.905                                                 | 0.903      | 0.944      | 0.938      | 0.9225 |
| 60          | 0.998                                                 | 1.000      | 1.051      | 1.027      | 1.0190 |
| 90          | 0.976                                                 | 0.990      | 1.054      | 1.019      | 1.0097 |
| 120         | 0.924                                                 | 1.011      | 1.048      | 1.040      | 1.0057 |
| 150         | 0.887                                                 | 1.000      | 1.043      | 1.026      | 0.9890 |
| 180         | 0.878                                                 | 1.001      | 1.062      | 1.034      | 0.9937 |
| 210         | 0.851                                                 | 0.986      | 1.049      | 1.034      | 0.9800 |
| 240         | 0.803                                                 | 0.891      | 0.957      | 0.952      | 0.9007 |
| 270         | 0.771                                                 | 0.896      | 0.957      | 0.966      | 0.8975 |
| 300         | 0.757                                                 | 0.867      | 0.945      | 0.952      | 0.8802 |

ตารางที่ 3.6 ค่าการดูดกลืนแสงของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อุณหภูมิ 100 องศาเซลเซียส

| เวลา (นาท) | ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 432 นาโนเมตรของผลผลิต |            |            |            |         |
|------------|-------------------------------------------------------|------------|------------|------------|---------|
|            | ครั้งที่ 1                                            | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | ครั้งที่ 4 | เฉลี่ย  |
| เริ่มต้น   | 0.354                                                 | 0.393      | 0.363      | 0.421      | 0.3827  |
| 30         | 1.005                                                 | 1.035      | 1.129      | 1.145      | 1.0785  |
| 60         | 1.067                                                 | 1.128      | 0.994      | 1.094      | 1.0707  |
| 90         | 1.092                                                 | 0.960      | 1.072      | 1.101      | 1.0562  |
| 120        | 0.888                                                 | 0.925      | 0.950      | 1.063      | 0.9565  |
| 150        | 0.875                                                 | 0.804      | 0.994      | 0.879      | 0.8880  |
| 180        | 0.919                                                 | 0.784      | 0.801      | 0.730      | 0.8085  |
| 210        | 0.663                                                 | 0.761      | 0.921      | 0.800      | 0.7862  |
| 240        | 0.748                                                 | 0.666      | 0.754      | 0.903      | 0.7677  |
| 270        | 0.632                                                 | 0.741      | 0.740      | 0.880      | 0.7482  |
| 300        | 0.700                                                 | 0.661      | 0.774      | 0.595      | 0.6825  |
| 330        | 0.641                                                 | 0.745      | 0.590      | 0.700      | 0.6690  |
| 360        | 0.657                                                 | 0.580      | 0.733      | 0.663      | 0.65825 |
| 390        | 0.715                                                 | 0.671      | 0.656      | 0.594      | 0.6590  |
| 420        | 0.587                                                 | 0.666      | 0.661      | 0.695      | 0.6522  |



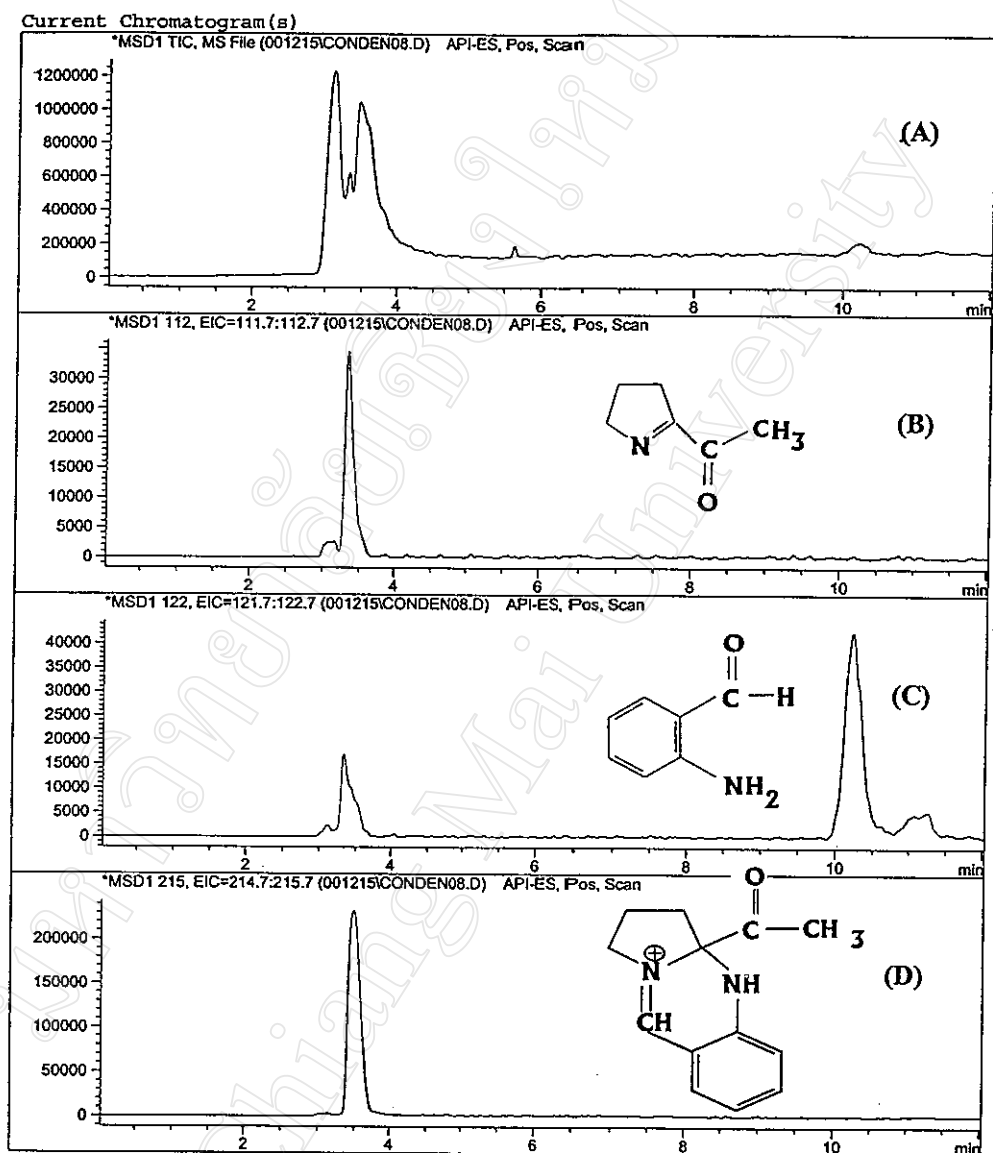
รูปที่ 3.14 ผลของอุณหภูมิต่อการเกิดผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่เวลาต่างๆ

จากการศึกษาผลของอุณหภูมิต่อการเกิดปฏิกิริยาของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ไปให้ความร้อนที่อุณหภูมิ 100 °C ทำให้ได้ผลผลิตที่ให้ค่าการดูดกลืนแสงสูงสุด ดังนั้นจะใช้สภาวะการทดลองนี้ทำการทดลองต่อไป

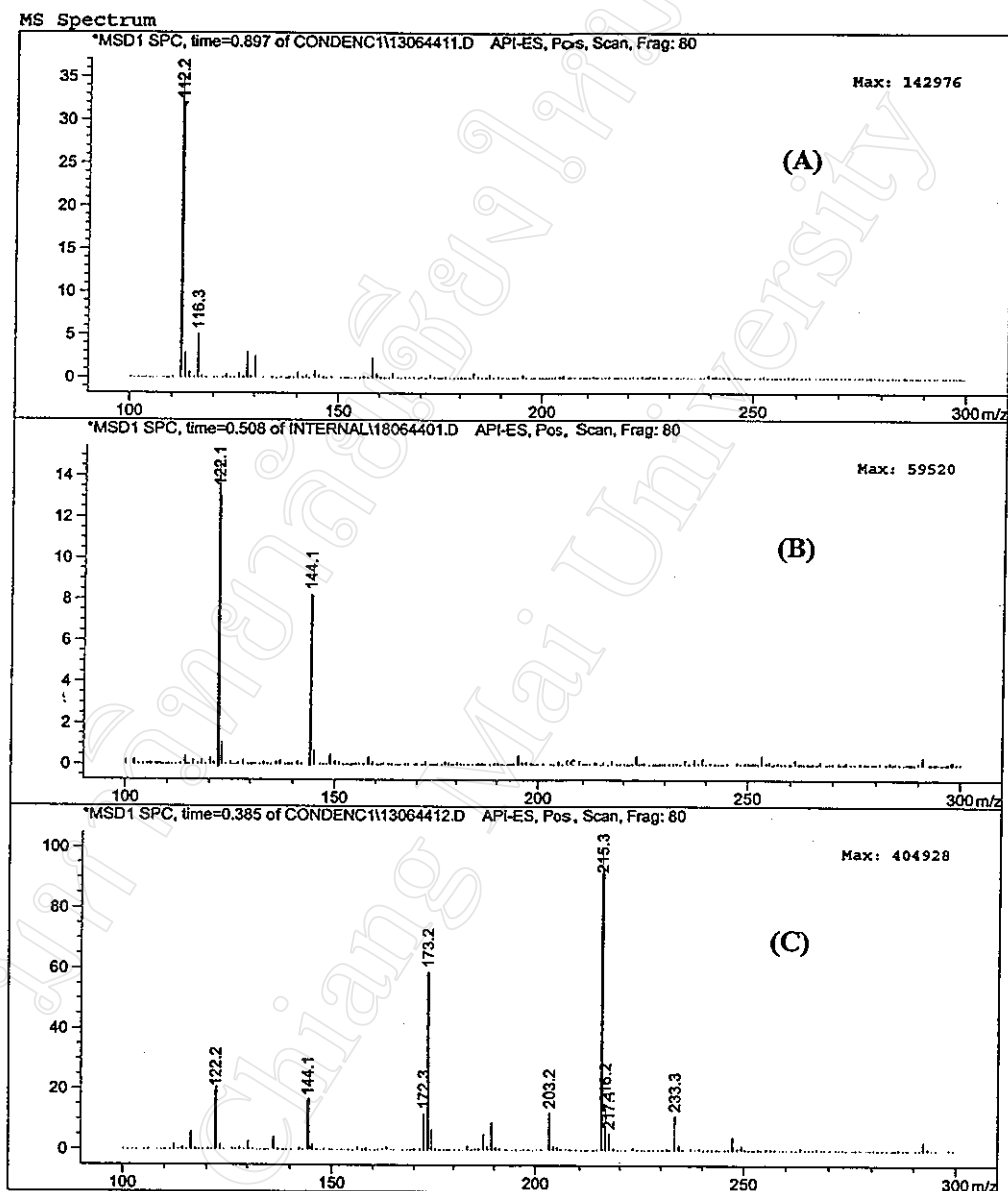
### 3.7 ผลการพิสูจน์โครงสร้างของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

ปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ให้ผลผลิตที่มีสีเหลือง อยู่ในสภาพที่เป็นไอออนบวก มีชื่อเรียกว่า 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation และมีมวลโมเลกุลเท่ากับ 215 amu ดังรูปที่ 2.5 การพิสูจน์โครงสร้างของผลผลิตที่เกิดขึ้นนี้ใช้เทคนิคลิวคโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชัน โดยใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.8 ได้โครมาโทแกรมของการแยกองค์ประกอบของผลผลิตซึ่งเกิดปฏิกิริยาไม่สมบูรณ์จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ดังรูปที่ 3.15 และเมื่อนำผลผลิตที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟลูออโรเจนเจชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชันแมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชัน โดยใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.8 ได้แมสสเปกตรัมดังรูปที่ 3.16

จากรูปที่ 3.15 (A) แสดง total ion chromatogram ของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde และเมื่อทำการหาแมสโครมาโทแกรมที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 และ 122 amu ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกที่เกิดจากการรับโปรตอนของสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ตามลำดับ และที่มวลต่อประจุเท่ากับ 215 amu ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ที่คาดว่าจะเกิดขึ้น ได้โครมาโทแกรมดังรูปที่ 3.15(B)-3.15(D) ตามลำดับ ซึ่งจากโครมาโทแกรมนี้ แสดงให้เห็นว่า มีไอออนของสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 112 (M+H)<sup>+</sup> amu และไอออนของ 2-aminobenzaldehyde ที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 122 (M+H)<sup>+</sup> amu เหลืออยู่ในปฏิกิริยา และมีไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 215 (M+H)<sup>+</sup> amu เกิดขึ้นในปฏิกิริยา



รูปที่ 3.15 (A) Total ion chromatogram ของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde (B) แมสโครมาโทแกรมของไอออนที่  $m/z$  เท่ากับ 112 สำหรับ 2-acetyl-1-pyrroline (C) แมสโครมาโทแกรมของไอออนที่  $m/z$  เท่ากับ 122 สำหรับ 2-aminobenzaldehyde และ (D) แมสโครมาโทแกรมของไอออนที่  $m/z$  เท่ากับ 215 สำหรับผลผลิตวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคคลิควิดโครมาโทกราฟีอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเฟสแอตทิงเมนต์



รูปที่ 3.16 (A) แมสสเปกตรัมของ 2-acetyl-1-pyrroline (มวลโมเลกุลเท่ากับ 111) (B) แมสสเปกตรัมของ 2-aminobenzaldehyde (มวลโมเลกุลเท่ากับ 121) (C) แมสสเปกตรัมของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde (มวลโมเลกุลเท่ากับ 215) วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟอลินเจกซ์อิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซนแมสสเปกโตรเมตรี

จากรูปที่ 3.16 (A) แสดงแมสสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟอลตินเจชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเปกโตรเมตรีของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ซึ่งแสดงไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 amu สอดคล้องกับน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่เกิดจากการรับโปรตอน  $(111+H)^+$

รูป 3.16 (B) แสดงแมสสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์ 2-aminobenzaldehyde ซึ่งแสดงไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 122 amu สอดคล้องกับน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกของ 2-aminobenzaldehyde ที่เกิดจากการรับโปรตอน  $(121+H)^+$  ส่วนไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 144 amu น่าจะสอดคล้องกับน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกของ 2-aminobenzaldehyde ที่เกิดจากการรับโซเดียม  $(121+Na)^+$

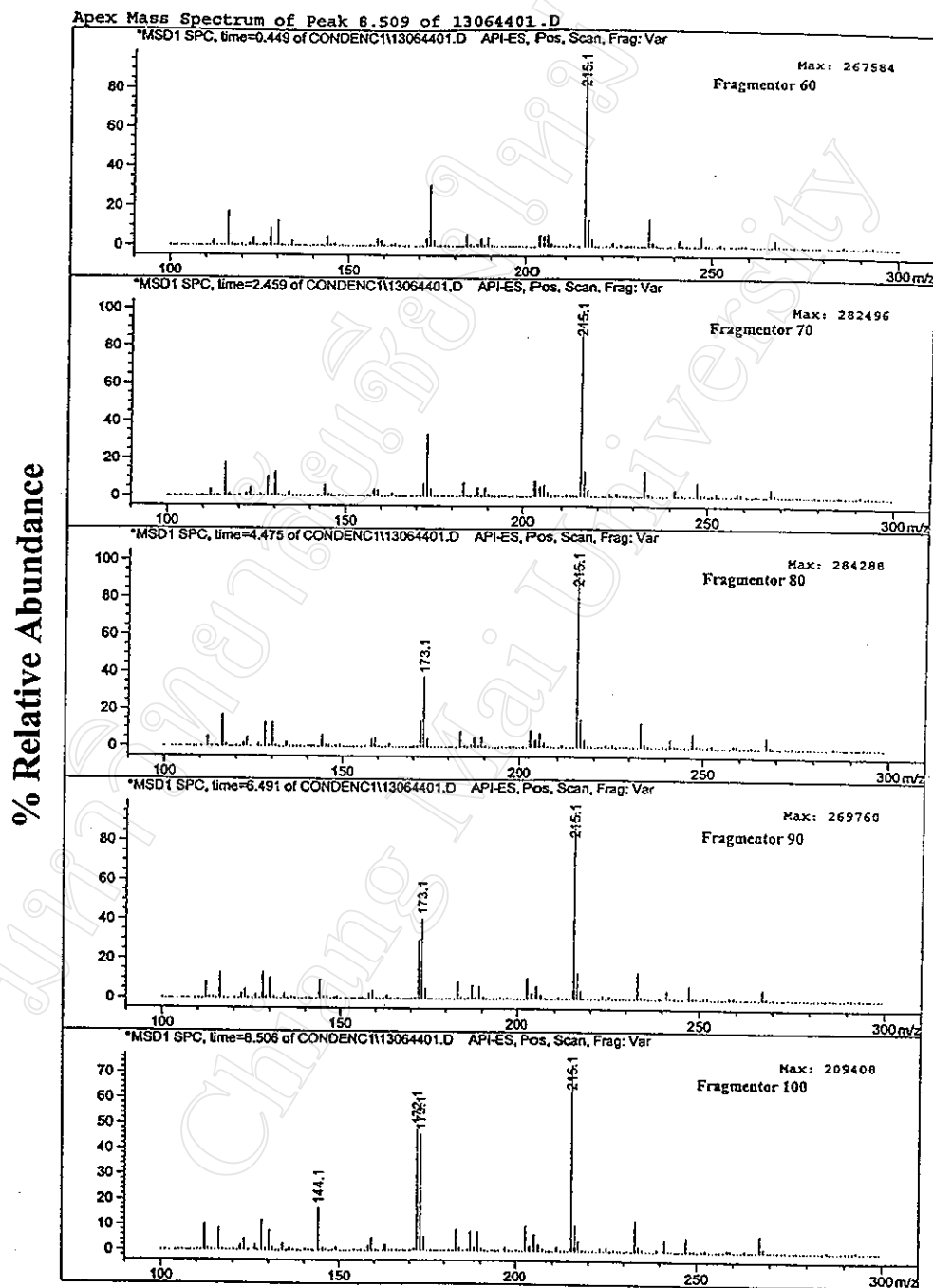
รูป 3.16 (C) แสดงแมสสเปกตรัมที่ได้จากการวิเคราะห์ผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ซึ่งให้ผลผลิตที่เป็นไอออนบวกที่มวลต่อประจุเท่ากับ 215 มีชื่อเรียกว่า 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ซึ่งสอดคล้องกับน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกของผลผลิตดังรูปที่ 2.5 ส่วนไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 122 และ 144 amu น่าจะเป็นไอออนของ 2-aminobenzaldehyde ที่เหลือเกินจากปฏิกิริยาแต่ปรากฏไอออนของ 2-acetyl-1-pyrroline ที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 amu เพียงเล็กน้อยเท่านั้น แสดงให้เห็นว่า 2-acetyl-1-pyrroline ทำปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde และเหลือ 2-acetyl-1-pyrroline อยู่ในปฏิกิริยาก่อนที่จะนำมาวิเคราะห์

ดังนั้นกล่าวได้ว่าการที่แมสสเปกตรัมของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde แสดงให้เห็นมวลโมเลกุลของไอออนที่เป็น  $(M+H)^+$  เท่ากับ 112 และ 122 amu นั้นเนื่องมาจากมี heteroatom อยู่ในโมเลกุลจึงสามารถรับโปรตอนจากสารละลายได้ดี ส่วนโมเลกุลของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ซึ่งอยู่ในสภาพไอออนบวกในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร จึงสามารถถูกวิเคราะห์ได้ทันที และแสดงให้เห็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนบวกที่เป็น  $(M)^+$  เท่ากับ 215 amu

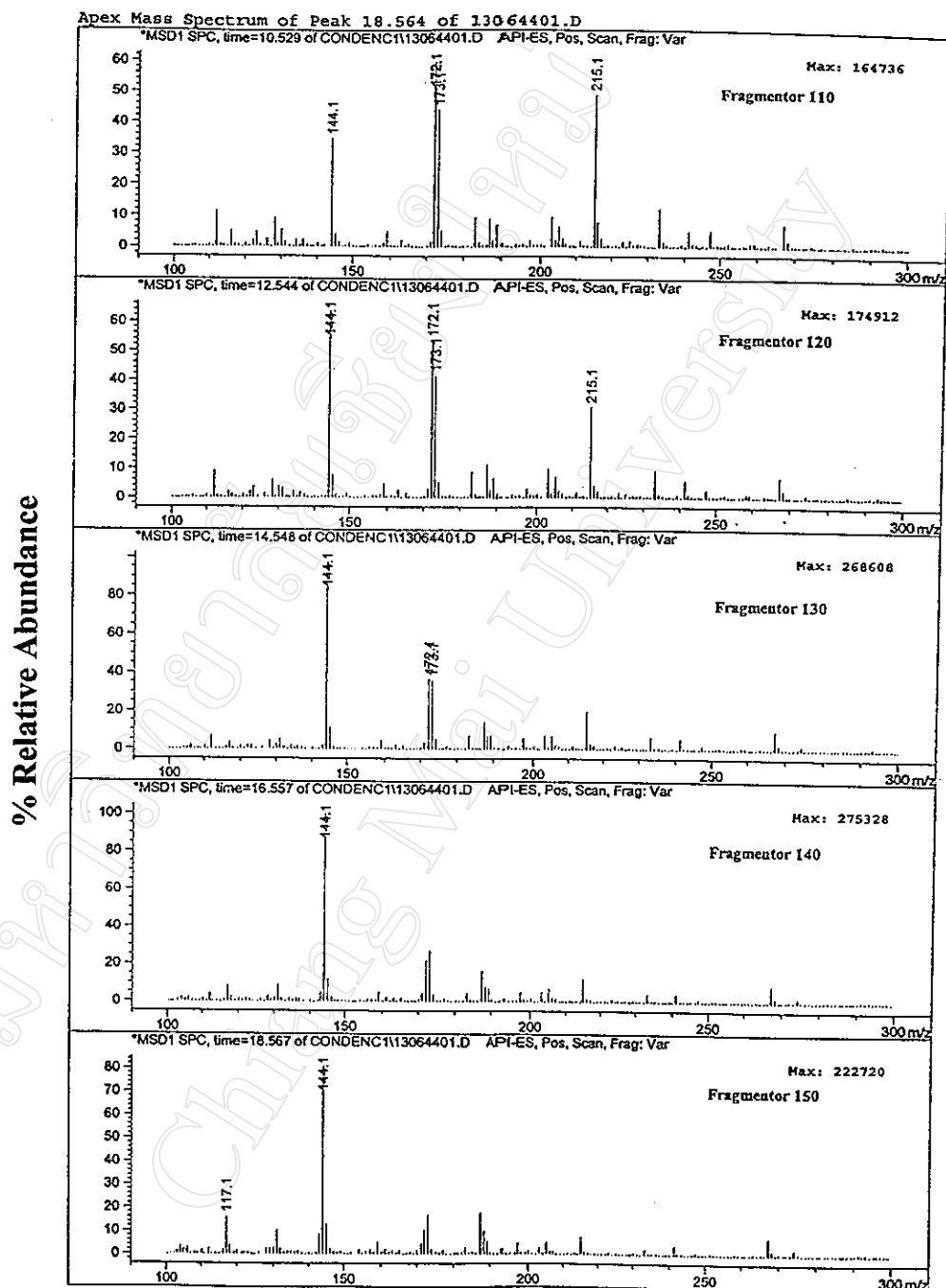
### 3.8 ผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่อรูปแบบการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์มีผลต่อการแตกตัวเป็นไอออนย่อยของสาร ดังนั้นจึงได้ศึกษาผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่อรูปแบบการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde โดยนำผลผลิตนี้ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคโพลินเจนชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรี ได้ทดลองเปลี่ยนค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์เป็นดังนี้ คือ 60, 70, 80, 90, 100, 110, 120, 130, 140 และ 150 โวลต์ และแบบของการสแกนมวลต่อประจุ คือ เก็บทุกมวลต่อประจุตั้งแต่ 100-300 amu โดยใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.9 ได้แมสสเป็คตรัมของการแตกตัวเป็นไอออนย่อยของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ดังรูป 3.17

เมื่อพิจารณาและเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเป็คตรัมของการแตกตัวเป็นไอออนย่อยของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde (ไอออนของผลผลิตนี้มีน้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 215 amu) ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ ดังรูปที่ 3.17 กล่าวได้ว่า ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่ำๆ ในช่วง 60-90 โวลต์ ไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde เกิดขึ้นมาก และเกิดการแตกหักเป็นไอออนย่อยๆ ได้น้อย แต่เมื่อค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์สูงขึ้นซึ่งอยู่ในช่วง 100-150 โวลต์ ไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde เกิดขึ้นน้อยมาก แต่จะเกิดการแตกหักเป็นไอออนย่อยๆ ได้มากขึ้น ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ที่เหมาะสมต่อรูปแบบการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation อยู่ในช่วง 60-90 โวลต์



รูปที่ 3.17 แมสสเปกตรัมของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde เมื่อเปลี่ยนความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์



รูปที่ 3.17 (ต่อ) แมสสเปกตรัมของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde เมื่อเปลี่ยนความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์

**3.9 ผลการหาสภาวะที่เหมาะสมต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนโดยอิเล็กโตรสเปรย์ของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde โดยใช้เทคนิคโฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเปกโตรเมตรี**

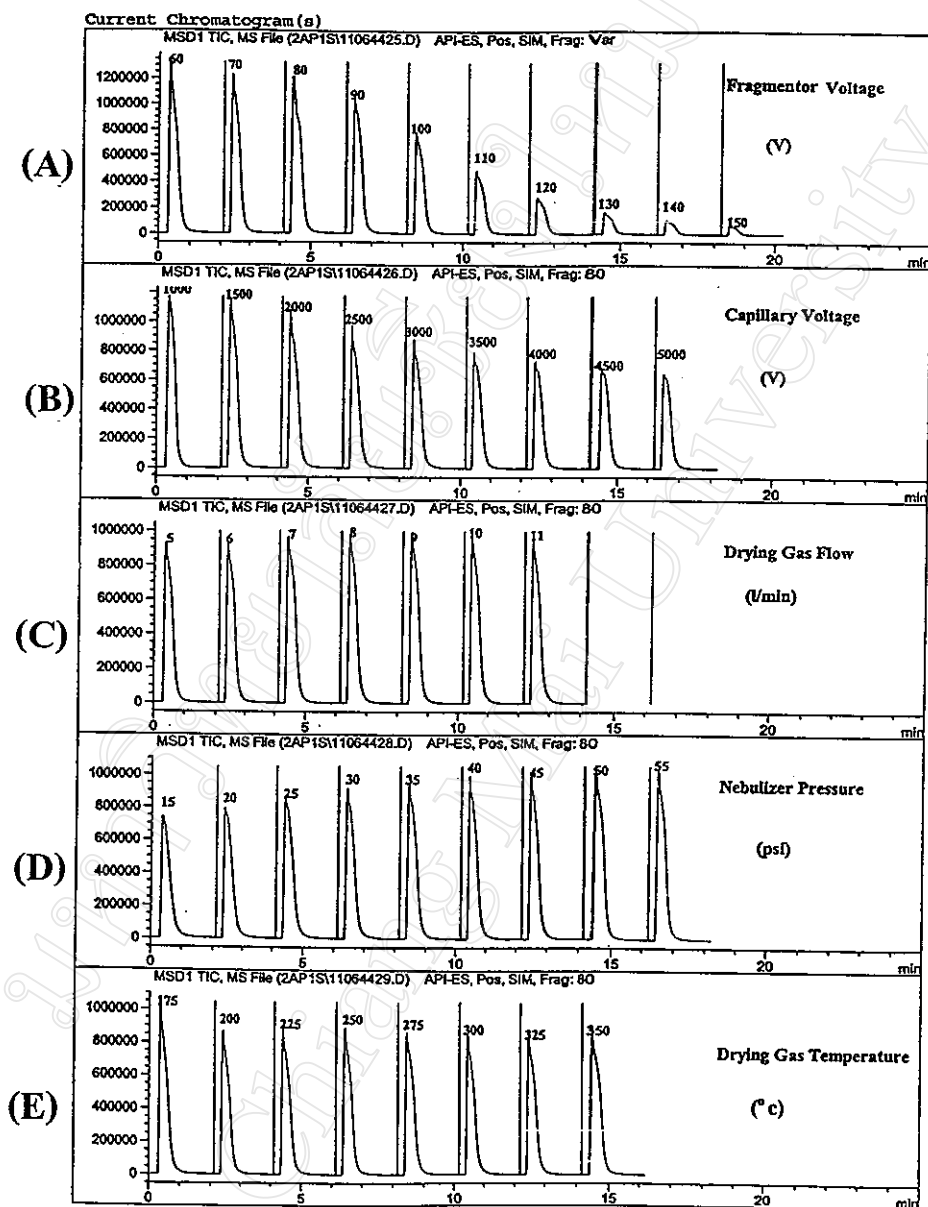
เทคนิคโฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันนั้นมีพารามิเตอร์ต่างๆ ที่มีผลต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารดังนี้ คือ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี อัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง ความดันที่เนบิวไลเซอร์ และอุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง ในการทดลองนี้ได้ทำการหาสภาวะที่เหมาะสมต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde โดยเปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ต่างๆ ดังกล่าวข้างต้น และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10 ได้ผลการทดลองดังนี้

### **3.9.1 ผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์**

ในการศึกษาผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ตั้งแต่ 60-150 โวลท์ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10.1 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.18 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.7 และรูปที่ 3.19

### **3.9.2 ผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี**

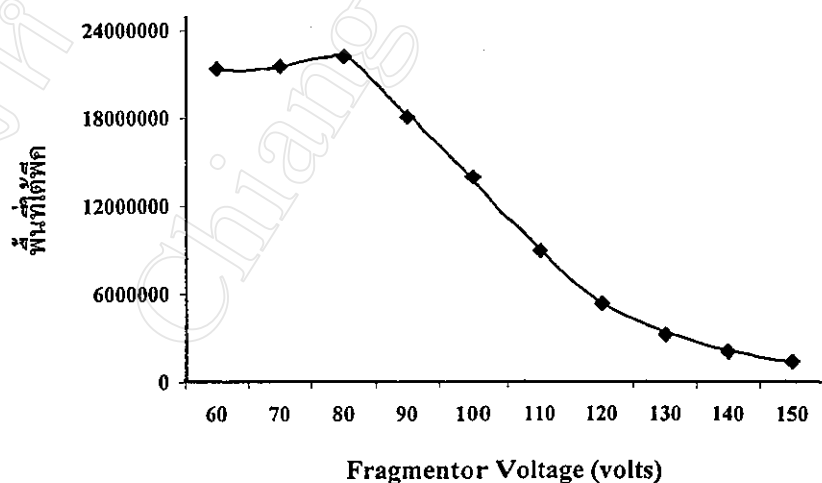
ในการศึกษาผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารีต่อปริมาณการเกิดไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ได้ทำการทดลองเปลี่ยนความต่างศักย์ไฟฟ้าคาปิลลารีตั้งแต่ 1000-5000 โวลท์ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10.2 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.18 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.8 และรูปที่ 3.20



รูปที่ 3.18 โครมาโทแกรมของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคโพลินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเปกโตรเมตรี เมื่อเปลี่ยนค่า (A) ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟร็กเมนเตอร์ (B) ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี (C) อัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง (D) ความดันที่เนบิวไลเซอร์ และ (E) อุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง

ตารางที่ 3.7 พื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ

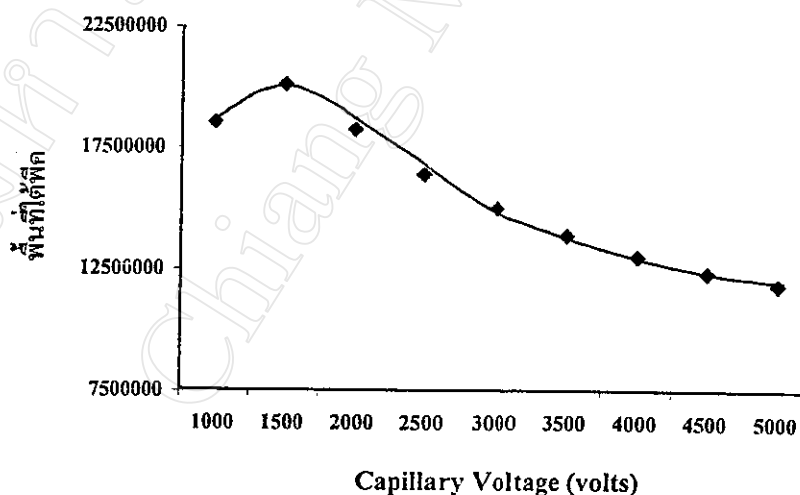
| ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ (โวลต์) | พื้นที่ใต้พีค |
|-------------------------------------------|---------------|
| 60                                        | 21389158      |
| 70                                        | 21549510      |
| 80                                        | 22220432      |
| 90                                        | 18075554      |
| 100                                       | 13988949      |
| 110                                       | 8952021       |
| 120                                       | 5350297       |
| 130                                       | 3232356       |
| 140                                       | 2114912       |
| 150                                       | 1443115       |



รูปที่ 3.19 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ และพื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

ตารางที่ 3.8 พื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารีต่างๆ

| ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี (โวลท์) | พื้นที่ใต้พีค |
|-------------------------------------------|---------------|
| 1000                                      | 18550714      |
| 1500                                      | 20120586      |
| 2000                                      | 18263984      |
| 2500                                      | 16413021      |
| 3000                                      | 15038653      |
| 3500                                      | 13909854      |
| 4000                                      | 13042567      |
| 4500                                      | 12366266      |
| 5000                                      | 11895868      |



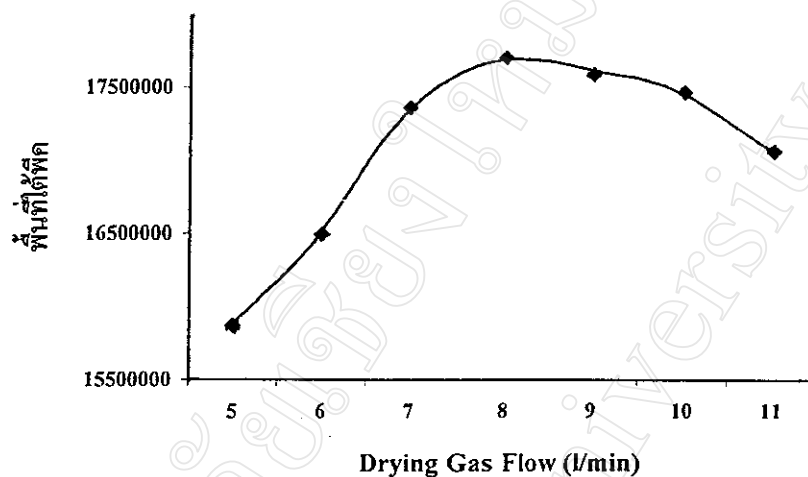
รูปที่ 3.20 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี และพื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

### 3.9.3 ผลการศึกษาอัตราการไหลของแก๊สของแก๊สของแก๊ส

ในการศึกษาผลของอัตราการไหลของแก๊สของแก๊สของแก๊สต่อปริมาณการเกิดไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าอัตราการไหลของแก๊สของแก๊สตั้งแต่ 5-11 ลิตรต่อนาที และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10.3 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.18 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.9 และรูปที่ 3.21

ตารางที่ 3.9 พื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อัตราการไหลของแก๊สของแก๊สต่างๆ

| อัตราการไหลของแก๊สของแก๊ส (ลิตรต่อนาที) | พื้นที่ใต้พีค |
|-----------------------------------------|---------------|
| 5                                       | 15874472      |
| 6                                       | 16495162      |
| 7                                       | 17360244      |
| 8                                       | 17701324      |
| 9                                       | 17585420      |
| 10                                      | 17463396      |
| 11                                      | 17057628      |



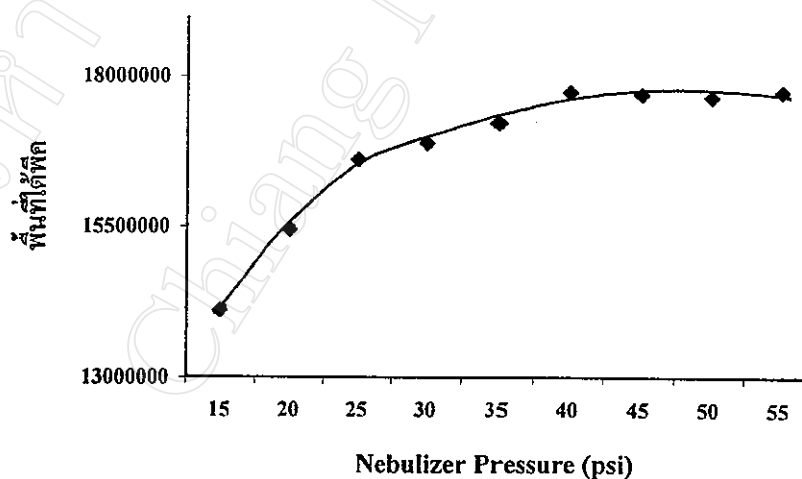
รูปที่ 3.21 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง และพื้นที่ที่ได้ฟักของผลิตภัณฑ์ 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

#### 3.9.4 ผลการศึกษาความดันที่เนบิวไลเซอร์

ในการศึกษาผลของความดันที่เนบิวไลเซอร์ต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของผลิตภัณฑ์ 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าความดันที่เนบิวไลเซอร์ตั้งแต่ 15-55 พีเอสไอ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10.4 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.18 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ที่ได้ฟัก ได้ผลดังตารางที่ 3.10 และรูปที่ 3.22

ตารางที่ 3.10 พื้นที่ที่ได้ฟีดของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่ความดันที่เนบิวไลเซอร์ต่างๆ

| ความดันที่เนบิวไลเซอร์ (พีกเอสไอ) | พื้นที่ที่ได้ฟีด |
|-----------------------------------|------------------|
| 15                                | 14113000         |
| 20                                | 15454124         |
| 25                                | 16613623         |
| 30                                | 16889864         |
| 35                                | 17224818         |
| 40                                | 17739498         |
| 45                                | 17703736         |
| 50                                | 17661838         |
| 55                                | 17754930         |



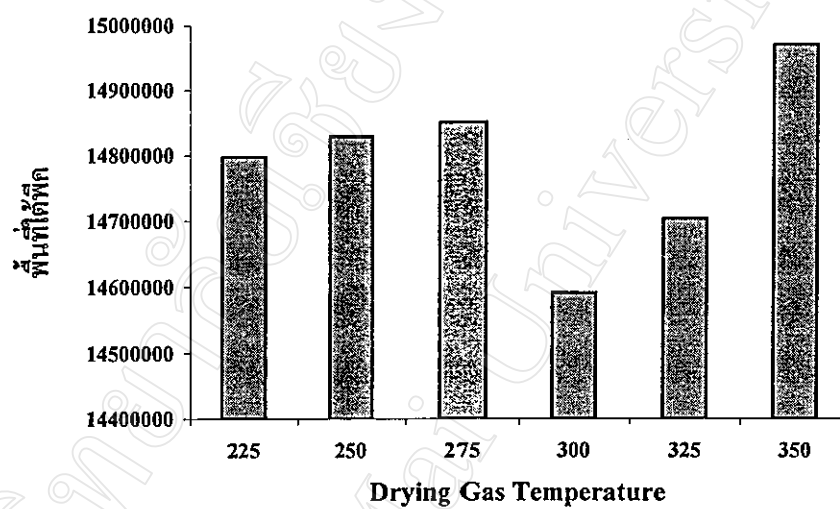
รูปที่ 3.22 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความดันที่เนบิวไลเซอร์ และพื้นที่ที่ได้ฟีดของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

### 3.9.5 ผลการศึกษาอุณหภูมิของแก๊สสอบแห้ง

ในการศึกษาผลของอุณหภูมิของแก๊สสอบแห้งต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าอุณหภูมิของแก๊สสอบแห้ง ตั้งแต่ 225-350 องศาเซลเซียส และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.10.4 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.18 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.11 และรูปที่ 3.23

ตารางที่ 3.11 พื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ที่อุณหภูมิของแก๊สสอบแห้งต่างๆ

| อุณหภูมิของแก๊สสอบแห้ง<br>(องศาเซลเซียส) | พื้นที่ใต้พีค |
|------------------------------------------|---------------|
| 225                                      | 14797486      |
| 250                                      | 14828157      |
| 275                                      | 14849749      |
| 300                                      | 14591464      |
| 325                                      | 14703645      |
| 350                                      | 14968731      |



รูปที่ 3.23 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง และพื้นที่ผิวของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde

### 3.10 ผลการวิเคราะห์ปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าว โดยอาศัยการเกิดปฏิกิริยากับ 2-aminobenzaldehyde ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริก 0.10 โมลต่อลิตร

#### 3.10.1 ผลการทำกราฟมาตรฐาน

ในการทดลองนี้ได้วิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้วิธี internal standardization ซึ่งมีการสังเคราะห์สารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline ขึ้น และใช้ 2-acetylpyrrole เป็นสารมาตรฐานภายใน เมื่อนำสารละลายผสมมาตรฐานซึ่งเตรียมดังการทดลองที่ 2.11.1 หัวข้อ (3) ที่ความเข้มข้นต่างๆ มาวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟลูออโรเจนเจกซ์อิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชันแมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชัน โดยมีสถานะที่ใช้ในการทดลองดังการทดลองที่ 2.11.1 ทำการหาพื้นที่ใต้พีค จากแมสโครมาโทแกรมของไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 215 amu ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ที่ได้จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde และที่มวลต่อประจุเท่ากับ 110 amu ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole สรุปได้ดังตารางที่ 3.12 และคำนวณหาอัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของผลผลิตจากปฏิกิริยาระหว่างสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ต่อสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole สรุปได้ดังตารางที่ 3.13

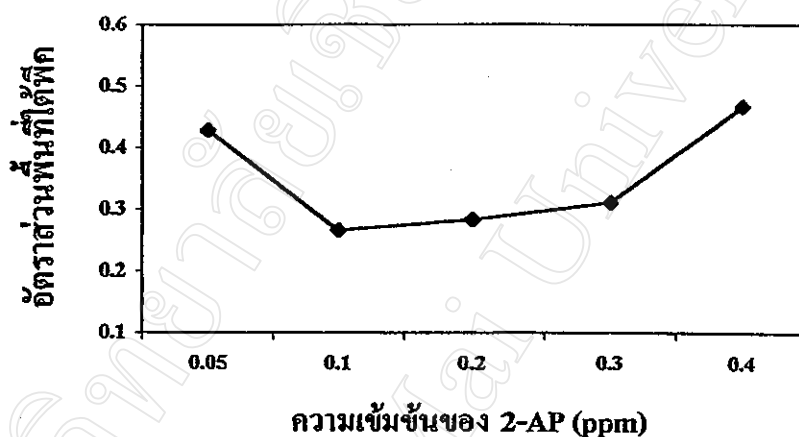
ตารางที่ 3.12 พื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde และสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole ที่ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline

| ความเข้มข้นของ<br>2-acetyl-1-pyrroline<br>(ppm) | พื้นที่ใต้พีค |                     |            |                     |            |                     |
|-------------------------------------------------|---------------|---------------------|------------|---------------------|------------|---------------------|
|                                                 | ครั้งที่ 1    |                     | ครั้งที่ 2 |                     | ครั้งที่ 3 |                     |
|                                                 | ผลผลิต        | 2-acetyl<br>pyrrole | ผลผลิต     | 2-acetyl<br>pyrrole | ผลผลิต     | 2-acetyl<br>pyrrole |
| 0.05                                            | 137225        | 329899              | 141250     | 326708              | 142094     | 326857              |
| 0.10                                            | 76874.8       | 301259              | 82538.1    | 310533              | 85668.1    | 308253              |
| 0.20                                            | 90625.1       | 329415              | 89154      | 313319              | 90733.7    | 312157              |
| 0.30                                            | 111580        | 363775              | 119975     | 387697              | 120220     | 379363              |
| 0.40                                            | 119310        | 264655              | 130457     | 281164              | 135729     | 278777              |

ตารางที่ 3.13 อัตราส่วนของพื้นที่ใต้พีคของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ต่อสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole ที่ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline

| ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน<br>2-acetyl-1-pyrroline<br>(ppm) | อัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของผลผลิตต่อ<br>สารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole |            |            |        |
|-----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|------------|------------|--------|
|                                                           | ครั้งที่ 1                                                            | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | เฉลี่ย |
| 0.05                                                      | 0.4161                                                                | 0.4323     | 0.4347     | 0.4277 |
| 0.10                                                      | 0.2552                                                                | 0.2658     | 0.2779     | 0.2663 |
| 0.20                                                      | 0.2751                                                                | 0.2845     | 0.2907     | 0.2834 |
| 0.30                                                      | 0.3067                                                                | 0.3095     | 0.3169     | 0.3110 |
| 0.40                                                      | 0.4508                                                                | 0.4640     | 0.4869     | 0.4672 |

สร้างกราฟมาตรฐานโดยการพล็อตระหว่างความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline และอัตราส่วนพื้นที่ที่ได้พีคเฉลี่ยของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation จากปฏิกิริยาระหว่างสารตั้งคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde ต่อสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole ได้กราฟมาตรฐานดังรูปที่ 3.24



รูปที่ 3.24 กราฟมาตรฐานระหว่างความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline และอัตราส่วนพื้นที่ที่ได้พีคเฉลี่ยของผลผลิต 2,3-trimethylene-2-acetyl-1,2-dihydroquinazolinium cation ต่อสารมาตรฐานภายใน 2-acetylpyrrole

จากรูปที่ 3.24 สรุปได้ว่าได้กราฟมาตรฐานไม่เป็นเส้นตรง ดังนั้นเทคนิคการหาปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline โดยอาศัยการเกิดปฏิกิริยาระหว่างสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline และ 2-aminobenzaldehyde นี้จะทำให้ความคลาดเคลื่อนในการวิเคราะห์สูง จึงไม่สามารถประยุกต์ใช้ในการหาปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในตัวอย่างข้าวพันธุ์ต่างๆ ได้

## ผลการทดลองตอนที่ 2

### การตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิค โพลินเจกซ์อิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรี

#### 3.11 ผลการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบของสารสกัดจากเมล็ดข้าว โดยใช้ เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเป็คโตรเมตรี

ในงานวิจัยนี้ได้ทำการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟีและได้นำเทคนิคแมสสเป็คโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation และ chemical ionisation เข้ามาช่วยในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพ เมื่อวิเคราะห์องค์ประกอบของสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเป็คโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนแบบ electron impact ionisation สามารถนำข้อมูลแมสสเป็คตรัมที่ได้มาเปรียบเทียบกับข้อมูลแมสสเป็คตรัมของสารมาตรฐานจากฐานข้อมูลใน Wiley 275 mass spectral library ได้ และแหล่งกำเนิดไอออนที่เป็นแบบ chemical ionisation สามารถนำข้อมูลเกี่ยวกับมวลโมเลกุลที่ได้มายืนยันองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวได้เช่นกัน ทำให้การวิเคราะห์เชิงคุณภาพมีความถูกต้อง และแม่นยำยิ่งขึ้น แต่เนื่องจากในงานวิจัยนี้ได้มุ่งที่จะพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิคโพลินเจกซ์อิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรี และแบบของการสแกนมวลต่อประจุเป็นแบบเก็บเฉพาะที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 เท่านั้น ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนที่เกิดจากการรับโปรตอนของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ดังนั้นก่อนที่จะทำการตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิคดังกล่าวจะต้องทำการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวก่อน เพื่อตรวจสอบดูว่ามีองค์ประกอบอื่นที่มีน้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 111 amu หรือมีน้ำหนักโมเลกุลของไอออนที่เกิดจากการรับโปรตอนเท่ากับ 112 amu หรือไม่ เพื่อให้การตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวมีความถูกต้องมากขึ้น

**3.11.1 ผลการสกัดสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline จากเมล็ดข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 (ก.พ.ส.) ด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร และวิเคราะห์หองค์ประกอบโดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation**

เมื่อนำสารสกัดเข้มข้นปริมาตรประมาณ 0.20 มิลลิลิตรที่สกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 (ก.พ.ส.) ด้วยวิธีการสกัดดังการทดลองที่ 2.13.1 มาทำการวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation โดยมีสถานะที่ใช้ในการทดลองดังข้อ 2.13.1 เพื่อศึกษานิวคลีและ โครงสร้างของสารที่เป็นองค์ประกอบในสารสกัดได้ผลการแยกองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว ดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.25-3.26 และตารางที่ 3.14 แสดงข้อมูลเกี่ยวกับแมสสเปกตรัมและโครงสร้างทางเคมีขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว

ในการวิเคราะห์หองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวทำได้โดยนำแมสสเปกตรัมขององค์ประกอบที่ได้เทียบกับแมสสเปกตรัมของสารมาตรฐานใน The Wiley 275 mass spectral library search

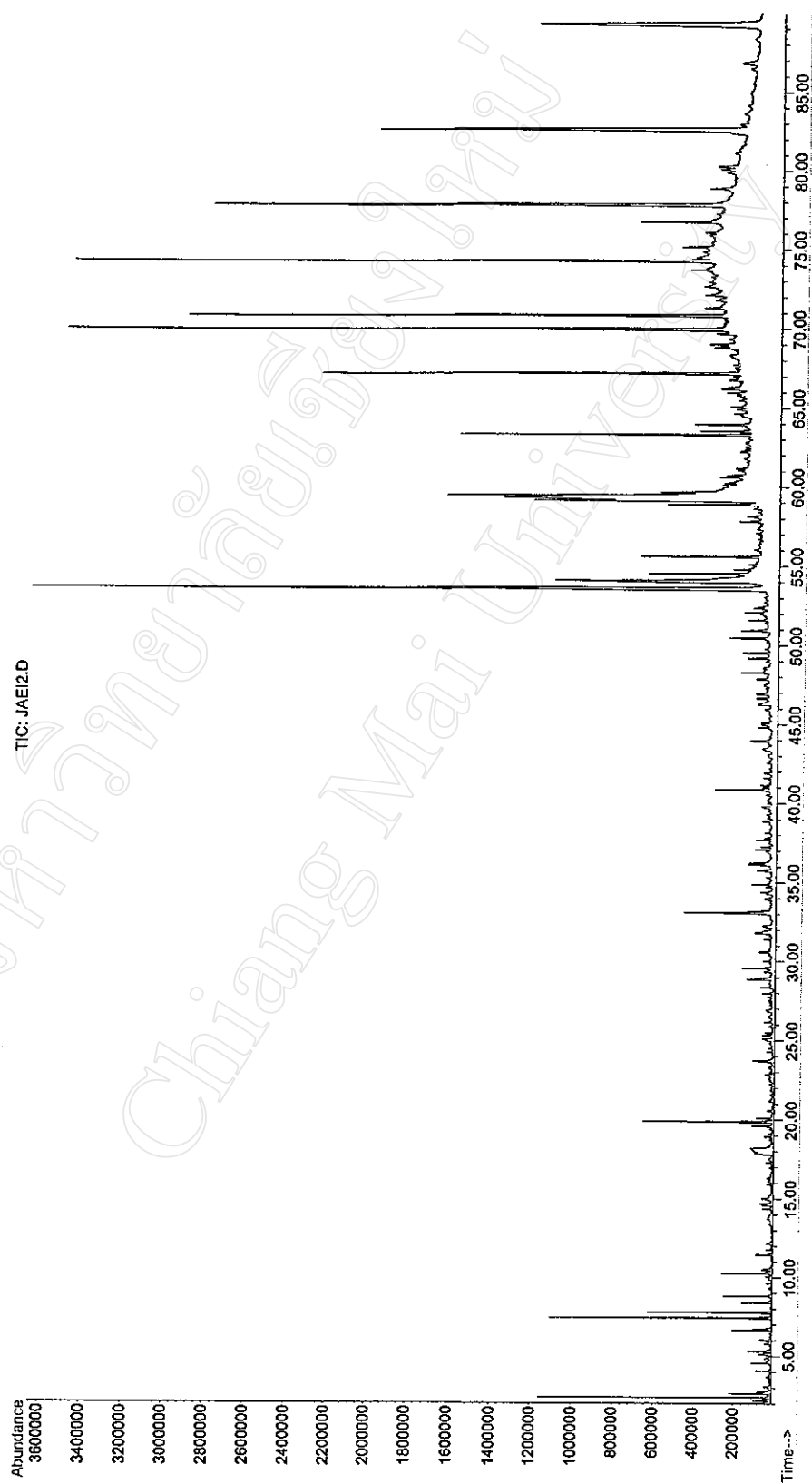
ในการเปรียบเทียบแมสสเปกตรัมขององค์ประกอบที่ได้กับแมสสเปกตรัมของสารมาตรฐาน จะให้ผลการเปรียบเทียบออกมาเป็นเปอร์เซ็นต์ความเหมือน

ถ้าเปอร์เซ็นต์ความเหมือนอยู่ในช่วง 85-99 % จะถือว่าสารที่ได้เป็นตัวเดียวกันกับสารมาตรฐาน

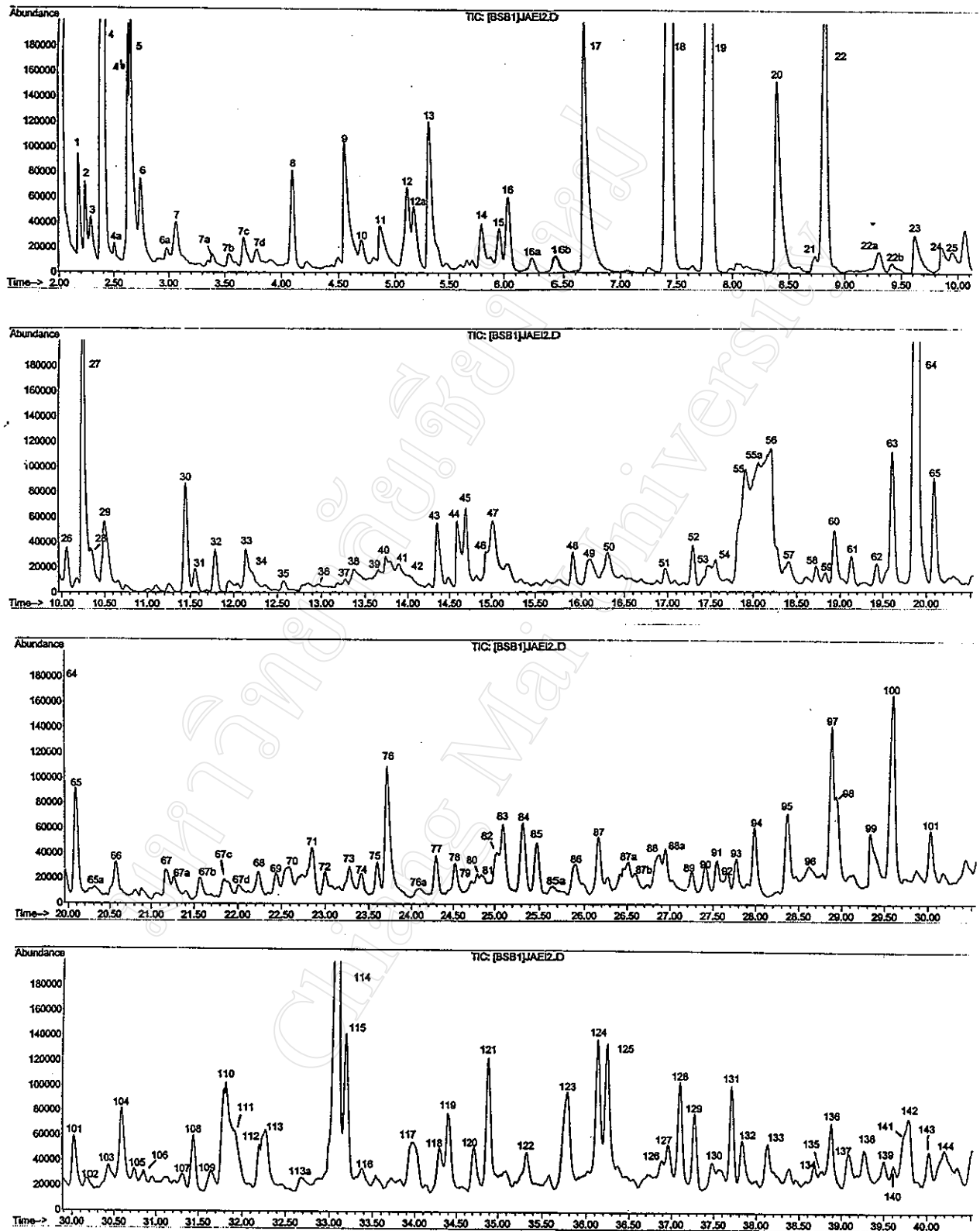
ถ้าเปอร์เซ็นต์ความเหมือนอยู่ระหว่าง 60-85 % แทนด้วยสัญลักษณ์ ? คือ ไม่แน่ใจว่าเป็นตัวเดียวกับสารมาตรฐาน

ถ้าเปอร์เซ็นต์ความเหมือนน้อยกว่า 60 % แทนด้วย unknown คือ สารที่ได้ไม่มีในแมสสเปกตรัมของสารมาตรฐานที่เก็บไว้ในฐานข้อมูล

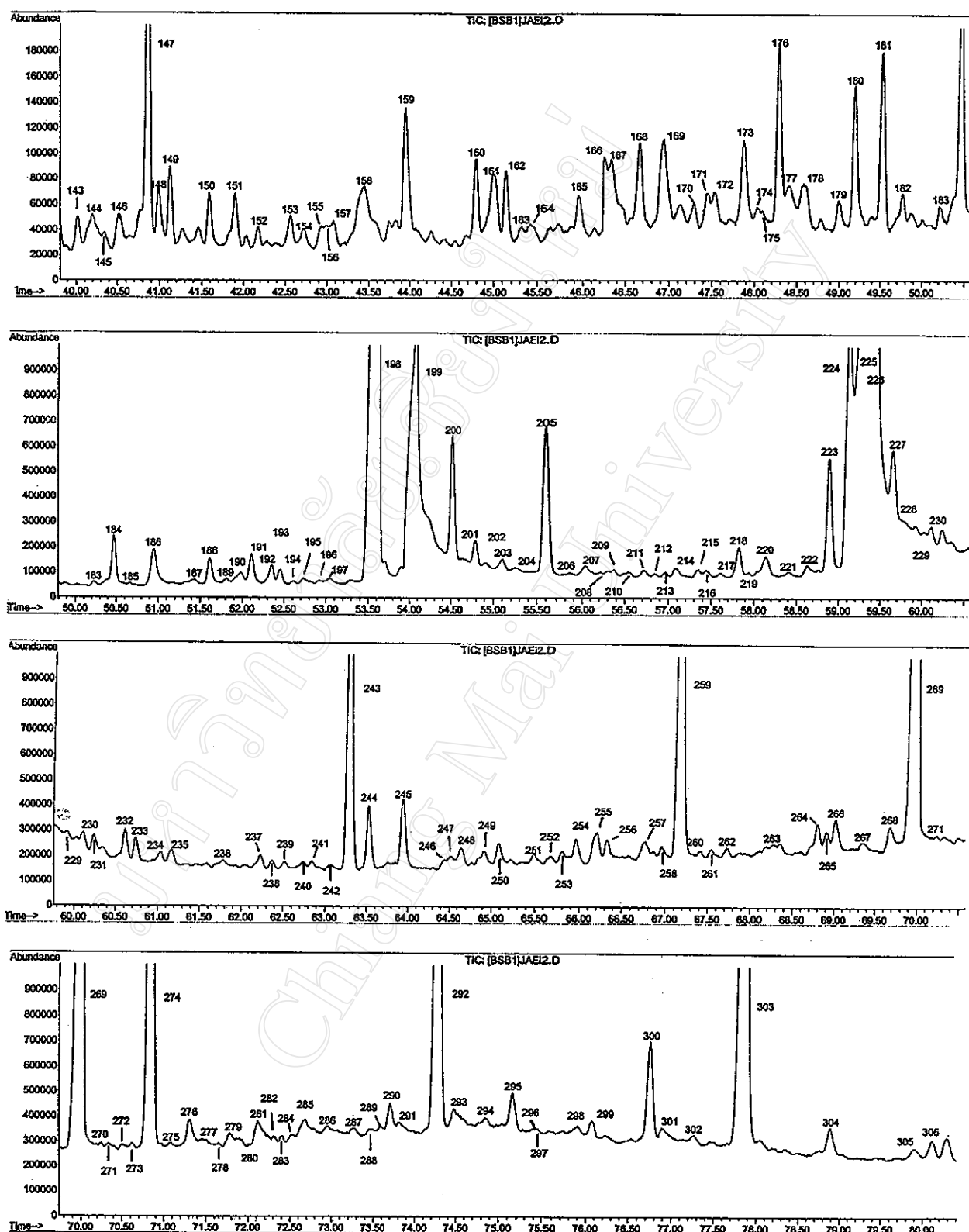
อย่างไรก็ตามการเปรียบเทียบแมสสเปกตรัมกับแมสสเปกตรัมของสารมาตรฐานในฐานข้อมูลนี้ อาจมีผลของไอออนจาก background รบกวน ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในการเปรียบเทียบได้ ดังนั้นแมสสเปกตรัมที่จะนำมาวิเคราะห์ต้องผ่านขั้นตอนการลบไอออนของ background ก่อน และแน่ใจว่าเป็นแมสสเปกตรัมของสารเดี่ยว



รูปที่ 3.25 โครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวโพดที่ใช้เทคนิค GC/EI-MS

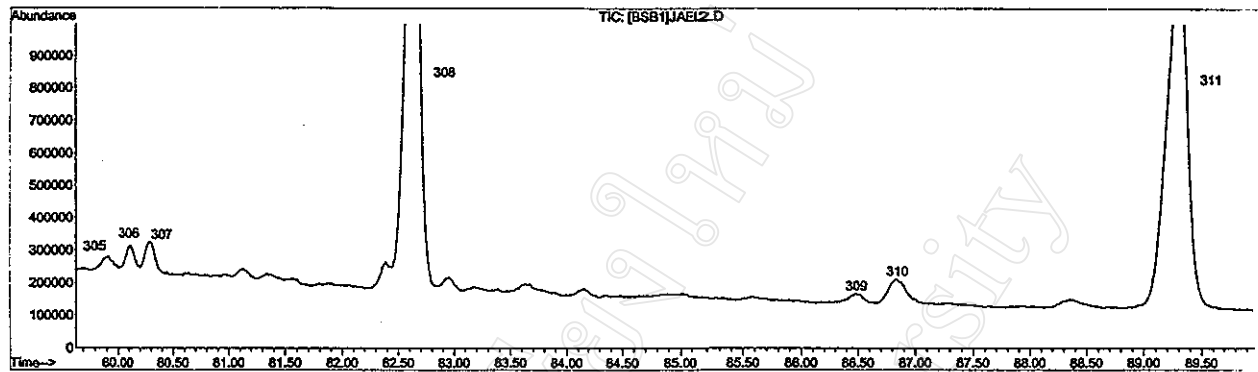


รูปที่ 3.26 ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค GC-EI-MS



รูปที่ 3.26 (ต่อ) ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค

GC-EI-MS



รูปที่ 3.26 (ต่อ) ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค GC/EI-MS

ตารางที่ 3.14 ข้อมูลแมสสเปกตรัมขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation

| Peak no. | Structure                      | m/z (% relative abundance)                                                         |
|----------|--------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|
| 1        | ? 2,2-dimethyl propanol        | 31(22), 43(49), 55(41), 59(100), 73(42), 84(6)                                     |
| 2        | Ethane, 1,1,1-trichloro-       | 35(6), 47(2), 61(44), 82(3), 97(100), 99(65), 101(10),<br>117(14), 119(13), 121(5) |
| 3        | ? 2-Propen-1-ol, 2-methyl-     | 43(47), 49(11), 57(100), 72(28), 84(7), 97(4)                                      |
| 4        | Benzene                        | 39(9), 52(17), 63(3), 78(100), 84(1)                                               |
| 4a       | 3-Buten-2-one, 3-methyl-       | 43(100), 49(7), 60(8), 69(23), 78(4), 84(25)                                       |
| 5        | ? 3-Penten-2-ol                | 39(26), 43(96), 58(11), 71(100), 86(9), 92(2)                                      |
| 5a       | N,N-dimethyl-ethanamine,       | 43(40), 58(31), 71(41), 86(100), 101(17)                                           |
| 6        | Unknown                        | 41(46), 53(24), 58(15), 67(11), 69(100), 86(45), 104(9),<br>106(3)                 |
| 6a       | ? 2-Butanone, 3-hydroxy-       | 41(40), 43(60), 45(100), 58(9), 69(25), 86(14), 88(10)                             |
| 7        | ? 2-Butenal, 2-ethenyl-        | 40(8), 53(23), 58(15), 65(25), 69(13), 81(17), 96(100)                             |
| 7a       | Unknown                        | 31(30), 43(41), 49(3), 59(100), 69(16), 84(4), 87(7)                               |
| 7b       | ? 2-Pentene, 2-methyl-         | 39(35), 43(100), 58(37), 69(90), 84(26), 100(13)                                   |
| 7c       | ? Pentanal, 2-methyl-          | 41(45), 43(100), 57(52), 58(100), 71(17), 84(5), 100(4)                            |
| 7d       | Unknown                        | 39(13), 43(100), 57(9), 69(8), 83(10), 98(4)                                       |
| 8        | Benzene, methyl-               | 39(3), 46(2), 51(5), 65(12), 77(1), 91(100)                                        |
| 9        | ? 2,4-Pentanedione             | 43(75), 45(100), 57(11), 69(3), 85(85), 100(53)                                    |
| 10       | ? Carbonic acid, diethyl ester | 45(100), 63(33), 75(9), 85(63), 91(93), 100(39)                                    |
| 11       | ? 2,3-Butanediol               | 28(3), 45(100), 57(9), 75(5), 85(4), 100(3)                                        |
| 12       | Unknown                        | 41(98), 44(69), 57(100), 70(39), 85(59), 98(25), 114(7)                            |
| 12a      | ? 3-Hexanol, 3-ethyl-          | 39(11), 43(49), 59(100), 69(10), 100(3), 107(16)                                   |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                             | m/z (% relative abundance)                                              |
|----------|---------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| 13       | ? 2-Propanol                          | 41(11), 45(100), 57(3), 69(8), 77(3), 87(6), 100(1), 107(2), 109(1)     |
| 14       | ? 2-Methyl-butane, 2,3-dichloro       | 41(16), 63(10), 69(32), 77(100), 85(8), 105(12), 107(4)                 |
| 15       | ? 2-Hexene, 2,5,5-trimethyl-          | 41(3), 57(100), 70(65), 85(4), 100(3), 111(8), 126(16)                  |
| 16       | Cyclotrisiloxane, hexamethyl          | 61(1), 96(11), 119(2), 133(7), 147(2), 163(2), 177(3), 191(2), 207(100) |
| 16a      | Unknown                               | 41(42), 57(100), 70(50), 84(9), 111(6), 126(12)                         |
| 16b      | Unknown                               | 41(46), 55(85), 69(43), 83(100)                                         |
| 17       | ? 4-Methyl-2-pentanone,<br>4-hydroxy- | 43(100), 59(26), 83(3), 98(5), 101(26)                                  |
| 18       | Benzene, ethyl-                       | 39(5), 51(10), 65(9), 77(9), 91(100), 106(32)                           |
| 19       | Benzene, 1,4-dimethyl-                | 39(8), 51(10), 65(7), 77(13), 91(100), 105(23), 106(50)                 |
| 20       | Unknown                               | 43(100), 57(8), 69(16), 84(15), 99(6), 112(1)                           |
| 21       | ? Benzene, ethenyl-                   | 58(8), 63(8), 72(13), 78(46), 85(61), 100(18), 104(100), 115(21)        |
| 22       | Benzene, 1,3-dimethyl-                | 51(10), 65(7), 77(13), 91(100), 105(19), 106(46)                        |
| 22a      | Unknown                               | 43(100), 57(41), 72(39), 84(43), 100(7), 123(9), 127(4)                 |
| 22b      | Unknown                               | 41(99), 44(72), 53(25), 57(73), 69(100), 81(41), 86(25), 112(23)        |
| 23       | Ethanol, 2-butoxy-                    | 45(2), 57(100), 75(8), 87(22), 100(3)                                   |
| 24       | Furanone, dihydro-2(3H)-              | 28(68), 42(100), 56(21), 83(15), 85(23), 86(33)                         |
| 25       | ? 2-Pentanone                         | 28(36), 42(41), 58(25), 72(17), 86(100)                                 |
| 26       | ? 3,4-Dihydropyran                    | 57(71), 69(76), 84(100), 97(18), 112(8), 125(5), 140(11)                |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                             | m/z (%relative abundance)                                                                    |
|----------|---------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|
| 27       | 1-Pyrroline, 2-acetyl-                | 41(54), <b>43(100)</b> , 68(19), 83(42), 111(19), 112(2)                                     |
| 28       | Sulfone, dimethyl-                    | 43(67), 55(42), 69(26), <b>79(100)</b> , 83(27), 97(58),<br>105(34), 111(12), 120(3), 140(5) |
| 29       | ? 2,4-Pentanediol, 2-methyl-          | <b>43(100)</b> , 58(11), 69(12), 79(27), 94(16), 101(50),<br>103(4)                          |
| 30       | ? Pentane, 2,3,4-trimethyl-           | 43(48), <b>70(100)</b> , 71(94), 83(9), 95(3), 111(9),<br>125(1), 140(13)                    |
| 31       | ? Cyclohexane, 1-methyl-<br>2-propyl- | 40(4), 54(5), 69(19), 81(9), <b>97(100)</b> , 140(8)                                         |
| 32       | Unknown                               | 54(4), 65(17), 70(73), 71(73), 77(9), 83(8), <b>91(100)</b> ,<br>111(7), 120(23), 140(11)    |
| 33       | ? 1-Azabicyclo[2.2.2]octane           | <b>42(100)</b> , 54(22), 68(5), 77(71), 83(50), 105(60),<br>106(62), 111(42)                 |
| 34       | Unknown                               | 42(66), 54(20), 77(22), 83(41), 91(20), <b>105(100)</b> ,<br>106(12), 111(32), 120(30)       |
| 35       | Unknown                               | 65(14), 79(47), 95(43), 105(87), 120(45), 123(48),<br><b>137(100)</b> , 138(32)              |
| 36       | Unknown                               | 32 (18), 69(40), 75(39), 85(37), <b>93(100)</b> , 98(42),<br>100(21)                         |
| 37       | Unknown                               | 66(15), 85(18), 93(40), 100(11), <b>137(100)</b> , 152(11)                                   |
| 38       | Unknown                               | 61(12), 75(32), <b>84(100)</b> , 93(13), 103(32), 122(19),<br>133(18)                        |
| 39       | Unknown                               | 58(11), 75(22), <b>84(100)</b> , 95(14), 109(20), 137(36)                                    |
| 40       | ? Pyridine, 2,3,5-trimethyl-          | 61(30), 79(36), 84(54), 106(22), 120(38), <b>121(100)</b> ,<br>122(10)                       |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                          | m/z (% relative abundance)                                                          |
|----------|------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| 41       | Unknown                            | 61(100), 77(16), 81(92), 84(48), 94(44), 121(22), 138(15)                           |
| 42       | ? 1,2,3-Propanetriol               | 31(31), 43(71), 61(100), 84(34), 93(6)                                              |
| 43       | Unknown                            | 43(85), 58(41), 69(26), 101(100), 112(17), 135(8)                                   |
| 44       | Unknown                            | 45(27), 54(9), 72(19), 83(100), 98(3), 112(2), 127(2)                               |
| 45       | ? Cyclotetrasiloxane, octamethyl   | 68(2), 83(12), 133(6), 193(5), 207(4), 249(6), 265(8), 281(100), 285(1)             |
| 46       | Unknown                            | 58(13), 68(12), 69(12), 83(100), 101(15), 111(3), 126(4), 127(5)                    |
| 47       | ? Piperidine, 1-acetyl-            | 42(68), 56(98), 69(81), 77(13), 83(100), 84(99), 98(60), 113(20), 137(47), 152(6)   |
| 48       | Hexanol, 2-ethyl-                  | 57(100), 70(22), 83(29), 98(9), 112(3)                                              |
| 49       | Unknown                            | 57(23), 68(41), 71(100), 79(39), 83(48), 97(23), 109(90), 123(54), 124(25), 154(10) |
| 50       | Unknown                            | 58(42), 68(42), 85(66), 95(40), 101(95), 109(100), 110(64), 123(40)                 |
| 51       | ? Furanone, 5-ethyldihydro-2-(3H)- | 57(10), 58(10), 70(8), 85(100), 98(6), 99(5)                                        |
| 52       | Decane, 2,4,6,-trimethyl-          | 57(100), 71(73), 85(72), 99(10), 113(15), 127(11)                                   |
| 53       | Ethanone, 1-[1H-pyrrol-2-yl]-      | 58(10), 66(56), 77(14), 85(14), 94(100), 109(78), 110(7), 120(7)                    |
| 54       | Unknown                            | 57(96), 66(45), 71(55), 85(100), 94(76), 109(66), 127(11)                           |
| 55       | ? 2-Pyrrolidinone                  | 42(49), 56(12), 58(12), 72(10), 85(100), 97(3), 101(4), 114(7), 123(1)              |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                   | m/z (% relative abundance)                                                                 |
|----------|---------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| 55a      | 2-Pyrrolidinone                             | 41(59), 56(17), 69(3), <b>85(100)</b> , 97(1), 113(1), 119(1)                              |
| 56       | 2-Pyrrolidinone                             | 41(44), 42(50), 56(12), 69(3), 84(19), <b>85(100)</b> , 119(1)                             |
| 57       | ? 2-Pyrrolidinone                           | 58(29), 69(8), 77(9), <b>83(100)</b> , 85(55), 98(68), 99(39),<br>125(12)                  |
| 58       | Unknown                                     | 69(28), 85(34), 111(37), <b>112(100)</b> , 113(8)                                          |
| 59       | ? 2,5-Pyrrolidinedione,<br>1-methyl-        | 28(90), 56(68), 85(61), 97(14), 101(17), <b>113(100)</b> ,<br>129(9)                       |
| 60       | ? 1,3-Dimethylpyrazole, 4-acetyl-           | 40(3), 67(10), 85(5), 95(4), <b>123(100)</b> , 138(41), 139(4)                             |
| 61       | Unknown                                     | 56(42), <b>57(100)</b> , 85(48), 87(40), 100(10), 127(4)                                   |
| 62       | ? Undecane, 2,7-dimethyl-                   | <b>57(100)</b> , 71(28), 85(65), 93(14), 156(6)                                            |
| 63       | Aldehyde, nonyl-                            | 41(58), <b>57(100)</b> , 70(37), 82(29), 98(32), 114(7), 124(4)                            |
| 64       | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 58(9), 85(9), 101(26), 125(2), 140(1), 143(3)                             |
| 65       | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 58(3), 67(2), 83(6), 95(24), 101(33), 123(46)<br>138(23), 139(11), 198(1) |
| 65a      | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 57(18), 69(23), 85(24), 101(16), 113(17)                                  |
| 66       | Unknown                                     | <b>58(100)</b> , 72(64), 85(25), 101(20), 114(37), 123(5)                                  |
| 67       | 3-Pyridine carboxylic acid,<br>methyl ester | 51(31), 68(10), 78(84), <b>106(100)</b> , 136(29), 137(53)                                 |
| 67a      | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 56(7), 69(7), 74(17), 99(28), 106(10),<br>137(7), 141(3)                  |
| 67b      | Unknown                                     | 58(8), 72(5), 82(17), <b>83(100)</b> , 101(13), 117(7)                                     |
| 67c      | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 57(11), 69(10), 83(25), 98(15), 127(14)                                   |
| 67d      | Unknown                                     | <b>43(100)</b> , 58(48), 70(70), 83(23), 99(59), 113(13),<br>123(13), 142(12), 167(11)     |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                 | m/z (%relative abundance)                                                                                |
|----------|-------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 68       | Unknown                                   | 58(13), 82(17), 112(8), 155(10), 163(18), 193(6),<br>250(7), 325(27), 341(100), 342(37), 343(25), 344(6) |
| 69       | Unknown                                   | 58(9), 79(13), 95(33), 109(100), 123(55), 124(33),<br>139(4)                                             |
| 70       | Unknown                                   | 56(100), 69(84), 85(61), 96(75), 111(35), 123(38),<br>139(74), 154(45), 267(30), 355(29)                 |
| 71       | Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- | 57(49), 71(85), 81(100), 95(83), 109(15), 123(40),<br>138(28), 139(7), 141(6)                            |
| 72       | ? Linalol, epoxy-                         | 58(19), 67(55), 68(100), 79(20), 83(19), 94(54), 109(9),<br>123(6)                                       |
| 73       | ? 4-Hexen-2-one                           | 58(30), 72(16), 83(30), 98(100), 99(33), 102(47),<br>116(32), 117(9)                                     |
| 74       | Unknown                                   | 58(33), 79(20), 83(25), 97(16), 109(100), 123(62),<br>124(28), 125(11), 126(11)                          |
| 75       | ? 3-Hexanone, 2-methyl-                   | 43(100), 58(15), 74(14), 85(11), 99(40), 101(45),<br>114(39), 115(6)                                     |
| 76       | Unknown                                   | 43(69), 56(46), 77(14), 83(100), 85(51), 101(31),<br>116(17), 135(32), 136(35), 141(32), 159(5)          |
| 76a      | Unknown                                   | 43(100), 57(36), 69(21), 79(12), 83(60), 98(23),<br>109(11), 124(10)                                     |
| 77       | Dodecane                                  | 57(100), 71(35), 85(40), 99(10), 127(4), 170(5)                                                          |
| 78       | Unknown                                   | 57(100), 69(79), 82(60), 96(50), 112(31), 113(12)                                                        |
| 79       | Unknown                                   | 58(16), 66(46), 85(33), 93(100), 98(28), 121(67),<br>123(8)                                              |
| 80       | Pyridine, 2-methyl-                       | 58(15), 65(42), 66(46), 93(100), 98(25), 121(70)                                                         |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                    | m/z (%relative abundance)                                                     |
|----------|----------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| 81       | Unknown                                      | 58(26), 69(28), 78(59), 85(37), 98 (38), 106(100),<br>123(57), 151(31)        |
| 82       | ? Benzothiazole                              | 58(19), 82(12), 98(35), 99(33), 108(32), 135(100),<br>137(6)                  |
| 83       | Ethanol, 2-phenoxy-                          | 57(14), 58(14), 66(17), 77(32), 85(40), 94(100),<br>115(21), 123(2)           |
| 84       | Unknown                                      | 43(100), 58(10), 83(12), 101(24), 125(7), 141(1)                              |
| 85       | Unknown                                      | 43(100), 58(30), 72(21), 84(54), 96(37), 101(67),<br>123(11), 141(5)          |
| 85a      | Unknown                                      | 43(100), 55(32), 67(23), 71(38), 84(24), 102(26),<br>125(18), 129(95)         |
| 86       | ? 1H-pyrrole-2,5-dione,<br>3-ethyl-4-methyl- | 53(34), 67(79), 82(32), 99(26), 124(30), 139(100),<br>140(14)                 |
| 87       | Unknown                                      | 43(42), 58(8), 67(9), 79(23), 95(35), 100(34),<br>111(10), 122(37), 123(100)  |
| 87a      | ? Hexahydro-2H-azepin-2-one                  | 43(100), 55(48), 59(45), 67(12), 85(22), 103(20),<br>113(29), 123(10), 159(6) |
| 87b      | Unknown                                      | 43(100), 55(73), 69(36), 77(36), 85(53), 97(18),<br>113(46), 123(21), 135(65) |
| 88       | Unknown                                      | 56(14), 69(21), 85(100), 98(21), 113(39), 126(19),<br>141(7)                  |
| 88a      | Unknown                                      | 43(100), 55(12), 69(7), 83(8), 96(27), 111(18),<br>136(6), 154(4)             |
| 89       | Unknown                                      | 40(38), 57(50), 68(62), 73(9), 85(100), 108(8),<br>125(63) 141(9), 168(56)    |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                  | m/z (%relative abundance)                                                       |
|----------|------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| 90       | Unknown                                                    | 42(17), 57(35), 69(40), 83(79), 95(8), 109(28),<br>125(100), 182(35)            |
| 91       | Unknown                                                    | 43(22), 57(82), 71(20), 83(56), 98(100), 125(53),<br>140(28), 155(13), 193(15)  |
| 92       | ? Hexadecane, 2,6,11,15-tetramethyl                        | 41(15), 57(100), 71(74), 85(20), 99(1), 105(10),<br>113(9), 169(7)              |
| 93       | ? 2,6-Dimethyl pyridine, 4-amino-                          | 45(3), 57(1), 67(2), 79(15), 91(4), 107(8), 122(100),<br>123(25), 143(5)        |
| 94       | Tetracosane                                                | 41(27), 57(100), 71(97), 85(58), 99(9), 113(8),<br>127(11), 155(7), 169(1)      |
| 95       | Unknown                                                    | 43(100), 57(35), 71(48), 85(41), 99(40), 112(84),<br>125(7), 142(14)            |
| 96       | Unknown                                                    | 41(21), 57(100), 69(63), 85(33), 105(10), 127(21),<br>327(23), 415(23)          |
| 97       | Tridecane                                                  | 43(77), 57(100), 71(54), 85(31), 111(35), 126(16),<br>147(7), 168(3), 184(5)    |
| 98       | Unknown                                                    | 43(54), 57(94), 72(100), 85(34), 114(50), 123(33),<br>151(24), 166(12), 181(19) |
| 99       | ? 1-Pyrrolidine carboxaldehyde, [S]-[-]-2-[methoxymethyl]- | 41(21), 68(19), 70(100), 98(87), 104(2), 141(4)                                 |
| 100      | Unknown                                                    | 43(100), 55(14), 69(13), 83(20), 97(71), 113(24),<br>127(4), 142(1), 152(2)     |
| 101      | Docosane                                                   | 41(27), 57(100), 71(82), 85(59), 99(13), 127(12),<br>145(5), 155(6), 169(5)     |
| 102      | Unknown                                                    | 42(26), 60(14), 69(100), 73(24), 80(13), 108(23),<br>119(12), 141(34), 145(12)  |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                 | m/z (%relative abundance)                                                                           |
|----------|-----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 103      | Unknown                                                   | 43(100), 57(38), 71(36), 85(34), 99(9), 112(8),<br>123(6), 147(4), 169(3), 325(6), 341(19), 429(14) |
| 104      | Unknown                                                   | 41(36), 55(76), 71(11), 84(100), 99(16), 105(11),<br>125(44), 147(5)                                |
| 105      | Unknown                                                   | 41(36), 57(100), 71(85), 85(74), 95(7), 105(17),<br>127(29), 141(28), 150(10)                       |
| 106      | Unknown                                                   | 41(7), 57(100), 71(79), 85(81), 99(7), 107(14),<br>127(20), 133(12), 141(10)                        |
| 107      | Unknown                                                   | 42(10), 55(36), 68(3), 83(100), 105(21), 133(12),<br>155(16), 179(15)                               |
| 108      | ? Furanone, dihydro-5-pentyl-<br>2(3H)-                   | 41(10), 57(14), 70(5), 85(100), 100(4), 128(3), 156(2)                                              |
| 109      | Unknown                                                   | 41(24), 57(100), 71(40), 85(30), 98(19), 135(10),<br>155(12), 163(12), 177(7), 193(6)               |
| 110      | Unknown                                                   | 43(100), 58(15), 85(100), 109(13), 127(3), 143(3),<br>183(1)                                        |
| 111      | Unknown                                                   | 41(13), 57(6), 70(100), 85(6), 98(21), 112(18),<br>137(1), 155(1), 169(1)                           |
| 112      | Unknown                                                   | 41(37), 57(100), 71(95), 85(35), 99(12), 109(7),<br>127(23), 141(6), 183(9)                         |
| 113      | 1,3-Diformyl-2-chloro-5,5-<br>dimethylcyclohexa-1,3-diene | 41(32), 57(33), 70(100), 98(83), 119(3), 143(3),<br>155(11), 183(16), 198(5)                        |
| 113a     | Unknown                                                   | 43(100), 55(19), 69(19), 83(22), 95(12), 109(14),<br>123(22), 141(7)                                |
| 114      | Unknown                                                   | 43(22), 70(100), 98(19), 114(6), 142(70), 191(1)                                                    |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                   | m/z (%relative abundance)                                                                                 |
|----------|-------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 115      | Tetradecane                                                 | 41(34), 57(100), 71(60), 85(36), 99(7), 113(3),<br>122(7), 141(2), 169(1), 198(5)                         |
| 116      | Unknown                                                     | 41(10), 57(100), 78(56), 91(9), 106(40), 122(46),<br>141(14), 171(12), 475(21), 476(14)                   |
| 117      | Unknown                                                     | 41(32), 57(37), 69(26), 77(10), 85(21), 95(15),<br>109(100), 151(92), 164(12), 169(11)                    |
| 118      | ? 2-Methylcyclohexa-5-en-1-ol                               | 41(23), 57(33), 70(100), 84(16), 97(59), 112(38),<br>125(13), 145(7), 155(7), 169(11)                     |
| 119      | Unknown                                                     | 41(10), 70(100), 98(25), 114(16), 142(92), 156(1),<br>207(1)                                              |
| 120      | Unknown                                                     | 43(64), 57(12), 70(100), 85(11), 95(20), 123(90),<br>141(8), 165(7), 177(9), 223(5)                       |
| 121      | Unknown                                                     | 41(14), 70(100), 98(25), 114(21), 142(89), 143(21)                                                        |
| 122      | Benzenedicarboxylic acid,<br>Diethyl ester-1,2-             | 41(20), 57(7), 69(31), 77(20), 92(11), 107(11),<br>133(10), 151(9), 163(100), 194(9)                      |
| 123      | 2,5-Cyclohexadiene,<br>2,6-bis(1,1-dimethylene)-            | 41(59), 57(67), 67(36), 77(15), 91(24), 123(20),<br>135(42), 149(35), 163(26), 177(100), 205(26), 220(58) |
| 124      | 2,5-Cyclohexadiene, 2,6-di(t-<br>butyl)-4-hydroxy-4-methyl- | 41(35), 57(95), 91(15), 105(11), 123(18), 137(36),<br>151(11), 165(100), 182(62), 221(21), 236(8)         |
| 125      | 1-Decene                                                    | 41(84), 55(100), 69(91), 83(63), 97(42), 112(8), 125(8),<br>140(9), 157(2), 163(4), 205(3)                |
| 126      | Unknown                                                     | 41(32), 57(100), 71(63), 85(49), 99(19), 109(14),<br>127(18), 141(14), 167(9)                             |
| 127      | Unknown                                                     | 57(15), 69(14), 82(36), 95(15), 109(15), 125(100),<br>149(4), 167(4), 193(4)                              |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                           | m/z (%relative abundance)                                                                                            |
|----------|-----------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 128      | Docosane                                            | 41(29), 57(100), 71(95), 85(69), 99(20), 113(13),<br>127(13), 141(5), 155(10), 163(18), 179(1), 194(5)               |
| 129      | Pentadecane                                         | 41(35), 57(100), 71(59), 85(39), 99(10), 113(3),<br>127(5), 141(3), 155(3), 169(2), 179(1), 212(4)                   |
| 130      | Unknown                                             | 41(12), 58(100), 71(49), 85(34), 105(6), 127(11),<br>141(8), 155(6), 172(4), 281(6)                                  |
| 131      | 2,6-Bis(1,1-dimethylethyl-4-methyl) phenol          | 41(9), 57(24), 71(5), 81(6), 91(6), 105(8), 119(4),<br>128(5), 145(11), 161(4), 177(7), 189(4), 205(100),<br>220(26) |
| 132      | 2,4-Bis(1,1-dimethylethyl) phenol                   | 41(8), 57(25), 73(6), 91(5), 115(4), 132(2), 147(2),<br>163(5), 175(4), 191(100), 192(14), 206(17)                   |
| 133      | 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-tri-2-[4H]-benzofuranone | 41(31), 67(48), 95(29), 111(100), 137(72), 152(23),<br>180(42)                                                       |
| 134      | Unknown                                             | 41(43), 57(100), 71(79), 85(49), 103(17), 129(68),<br>141(19), 155(18), 193(11), 211(13)                             |
| 135      | Unknown                                             | 41(15), 57(90), 70(30), 99(100), 117(40), 128(28),<br>143(18), 155(20), 172(14), 207(18)                             |
| 136      | Eicosane                                            | 41(27), 57(100), 71(88), 85(60), 99(15), 113(12),<br>127(13), 141(5), 155(9), 169(9), 207(3)                         |
| 137      | Unknown                                             | 41(62), 57(73), 70(61), 79(100), 87(13), 94(63),<br>110(15), 127(11), 137(9), 151(9), 207(8)                         |
| 138      | Unknown                                             | 41(31), 57(100), 71(72), 85(57), 99(26), 123(48),<br>138(31), 153(49), 181(17), 207(7), 521(8)                       |
| 139      | Unknown                                             | 44(10), 57(26), 73(40), 85(28), 95(38), 123(100),<br>138(71), 165(18), 193(12), 207(11)                              |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                       | m/z (%relative abundance)                                                                                               |
|----------|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 140      | Unknown                         | 41(16), <b>57(100)</b> , 71(83), 85(70), 99(16), 113(15), 127(17), 141(15), 155(10), 163(10), 169(8)                    |
| 141      | Unknown                         | 44(52), 55(79), 69(34), <b>83(100)</b> , 100(29), 109(14), 127(8), 149(6), 168(7), 179(5), 193(5), 207(6)               |
| 142      | Unknown                         | 41(60), 55(82), 69(40), 83(48), 95(37), <b>111(100)</b> , 123(54), 149(13), 161(34), 179(18), 204(14), 219(8)           |
| 143      | Unknown                         | 41(27), <b>57(100)</b> , 71(62), 85(65), 95(37), 105(19), 123(83), 138(51), 165(10), 207(9)                             |
| 144      | Unknown                         | 41(52), 55(56), 69(65), 83(40), 95(17), 110(20), <b>127(100)</b> , 155(12), 165(10), 207(9), 267(7)                     |
| 145      | Unknown                         | 41(52), 57(62), 69(63), 81(42), 91(56), 107(73), 119(46), 133(43), <b>161(100)</b> , 179(35), 189(27), 207(24), 267(25) |
| 146      | Unknown                         | 44(61), 55(85), 71(31), <b>83(100)</b> , 100(31), 126(37), 168(10), 182(7), 207(7)                                      |
| 147      | Diethyl phtalate                | 50(5), 65(10), 76(10), 93(7), 105(9), 121(6), <b>149(100)</b> , 150(13), 177(24), 222(2)                                |
| 148      | Unknown                         | 41(11), 56(7), <b>71(100)</b> , 83(4), 91(1), 115(2), 143(3), 159(7), 173(3), 193(1), 207(1), 243(4)                    |
| 149      | Hexadecane                      | 41(33), <b>57(100)</b> , 71(58), 85(39), 99(8), 130(35), 172(22), 200(3), 226(4), 267(2)                                |
| 150      | ? beta-Damascone,<br>3-hydroxy- | 41(59), 55(18), <b>69(100)</b> , 79(20), 91(22), 105(31), 121(56), 133(16), 149(27), 175(55), 193(49), 208(35)          |
| 151      | Methanone, diphenyl-            | 51(22), 77(61), <b>105(100)</b> , 119(3), 133(3), 152(5), 162(1), 182(53)                                               |
| 152      | Unknown                         | 41(18), 57(23), 73(27), 91(14), 107(23), 135(17), 161(16), 173(29), 207(15), 251(16), 267(48), <b>281(100)</b>          |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                   | m/z (%relative abundance)                                                                                                     |
|----------|---------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 153      | alpha-Cadinol                               | 41(24), 69(26), 79(36), <b>95(100)</b> , 105(66), 121(75), 137(15), 149(15), 161(53), 179(14), 19(37), 204(45)                |
| 154      | Unknown                                     | 41(23), 59(18), 69(34), 79(60), 95(76), 108(85), 119(79), 133(36), 147(26), <b>161(100)</b> , 204(32)                         |
| 155      | Unknown                                     | 41(17), <b>57(100)</b> , 71(39), 85(17), 108(22), 121(23), 137(16), 150(16), 169(12), 207(9), 253(7)                          |
| 156      | Unknown                                     | 41(18), 57(86), 69(42), 81(46), <b>95(100)</b> , 108(68), 121(97), 135(33), 151(29), 161(43), 181(24), 204(36)                |
| 157      | Unknown                                     | 41(30), 57(27), 69(20), <b>83(100)</b> , 99(68), 119(11), 134(22), 156(33), 179(7), 207(11), 211(10)                          |
| 158      | Unknown                                     | 41(11), 57(29), 69(45), 91(18), 112(116), 127(64), 151(63), <b>170(100)</b> , 182(26), 207(6)                                 |
| 159      | 1-Dodecene                                  | 41(79), <b>55(100)</b> , 69(90), 83(79), 97(54), 125(16), 147(18), 193(9), 221(14), 281(14), 327(5), 355(40), 401(15), 415(4) |
| 160      | Heptadecene                                 | 41(33), <b>57(100)</b> , 71(63), 85(44), 99(16), 113(5), 126(7), 141(4), 155(3), 169(3), 207(2), 240(4), 267(1)               |
| 161      | Tetracosane,<br>2,6,10,15,19,23-hexamethyl- | 41(26), <b>57(100)</b> , 71(81), 85(34), 99(13), 113(14), 127(12), 135(18), 155(6), 183(9), 207(4), 220(2), 253(2)            |
| 162      | Heptacosane                                 | 41(24), <b>57(100)</b> , 71(95), 85(67), 99(26), 113(17), 127(14), 141(8), 155(11), 169(6), 197(3), 221(2), 253(2), 267(2)    |
| 163      | Unknown                                     | 41(15), 57(48), 70(56), 95(18), 107(64), 119(23), <b>135(100)</b> , 149(65), 163(68), 181(13), 197(26), 207(23), 267(10)      |
| 164      | Unknown                                     | <b>57(100)</b> , 71(67), 85(33), 107(55), 121(50), 135(32), 149(67), 165(22), 183(64), 198(30), 207(22)                       |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                               | m/z (%relative abundance)                                                                                                             |
|----------|-----------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 165      | Unknown                                 | 41(61), 57(73), 69(50), 81(44), 91(62), 107(67),<br>123(28), 135(82), 153(26), 178(100), 207(22), 253(8),<br>267(9), 327(13), 341(13) |
| 166      | Pyrrole, 1-(2-aminophenyl)              | 51(6), 66(9), 78(8), 91(3), 103(6), 119(4), 130(11),<br>142(3), 157(100), 207(3), 327(1)                                              |
| 167      | ? Pyrrole, 1-(2-aminophenyl)            | 43(62), 57(32), 71(26), 91(24), 129(20), 157(100),<br>158(84), 177(6), 207(5), 216(5)                                                 |
| 168      | ? Docosane                              | 41(37), 57(100), 85(54), 107(27), 119(21), 135(99),<br>147(16), 157(39), 169(10), 218(16)                                             |
| 169      | (-)-Loliolide                           | 41(48), 57(67), 67(29), 81(29), 95(35), 111(57),<br>140(39), 163(30), 191(27), 219(100), 234(27), 253(4),<br>257(4)                   |
| 170      | ? Hahnfett                              | 41(28), 57(100), 71(60), 85(39), 99(16), 113(16),<br>127(13), 141(9), 155(9), 169(7), 178(14), 193(7),<br>207(10), 267(5), 341(4)     |
| 171      | ? Tridecane, 3-methyl-                  | 41(52), 57(100), 69(65), 81(52), 109(62), 123(83),<br>149(46), 163(66), 191(25), 209(64), 253(10), 267(10)                            |
| 172      | Unknown                                 | 41(35), 57(77), 69(58), 85(27), 108(33), 135(29),<br>149(37), 166(22), 180(100), 215(27), 267(7), 281(6)                              |
| 173      | ? 2-methoxy-5-(2-methylphenyl) pyrazine | 41(16), 55(12), 69(13), 95(10), 107(6), 124(100),<br>149(7), 166(11), 207(3), 267(2), 327(1)                                          |
| 174      | Unknown                                 | 41(65), 57(100), 73(66), 85(30), 107(24), 129(32),<br>149(19), 163(27), 207(34), 228(14), 253(14), 267(13),<br>281(9)                 |
| 175      | Unknown                                 | 42(47), 57(100), 71(66), 85(43), 109(21), 129(29),<br>163(14), 185(16), 207(24), 253(10), 267(10), 327(7)                             |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                       | m/z (%relative abundance)                                                                                                      |
|----------|-----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 176      | Octadecane                                                      | 43(33), <b>57(100)</b> , 71(64), 85(42), 99(12), 121(9), 141(4),<br>155(3), 169(2), 183(2), 197(2), 214(8), 254(4), 281(1)     |
| 177      | Unknown                                                         | 41(16), 57(27), 77(40), <b>105(100)</b> , 120(19), 144(15),<br>207(12), 253(3), 327(2)                                         |
| 178      | Nonadecane                                                      | 41(30), <b>57(100)</b> , 85(36), 99(11), 127(13), 145(6), 165(5),<br>183(5), 207(9), 253(4), 281(3)                            |
| 179      | Unknown                                                         | <b>41(100)</b> , 57(84), 67(99), 82(50), 95(21), 123(28), 169(19),<br>207(21), 253(10), 267(10), 281(6)                        |
| 180      | Myristate, isopropyl-                                           | 41(86), <b>60(100)</b> , 73(60), 85(31), 102(89), 129(34), 185(23),<br>211(52), 228(83), 229(55), 253(3), 267(4), 281(3)       |
| 181      | Unknown                                                         | <b>73(100)</b> , 147(35), 207(14), 221(28), 281(19), 325(6),<br>341(18), 355(36), 429(60), 459(6), 475(5), 489(2)              |
| 182      | Unknown                                                         | 41(42), <b>57(100)</b> , 71(77), 85(34), 95(28), 109(5), 137(18),<br>165(11), 183(12), 207(21), 250(8), 267(6), 281(6), 327(5) |
| 183      | Unknown                                                         | 41(28), <b>57(100)</b> , 71(40), 85(21), 105(15), 119(15),<br>135(19), 177(18), 205(34), 220(22), 253(8), 327(5)               |
| 184      | Benzenedicarboxylic acid,<br>Bis(2-methyl)-1,2-                 | 41(10), 57(23), 76(6), 104(7), <b>149(100)</b> , 167(3), 223(9)                                                                |
| 185      | N-methyl-N-[4-[4-methoxy-<br>1-hexahydropyridine]-<br>acetamide | 41(28), <b>57(100)</b> , 71(39), 85(24), 105(15), 123(16),<br>175(15), 207(27), 239(16), 253(10), 267(7), 281(9)               |
| 186      | 1-Hexadecene                                                    | 41(73), <b>55(100)</b> , 69(92), 83(85), 97(61), 111(19),<br>125(17), 151(13), 207(7), 267(2), 327(2)                          |
| 187      | Unknown                                                         | 41(42), <b>57(100)</b> , 69(52), 85(28), 123(37), 175(24),<br>189(14), 207(32), 236(52), 251(12), 281(7), 327(6)               |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                              | m/z (%relative abundance)                                                                                                     |
|----------|--------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 188      | n-Nanodecane                                           | 41(32), 57(100), 71(66), 85(42), 99(12), 113(6),<br>127(6), 141(4), 155(3), 169(3), 183(2), 207(5),<br>268(3), 281(1), 327(1) |
| 189      | Unknown                                                | 41(17), 57(31), 69(20), 91(18), 105(100), 119(13),<br>135(8), 175(9), 189(10), 207(13), 260(9), 281(3)                        |
| 190      | Unknown                                                | 41(23), 58(87), 69(2), 85(8), 104(8), 149(100),<br>175(13), 207(11), 223(8), 269(3), 327(1), 341(1)                           |
| 191      | 7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro[4,5]<br>deca-6,9-diene    | 41(49), 57(100), 69(18), 91(26), 133(14), 175(65),<br>189(35), 205(84), 217(52), 232(23), 261(18),<br>276(6), 327(2), 341(2)  |
| 192      | ? Docosane                                             | 41(28), 57(100), 71(91), 85(64), 99(26), 113(17),<br>127(16), 141(10), 155(11), 175(26), 194(8),<br>207(10), 253(3), 267(3)   |
| 193      | Hexadecanoic acid, methyl ester                        | 41(38), 57(51), 74(100), 87(69), 129(11), 143(19),<br>175(31), 207(15), 227(15), 239(8), 270(14), 327(2)                      |
| 194      | Unknown                                                | 41(28), 57(100), 71(71), 85(44), 95(26), 127(17),<br>155(13), 175(26), 207(34), 253(8), 267(8), 281(9)                        |
| 195      | Unknown                                                | 41(44), 69(55), 57(100), 83(36), 95(21), 125(16),<br>146(21), 185(40), 207(44), 253(10), 327(5)                               |
| 196      | Unknown                                                | 41(38), 57(100), 71(50), 85(30), 95(27), 109(14),<br>133(17), 175(36), 207(44), 243(19), 267(9), 327(11)                      |
| 197      | Unknown                                                | 41(38), 57(100), 71(35), 81(21), 105(18), 119(18),<br>138(18), 175(75), 189(14), 207(37), 220(21), 253(9),<br>281(7), 327(4)  |
| 198      | Benzenedicarboxylic acid,<br>Butyl-2-methylpropyl-1,2- | 41(7), 57(4), 76(4), 104(4), 121(2), 149(100), 205(5),<br>223(6), 278(1)                                                      |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                 | m/z (%relative abundance)                                                                                                             |
|----------|-------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 199      | Hexadecanoic acid                         | 43(80), 60(84), 73(100), 85(26), 97(21), 115(15),<br>129(41), 213(27), 227(7), 256(38), 267(1), 281(1)                                |
| 200      | Unknown                                   | 41(9), 57(13), 73(100), 147(41), 281(30), 355(27),<br>415(11), 429(29), 461(9), 503(28), 549(1)                                       |
| 201      | Pentatriacontane                          | 41(42), 57(100), 71(64), 85(42), 97(13), 129(10),<br>189(2), 207(9), 256(8), 282(3), 327(2), 341(1)                                   |
| 202      | ? Hexadecane, 1-(ethenyloxy)-             | 41(64), 57(100), 71(63), 85(41), 97(29), 129(25),<br>149(14), 207(26), 256(18), 281(8), 327(4), 341(3)                                |
| 203      | 1-Octadecene                              | 43(100), 57(73), 69(47), 83(43), 97(40), 111(21),<br>129(14), 157(6), 193(6), 207(17), 256(10), 327(3),<br>403(1)                     |
| 204      | Hexadecane, 1-(ethenyloxy)-               | 41(57), 57(100), 71(61), 85(37), 97(31), 129(24),<br>189(19), 207(39), 256(19), 267(11), 327(7), 341(4)                               |
| 205      | Hexadecanoic acid, 1-methylethyl<br>ester | 43(100), 60(71), 73(40), 85(23), 102(70), 129(21),<br>213(13), 239(36), 256(78), 257(43), 298(3), 341(1)                              |
| 206      | ? Hexadecane, 1-(ethenyloxy)-             | 41(64), 57(100), 69(59), 83(36), 97(33), 109(19),<br>129(23), 155(19), 193(16), 207(55), 227(16),<br>253(20), 267(17), 327(8), 403(5) |
| 207      | Unknown                                   | 41(34), 57(68), 71(41), 85(24), 97(16), 117(53),<br>145(100), 203(42), 253(11), 267(8), 281(7), 327(5),<br>403(2)                     |
| 208      | 8-Quinolinol                              | 41(49), 57(100), 71(48), 85(31), 97(24), 119(17),<br>135(16), 193(11), 207(44), 253(15), 267(9), 281(11),<br>327(17), 341(5)          |
| 209      | Unknown                                   | 43(100), 55(87), 83(44), 109(28), 123(25), 171(19),<br>207(49), 254(30), 267(12), 281(12), 327(8), 341(6)                             |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure    | m/z (%relative abundance)                                                                                                                     |
|----------|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 210      | Unknown      | 41(52), 57(100), 71(10), 85(37), 97(33), 109(21), 135(19),<br>193(17), 207(54), 253(22), 267(15), 281(12), 327(10),<br>341(6), 403(5)         |
| 211      | Anthracene   | 41(51), 57(100), 71(75), 85(41), 97(26), 133(16), 207(40),<br>253(17), 267(12), 281(12), 327(7), 341(5), 403(3)                               |
| 212      | Unknown      | 41(68), 57(97), 83(100), 119(28), 147(16), 193(20), 207(73),<br>253(22), 267(19), 281(18), 327(13), 341(10), 403(6)                           |
| 213      | ? n-Eicosane | 41(42), 57(100), 71(50), 85(32), 97(17), 109(14), 133(13),<br>189(12), 207(36), 253(11), 267(19), 281(10), 327(6),<br>341(4), 403(3)          |
| 214      | Unknown      | 41(44), 57(100), 71(40), 85(24), 97(23), 109(10), 127(14),<br>145(58), 189(16), 207(32), 253(11), 267(8), 327(5), 403(3)                      |
| 215      | Unknown      | 41(47), 57(100), 71(52), 85(35), 97(26), 119(13), 133(13),<br>207(35), 226(5), 239(4), 253(11), 267(10), 281(9), 327(5),<br>341(4)            |
| 216      | Unknown      | 41(54), 57(93), 69(67), 83(41), 97(34), 135(23), 165(98),<br>194(47), 207(79), 222(100), 253(20), 267(15), 281(19),<br>327(8), 341(8), 403(4) |
| 217      | Hahnfett     | 41(76), 57(100), 69(68), 81(58), 95(55), 109(36), 135(26),<br>207(77), 253(21), 281(22), 327(1), 341(7), 403(6)                               |
| 218      | Eicosane     | 41(34), 57(100), 71(64), 85(45), 97(16), 113(8), 127(7), 191<br>(12), 207(12), 217(1), 253(3), 296(3), 329(1), 403(1)                         |
| 219      | Unknown      | 41(59), 57(100), 71(68), 83(44), 95(36), 109(23), 133(19),<br>193(17), 207(64), 253(18), 281(16), 327(7), 403(4)                              |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                            | m/z (%relative abundance)                                                                                                          |
|----------|----------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 220      | ? Cyclohexane, 2-<br>[(dimethylamino)methyl]-1-(3-<br>hydroxyphenyl) | 41(8), 58(100), 69(6), 83(3), 109(2), 133(2), 161(1),<br>207(5), 267(1), 297(2)                                                    |
| 221      | Unknown                                                              | 41(40), 57(77), 73(68), 95(31), 109(7), 135(100),<br>193(22), 207(68), 253(17), 281(19), 327(11),<br>355(12), 417(24), 419(5)      |
| 222      | ? Octadecanoic acid,<br>methyl ester                                 | 41(72), 57(100), 74(81), 87(58), 97(58), 129(22),<br>193(15), 207(61), 253(18), 281(15), 298(15),<br>327(6), 341(4)                |
| 223      | 1,1' : 3',1''-terphenyl                                              | 41(3), 57(7), 71(6), 85(4), 115(8), 152(5), 202(6),<br>215(5), 230(100), 253(1)                                                    |
| 224      | ? Cyclododecasiloxane,<br>tetracosamethyl                            | 41(22), 55(26), 73(100), 95(19), 147(47), 221(41),<br>281(42), 341(12), 355(88), 429(19), 503(11), 535(8)                          |
| 225      | 9,12-Octadecadienoic acid                                            | 41(67), 55(82), 67(100), 81(83), 95(56), 109(26),<br>123(13), 137(7), 150(5), 207(4), 264(4), 280(17)                              |
| 226      | 9-Octadecenoic acid                                                  | 41(72), 55(100), 69(69), 83(52), 97(41), 110(19),<br>123(12), 137(8), 156(6), 207(4), 222(4), 264(14),<br>280(6)                   |
| 227      | 2-Ethylhexyl-3-(4-<br>methoxyphenyl)-2-propenoic acid                | 41(27), 55(32), 69(22), 83(15), 97(12), 133(14),<br>161(48), 178(100), 207(5), 264(3), 290(10)                                     |
| 228      | Unknown                                                              | 41(67), 55(100), 69(66), 83(65), 97(42), 109(16),<br>125(11), 137(9), 207(22), 253(7), 264(8), 281(9),<br>327(3), 341(2)           |
| 229      | 1-Nonadecene                                                         | 41(78), 55(100), 69(73), 83(54), 97(44), 109(17),<br>123(13), 145(49), 207(26), 253(10), 264(9), 281(6),<br>327(2), 341(3), 403(2) |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                     | m/z (%relative abundance)                                                                                                            |
|----------|-------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 230      | Unknown                       | 41(61), 57(100), 71(75), 85(55), 97(34), 113(17),<br>127(18), 169(9), 207(23), 253(7), 264(7), 281(5),<br>327(3), 355(1), 403(1)     |
| 231      | ? Hexadecanamide              | 41(46), 59(100), 72(42), 83(26), 97(22), 109(9), 128(8),<br>207(15), 235(6), 267(5), 281(4), 327(3), 341(2), 403(2)                  |
| 232      | Cycloeicosane                 | 41(39), 55(48), 69(38), 83(29), 105(66), 123(100),<br>168(7), 207(14), 253(5), 267(4), 327(3), 355(1), 403(1)                        |
| 233      | Eicosane                      | 41(43), 57(100), 71(66), 85(46), 97(20), 113(9), 155(4),<br>193(5), 207(16), 253(7), 310(3), 355(1), 403(1)                          |
| 234      | 1-Octadecene                  | 41(75), 57(100), 69(82), 83(72), 97(59), 111(19),<br>125(18), 149(9), 193(12), 207(43), 253(16), 267(11),<br>281(11), 327(8), 403(4) |
| 235      | Unknown                       | 43(54), 55(51), 73(100), 86(22), 97(29), 111(13),<br>123(9), 135(7), 193(6), 207(20), 253(8), 327(4),<br>403(2), 415(1)              |
| 236      | ? Octadecane                  | 41(47), 57(100), 71(63), 85(40), 97(28), 109(14),<br>135(14), 193(11), 207(43), 253(17), 267(12),<br>281(10), 327(7)                 |
| 237      | Unknown                       | 41(28), 57(37), 69(26), 87(100), 100(18), 119(7),<br>193(6), 207(24), 253(9), 267(7), 281(6), 327(4), 403(2)                         |
| 238      | ? Hexadecane, 1-(ethenyloxy)- | 41(60), 57(100), 71(72), 85(37), 97(39), 119(21),<br>149(45), 207(60), 253(25), 267(16), 281(19), 327(13),<br>341(8), 403(5), 415(3) |
| 239      | Unknown                       | 41(55), 57(100), 69(55), 83(38), 101(39), 135(19),<br>193(17), 207(56), 253(21), 267(16), 281(16), 327(11),<br>341(8), 403(5)        |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                  | m/z (%relative abundance)                                                                                                                                       |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 240      | Unknown                                                    | 41(47), 57(100), 71(51), 85(35), 97(29), 119(14),<br>193(13), 207(45), 253(19), 267(13), 281(11), 295(11),<br>327(9), 403(4), 415(2)                            |
| 241      | Unknown                                                    | 41(61), 57(100), 69(62), 83(79), 97(37), 119(20),<br>145(49), 207(65), 253(21), 267(19), 281(14), 327(11),<br>341(8), 403(7)                                    |
| 242      | Unknown                                                    | 41(64), 57(100), 69(75), 83(51), 97(43), 109(27),<br>135(24), 177(14), 191(34), 207(82), 253(29), 267(21),<br>281(18), 327(14), 403(6), 415(3)                  |
| 243      | 3-o-[4-trifluoromethylphenyl]-<br>morphine                 | 73(100), 147(50), 205(3), 221(47), 281(38), 355(70),<br>401(9), 429(72), 503(6), 535(4)                                                                         |
| 244      | Tricosane                                                  | 41(34), 57(80), 71(60), 85(32), 105(61), 123(100)<br>207(14), 253(6), 281(4), 327(3), 355(1), 403(1), 415(1)                                                    |
| 245      | 2-ethylhexyl-3-(4-<br>methyloxyphenyl)-2-propenoic<br>acid | 41(11), 57(12), 69(7), 83(5), 97(3), 118(5), 133(13),<br>161(47), 178(100), 207(6), 290(2), 327(1)                                                              |
| 246      | 1,2,3,4,4a,9,10,10a-1-<br>phenanthrene carboxylic acid     | 41(59), 57(100), 69(69), 83(57), 97(54), 109(22),<br>135(23), 193(21), 207(82), 239(91), 253(28), 267(20),<br>281(20), 299(16), 327(17), 355(3), 403(8), 415(3) |
| 247      | ? Octadecane                                               | 41(38), 57(100), 71(60), 85(43), 97(28), 133(13),<br>155(8), 193(10), 207(42), 253(13), 267(11), 281(10)<br>327(7), 403(4), 415(1)                              |
| 248      | 1,2-benzenedicarboxylic acid,<br>butyl phenyl methyl ester | 41((26), 57(49), 71(31), 91(73), 105(17), 123(15),<br>135(15), 149(100), 207(35), 253(12), 267(8), 281(8),<br>327(5), 341(4), 403(2), 415(1)                    |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                    | m/z (%relative abundance)                                                                                                                                    |
|----------|------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 249      | Unknown                      | 41(65), <b>57(100)</b> , 69(65), 81(55), 97(44), 109(24), 135(22),<br>193(15), 207(62), 253(20), 267(15), 281(19), 327(9),<br>341(7), 355(3), 403(5), 415(2) |
| 250      | ? (Z)-9-Octadeceneamide      | 41(71), <b>57(100)</b> , 71(71), 83(42), 97(37), 109(19), 125(19),<br>193(14), 207(55), 253(17), 267(12), 281(17), 327(8),<br>341(6), 403(4)                 |
| 251      | Unknown                      | 41(43), <b>57(100)</b> , 71(57), 83(38), 97(32), 135(13), 123(10),<br>207(45), 253(14), 267(10), 281(11), 309(10), 327(7),<br>389(2), 403(3), 415(1)         |
| 252      | Unknown                      | 41(50), <b>57(100)</b> , 69(63), 83(83), 97(39), 119(24), 135(19),<br>193(13), 207(65), 253(18), 281(16), 327(9), 341(8),<br>389(2), 403(5), 415(2)          |
| 253      | Unknown                      | 41(73), <b>57(100)</b> , 73(90), 95(45), 109(26), 135(23), 193(16),<br>207(73), 253(24), 281(17), 293(12), 327(11), 341(19),<br>403(5), 415(2)               |
| 254      | Unknown                      | 43(92), <b>57(100)</b> , 73(97), 86(61), 97(32), 111(24), 207(47),<br>253(15), 281(13), 295(10), 327(7), 341(6), 403(3), 415(2)                              |
| 255      | Tetracosane                  | 41(33), <b>57(100)</b> , 71(65), 85(43), 97(17), 129(15), 207(22),<br>253(7), 267(5), 281(5), 327(3), 355(2), 403(1)                                         |
| 256      | ? Hexadecane 1-(ethenyloxy)- | 41(37), <b>57(65)</b> , 69(44), 83(29), 105(62), <b>123(100)</b> , 207(35),<br>253(11), 281(8), 327(6), 355(2), 403(3), 415(1)                               |
| 257      | Unknown                      | 41(53), <b>57(100)</b> , 71(56), 83(41), 97(52), 125(16), 193(12),<br>207(56), 221(21), 253(16), 281(14), 327(8), 341(6),<br>403(4), 459(3)                  |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                              | m/z (% relative abundance)                                                                                                                      |
|----------|----------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 258      | N,N-Dimethyl-9-octadecenamide          | 41(64), 55(83), 69(63), 87(100), 100(63), 119(21), 135(20), 191(16), 207(75), 253(21), 267(16), 281(18), 309(18)                                |
| 259      | 3-o-(4-trifluoromethylphenyl)-morphine | 57(5), 73(100), 147(56), 205(4), 221(52), 281(46), 355(57), 429(55), 503(25)                                                                    |
| 260      | Unknown                                | 41(35), 57(100), 71(48), 85(32), 97(27), 109(16), 133(14), 207(53), 253(15), 267(10), 281(14), 327(8), 341(6), 403(3), 415(2)                   |
| 261      | Hexadecane, 1-(ethenyloxy)-            | 43(100), 57(96), 71(64), 85(54), 91(13), 111(27), 125(16), 207(56), 253(16), 281(13), 327(7), 341(6), 403(4), 415(1)                            |
| 262      | 14-beta-H-pregna                       | 43(96), 57(100), 71(73), 87(53), 111(27), 193(12), 207(62), 213(18), 281(13), 309(8), 327(8), 341(7), 355(4), 403(4), 415(2)                    |
| 263      | Unknown                                | 43(84), 57(100), 69(64), 83(44), 97(47), 130(39), 193(14), 207(65), 253(18), 315(9), 371(9), 403(1), 415(2)                                     |
| 264      | Eicosane                               | 43(72), 57(100), 71(68), 85(45), 97(22), 111(14), 207(24), 253(7), 281(6), 327(3), 372(1), 403(2)                                               |
| 265      | Unknown                                | 43(84), 57(100), 71(66), 83(47), 97(35), 112(30), 133(14), 149(91), 167(32), 207(49), 239(13), 253(13), 281(11), 330(6), 371(7), 403(3), 415(2) |
| 266      | Unknown                                | 43(78), 58(100), 71(50), 83(40), 105(60), 123(93), 207(40), 253(10), 281(9), 330(7), 403(2), 415(1)                                             |
| 267      | Unknown                                | 43(84), 55(81), 69(100), 83(51), 97(50), 111(33), 123(22), 149(17), 191(21), 207(64)                                                            |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                    | m/z (%relative abundance)                                                                                                         |
|----------|------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 268      | Unknown                      | 43(54), 57(100), 71(67), 85(47), 99(16), 113(10),<br>159(8), 182(7), 196(7), 210(5), 224(5), 337(4),<br>287(3), 390(1), 429(1)    |
| 269      | Phthalate, di-(2-ethylhexyl) | 43(15), 57(27), 71(19), 83(16), 113(9), 149(100),<br>167(34), 279(14)                                                             |
| 270      | Unknown                      | 43(69), 57(100), 71(79), 85(37), 113(11), 133(19),<br>207(32), 267(7), 281(7), 323(12), 344(9), 372(6),<br>403(4)                 |
| 271      | Unknown                      | 43(61), 57(100), 71(72), 85(56), 99(27), 119(25),<br>207(54), 267(10), 327(7), 353(8), 370(7), 403(6)                             |
| 272      | Unknown                      | 43(48), 57(100), 71(70), 85(55), 99(27), 117(10),<br>193(12), 207(45), 253(26), 295(17), 328(14), 403(6)                          |
| 273      | Unknown                      | 43(47), 57(100), 71(63), 85(39), 99(17), 113(67),<br>133(14), 169(9), 207(18), 267(10), 337(23), 403(4)                           |
| 274      | Unknown                      | 73(100), 147(63), 205(4), 221(63), 281(53), 355(87),<br>401(10), 429(49), 503(22), 535(3)                                         |
| 275      | Unknown                      | 43(53), 57(100), 71(69), 85(50), 105(19), 117(37),<br>130(19), 175(12), 207(32), 267(11), 353(13), 368(10),<br>390(9), 429(5)     |
| 276      | Hexacosane                   | 43(63), 57(100), 71(69), 85(48), 99(17), 119(13),<br>169(4), 207(10), 267(4), 313(2), 344(6), 366(3),<br>429(1)                   |
| 277      | Unknown                      | 43(41), 57(100), 71(51), 85(48), 99(23), 113(11),<br>133(13), 155(7), 207(24), 253(8), 267(7), 304(3),<br>351(10), 386(4), 429(3) |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                 | m/z (%relative abundance)                                                                                                                                 |
|----------|---------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 278      | Unknown                   | 43(22), 57(40), 71(22), 85(17), 105(100), 119(19), 133(18), 147(12), 165(8), 207(50), 253(10), 267(10), 281(9), 344(31), 358(10), 386(7), 416(5), 429(4)  |
| 279      | Unknown                   | 43(68), 57(73), 71(51), 83(29), 97(21), 119(15), 133(52), 147(25), 207(53), 221(19), 267(16), 281(7), 334(9), 364(11), 387(100), 403(6), 445(13), 460(10) |
| 280      | Unknown                   | 43(36), 57(86), 71(51), 85(36), 99(24), 119(16), 133(29), 188(38), 207(100), 226(24), 253(14), 354(12), 387(43), 417(7)                                   |
| 281      | Pentacosane               | 43(54), 57(100), 71(66), 85(49), 99(20), 113(13), 169(6), 207(15), 238(4), 267(3), 281(4), 372(8), 340(2)                                                 |
| 282      | ?9-Hexacosene             | 43(48), 57(100), 71(83), 85(38), 99(16), 112(21), 141(9), 207(38), 253(8), 267(10), 281(7), 334(5), 357(5), 372(7), 429(3)                                |
| 283      | Unknown                   | 43(53), 57(100), 71(67), 85(28), 112(20), 141(16), 207(42), 253(10), 281(10), 312(3), 334(4), 354(5), 403(4), 429(3)                                      |
| 284      | Unknown                   | 43(55), 57(63), 71(35), 85(49), 101(22), 117(18), 131(100), 147(16), 175(9), 207(77), 253(10), 267(12), 281(13), 323(9), 358(12), 410(12), 429(6)         |
| 285      | Tetraacetyl<br>adrenaline | 43(59), 57(100), 71(76), 85(47), 99(20), 113(15), 131(45), 169(7), 207(26), 299(7), 331(4), 354(3), 397(3), 412(3)                                        |
| 286      | Unknown                   | 43(55), 57(97), 71(54), 85(39), 105(27), 120(45), 131(79), 147(27), 189(19), 207(100), 253(31), 314(52), 372(33), 429(7)                                  |
| 287      | Unknown                   | 43(65), 57(100), 71(53), 85(41), 99(17), 117(33), 131(60), 147(16), 207(69), 267(15), 358(24), 372(11), 397(57), 412(12), 429(4), 477(5)                  |
| 288      | Unknown                   | 43(69), 57(77), 71(39), 83(69), 105(37), 117(39), 131(66), 207(100), 281(26), 327(11), 358(26), 372(23), 397(34), 429(5)                                  |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                                   | m/z (%relative abundance)                                                                                                                   |
|----------|-------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 289      | Unknown                                                     | 43(50), 57(78), 71(42), 85(35), 101(19), 117(32), 131(66),<br>157(21), 207(100), 253(22), 281(19), 357(17), 372(30), 397(20)                |
| 290      | Unknown                                                     | 43(61), 57(100), 71(68), 85(49), 99(17), 113(10), 131(14),<br>207(21), 267(5), 357(4), 372(5), 397(4), 429(1)                               |
| 291      | Unknown                                                     | 43(57), 57(100), 71(65), 85(33), 99(15), 112(33), 131(45),<br>207(67), 267(16), 358(15), 372(11), 397(9), 429(3), 477(2)                    |
| 292      | 2-(diethyl)-3-(4-N,N-dimethylaminophenyl)<br>propenoic acid | 73(100), 147(67), 205(4), 221(70), 281(55), 296(7), 355(92),<br>429(75), 503(19), 535(3)                                                    |
| 293      | Hexacosane                                                  | 43(55), 57(100), 71(64), 85(49), 99(17), 131(20), 207(35),<br>253(9), 281(9), 372(7), 429(3), 477(2)                                        |
| 294      | Unknown                                                     | 43(35), 57(43), 73(43), 97(5), 117(49), 131(65), 147(24),<br>193(19), 207(100), 253(18), 281(19), 301(18), 372(15), 477(7)                  |
| 295      | Unknown                                                     | 43(12), 57(10), 70(100), 85(4), 99(2), 114(3), 131(3), 147(2),<br>207(8), 253(2), 308(12), 372(1)                                           |
| 296      | Unknown                                                     | 43(43), 57(67), 71(40), 85(29), 99(14), 117(22), 131(30),<br>147(14), 207(100), 281(19), 341(7), 365(9), 386(12), 401(4),<br>429(5), 477(3) |
| 297      | Unknown                                                     | 43(74), 57(83), 71(51), 85(44), 97(46), 131(26), 207(100),<br>253(15), 281(20), 327(9), 372(6), 403(4), 477(3)                              |
| 298      | Unknown                                                     | 43(35), 57(40), 83(33), 105(19), 123(39), 149(20), 175(19),<br>207(100), 253(17), 281(18), 372(7), 386(16), 400(24), 429(5),<br>486(5)      |
| 299      | Octacosane                                                  | 43(58), 57(100), 71(68), 85(49), 99(17), 113(10), 133(8),<br>207(42), 253(7), 281(9), 355(3), 386(5), 400(5), 429(2), 477(1)                |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                                               | m/z (%relative abundance)                                                                                                |
|----------|---------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 300      | 2, 6, 10, 14, 18, 22-Tetracosahexaene                   | 41(24), 55(6), 69(100), 81(56), 95(14), 121(11), 137(13), 207(6), 341(3), 410(2)                                         |
| 301      | Unknown                                                 | 43(53), 57(100), 71(48), 85(51), 99(19), 113(13), 135(9), 207(65), 253(12), 281(12), 365(8), 400(7), 429(3), 477(2)      |
| 302      | Unknown                                                 | 57(34), 71(15), 95(11), 117(21), 135(21), 191(25), 207(100), 253(16), 281(17), 355(10), 370(18), 400(14), 414(7), 429(4) |
| 303      | 2-(diethyl)-3-(4-N,N-dimethylaminophenyl)propenoic acid | 73(100), 147(71), 207(29), 221(73), 281(55), 295(23), 341(20), 355(79), 429(67), 503(24), 549(1)                         |
| 304      | Nonacosane                                              | 43(54), 57(100), 71(73), 85(49), 99(16), 110(10), 207(33), 253(6), 286(7), 373(2), 408(4), 429(2)                        |
| 305      | Unknown                                                 | 42(4), 57(67), 71(51), 85(34), 99(10), 113(8), 133(7), 207(100), 253(16), 281(18), 322(46), 393(11), 414(8), 429(5)      |
| 306      | 1,2-ethanediamine, N,N'-bis[1-methyl-3-(2-thienyl)-     | 70(100), 114(10), 207(19), 281(3), 332(14), 375(3), 400(2), 429(1), 477(1)                                               |
| 307      | Unknown                                                 | 70(100), 114(7), 133(1), 207(14), 253(2), 281(3), 334(12), 377(2), 400(1), 414(1), 429(1)                                |
| 308      | Unknown                                                 | 73(100), 147(74), 207(36), 221(77), 281(59), 295(25), 341(21), 355(82), 429(60), 503(24), 549(1)                         |
| 309      | Unknown                                                 | 43(25), 57(35), 69(31), 81(25), 95(23), 135(15), 191(35), 207(100), 253(19), 281(17), 331(17), 412(8), 463(1)            |
| 310      | Unknown                                                 | 43(11), 57(100), 71(67), 85(49), 99(17), 113(9), 207(88), 253(9), 281(14), 365(5), 392(4), 414(15), 436(6)               |

ตารางที่ 3.14 (ต่อ)

| Peak no. | Structure                               | m/z (%relative abundance)                                                                            |
|----------|-----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 311      | Cyclododecasiloxane,<br>tetracosamethyl | 73(100), 147(76), 207(36), 221(80), 281(58), 295<br>(26), 341(21), 355(81), 429(62), 503(21), 549(1) |

ตารางที่ 3.15 สรุปองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation

| Compounds                                                     | Peak no. |
|---------------------------------------------------------------|----------|
| <i>Hydrocarbons</i>                                           |          |
| Ethane, 1,1,1,-trichloro                                      | 2        |
| Decane 2,4,6-trimethyl-                                       | 52       |
| Dodecane                                                      | 77       |
| Tetracosane                                                   | 94       |
| Tridecane                                                     | 97       |
| 1,3-Diformyl-2-chloro-5,5-dimethylcyclohexa-1,3-diene         | 113      |
| 2,5-Cyclohexadiene, 2,6-bis(1,1-dimethylene)-2,6-di(t-butyl)- | 123      |
| 2,5-Cyclohexadiene, 4-hydroxy-4-methyl-                       | 124      |
| 1-Decene                                                      | 125      |
| Docosane                                                      | 128      |
| Pentadecane                                                   | 129      |
| Eicosane                                                      | 136      |
| Hexadecane                                                    | 149      |
| 1-Dodecene                                                    | 159      |
| Heptadecene                                                   | 160      |
| Tetracosane, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-                      | 161      |
| Heptacosane                                                   | 162      |
| Octadecane                                                    | 176      |
| Nonadecane                                                    | 178      |
| 1-Hexadecene                                                  | 186      |
| n-Nonadecane                                                  | 188      |
| Pentatriacontane                                              | 201      |

## ตารางที่ 3.15 (ต่อ)

| Compounds                                                 | Peak no. |
|-----------------------------------------------------------|----------|
| <i>Hydrocarbons (ต่อ)</i>                                 |          |
| 1-Octadecene                                              | 203      |
| 1-Nonadecene                                              | 229      |
| Cycloeicosane                                             | 232      |
| 1-Octadecene                                              | 234      |
| Tricosane                                                 | 244      |
| Tetracosane                                               | 255      |
| Hexacosane                                                | 276      |
| Pentacosane                                               | 281      |
| Octacosane                                                | 299      |
| Nonacosane                                                | 304      |
| <i>Acids and Ester</i>                                    |          |
| 3-Pyridine carboxylic acid, methyl ester                  | 67       |
| 1,2-Benzenedicarboxylic acid, diethyl ester               | 122      |
| 1,2-benzenedicarboxylic acid, bis(2-methyl)-              | 184      |
| Hexanoic acid, methyl ester                               | 193      |
| 1,2-benzenedicarboxylic acid, butyl-2-methylpropyl-       | 198      |
| Hexadecanoic acid                                         | 199      |
| Hexanoic acid 1, methylethyl ester                        | 205      |
| 9,12-Octadecadienoic acid                                 | 225      |
| 9-Octadecenoic acid                                       | 226      |
| 2-Propenoic acid, 2-ethylhexyl-3-(4-methoxyphenyl)-       | 227      |
| 1, 2, 3, 4, 4a, 9, 10, 10a-1-Phenanthrene carboxylic acid | 246      |
| 1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl phenyl methyl ester   | 248      |
| Propenoic acid, 2-diethyl-3-(4-N,N-dimethylaminophenyl)   | 203      |

ตารางที่ 3.15 (ต่อ)

| Compounds                                                | Peak no. |
|----------------------------------------------------------|----------|
| <i>Aromatics</i>                                         |          |
| Benzene                                                  | 4        |
| Benzene, methyl                                          | 8        |
| Benzene, ethyl-                                          | 18       |
| Benzene, 1,4-dimethyl-                                   | 19       |
| Benzene, 1,3-dimethyl-                                   | 22       |
| Anthracene                                               | 211      |
| <i>Alcohols and Ethers</i>                               |          |
| Ethanol, 2-butoxy-                                       | 23       |
| Hexanol, 2-ethyl-                                        | 48       |
| Ethanone, 1-[1H-2-pyrrol-2-yl]                           | 53       |
| Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-                | 71       |
| Ethanol, 2-phenoxy-                                      | 83       |
| Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl-4-methyl)-             | 131      |
| Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl-4-methyl)-             | 132      |
| <i>Nitrogen-containing</i>                               |          |
| Ethanamide, N,N-dimethyl                                 | 5a       |
| 1-Pyrroline, 2-acetyl-                                   | 27       |
| 2-Pyrrolidinone                                          | 55a/56   |
| Pyridine, 2-methyl-                                      | 80       |
| Pyrrole, 1-(2-aminophenyl)-                              | 166      |
| Acetamide, N-methyl-N-[4-(4-methoxy-1-hexahydropyridine] | 185      |
| 9-Octadecenamide, N,N-dimethyl-                          | 258      |
| Tetraacetylrenaline                                      | 285      |
| 1,2-Ethanediamine, N,N'-bis[1-methyl-3-(2-thienyl)-      | 306      |

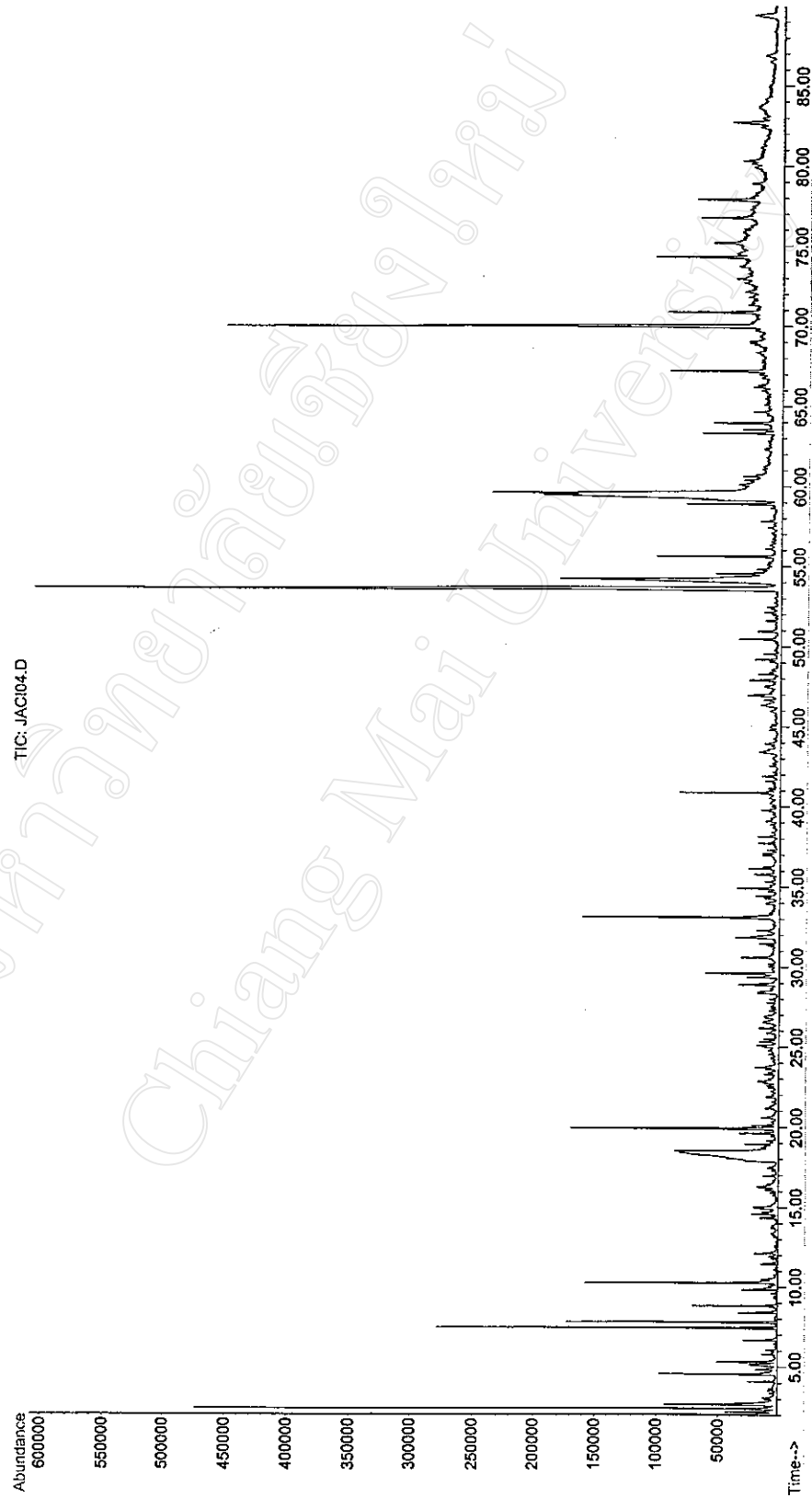
ตารางที่ 3.15 (ต่อ)

| Compounds                                | Peak no. |
|------------------------------------------|----------|
| <i>Aldehydes and Ketones</i>             |          |
| 3-methyl-3-buten-2-one                   | 4a       |
| Aldehyde, nonyl-                         | 63       |
| Methanone, diphenyl-                     | 151      |
| 8-Quinolinol                             | 208      |
| <i>Miscellaneous</i>                     |          |
| Cyclotrisiloxane, hexamethyl             | 16       |
| Furanone, dihydro-2(3H)-                 | 24       |
| Sulfone, dimethyl-                       | 28       |
| Phthalate, diethyl-                      | 147      |
| Alpha cadinol                            | 153      |
| (-)-loliolide                            | 169      |
| Myristate, isopropyl                     | 180      |
| Morphine, 3-o-[4-trifluoromethylphenyl]- | 243      |
| Phthalate, di-(2-ethylhexyl)-            | 269      |
| 14-beta-H-prena                          | 213      |
| Cyclododecasiloxane, tetracosamethyl-    | 311      |

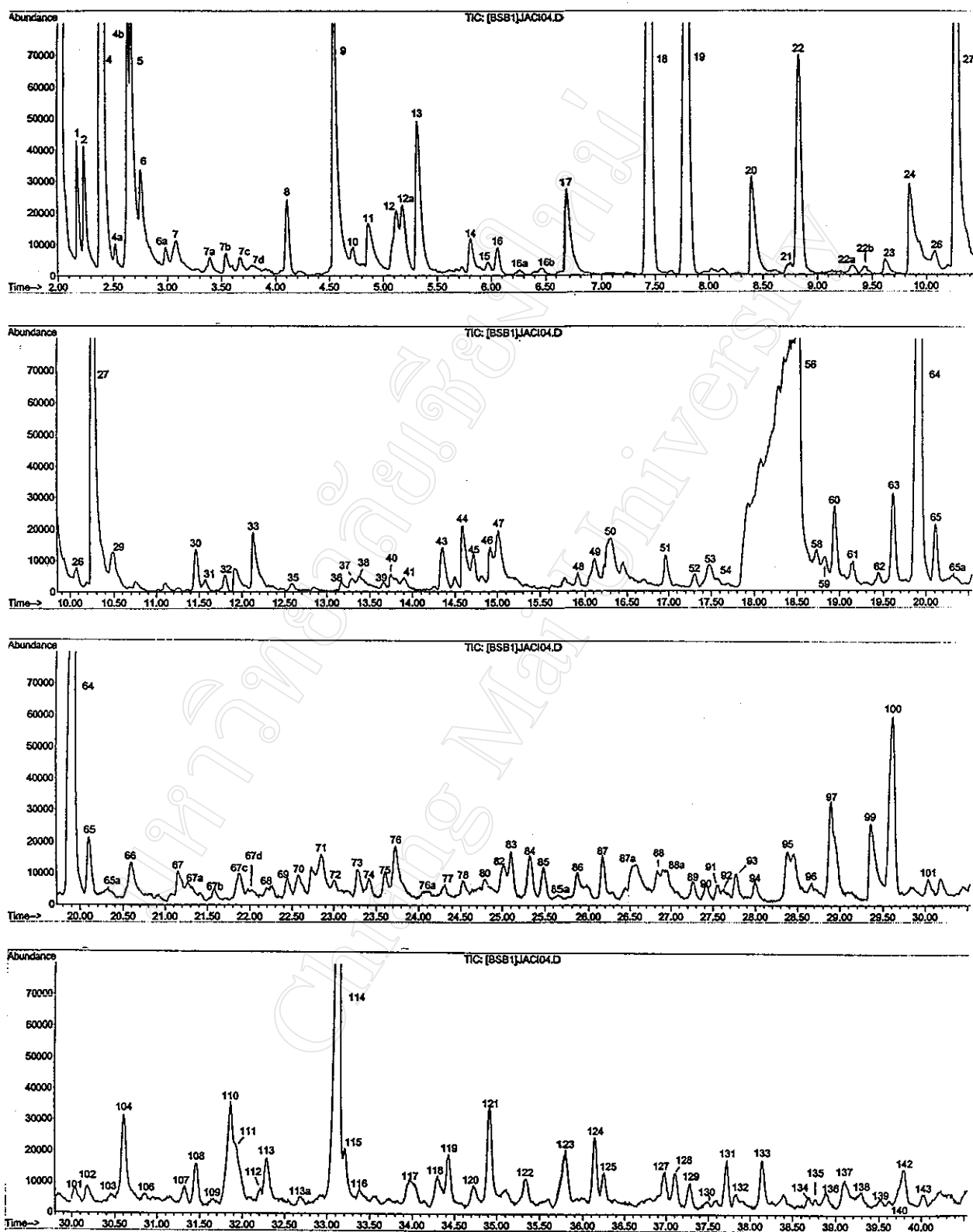
จากผลการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวนี้ พบองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร มีมากกว่า 300 องค์ประกอบ และพบว่าองค์ประกอบในสารสกัดที่สามารถแปลงโครงสร้างทางเคมีได้ ส่วนใหญ่จะเป็นสารประเภท aliphatic hydrocarbon และยังพบสารประเภท carboxylic acids, esters, aromatic compounds, alcohols, ethers, nitrogen-containing compounds, aldehydes และ ketones รวมอยู่ด้วย ส่วนองค์ประกอบที่ไม่สามารถบอกประเภทหรือโครงสร้างทางเคมีได้ (unknown) นั้นส่วนใหญ่จะให้แมสสเปกตรัมใกล้เคียงกันกับสารประเภท hydrocarbon นอกจากนี้ยังพบสารที่มีมวลโมเลกุลเท่ากับ 111 amu (peak no. 33) ซึ่งเท่ากับมวลโมเลกุลของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline (peak no. 27)

**3.11.2 การสกัดสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline จากเมล็ดข้าวด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร และวิเคราะห์องค์ประกอบด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนแบบ chemical ionisation**

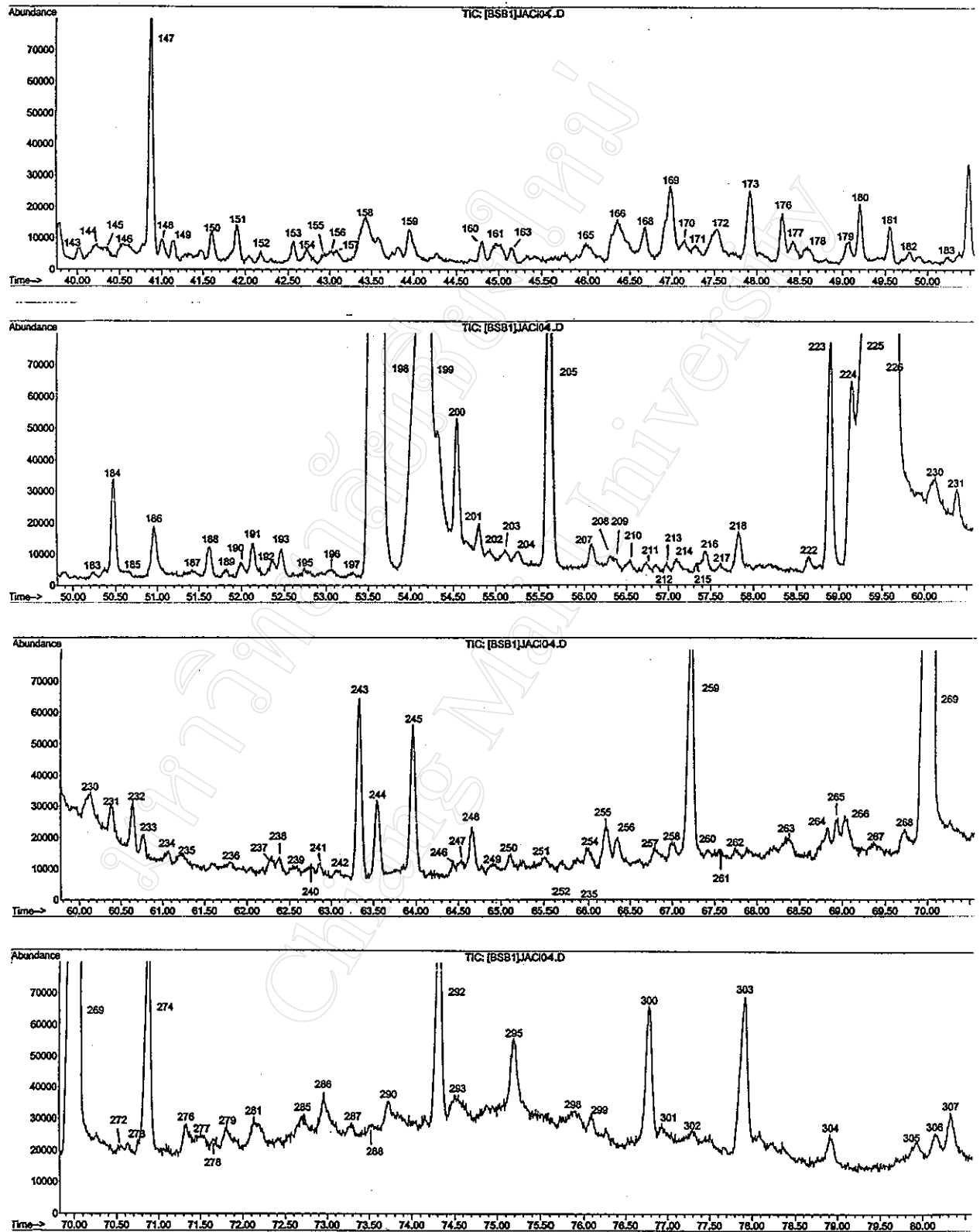
เมื่อนำสารสกัดเข้มข้นปริมาตรประมาณ 0.2 มิลลิลิตรที่สกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ขาวดอกมะลิ 105 (ก.พ.ส.) ด้วยวิธีการสกัดในข้อ 2.13.2 มาทำการวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ chemical ionisation โดยมีสภาวะที่ใช้ในการทดลองดังการทดลองที่ 2.13.2 เพื่อศึกษามวลโมเลกุลของสารที่เป็นองค์ประกอบในสารสกัด ได้ผลการแยกองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว ดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.27-3.28 และตารางที่ 3.16 แสดงข้อมูลเกี่ยวกับแมสสเปกตรัมและโครงสร้างทางเคมีขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว



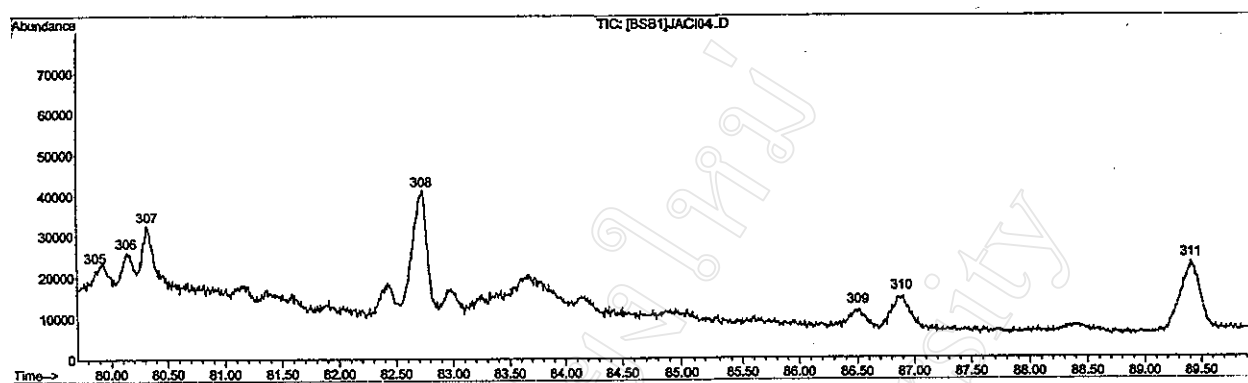
รูปที่ 3.27 โคโรนาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค GC-MS



รูปที่ 3.28 ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิค GC-MS



รูปที่ 3.28 (ต่อ) ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิค GC-MS



รูปที่ 3.28 (ต่อ) ภาพขยายของโครมาโทแกรมของสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิค GC-MS

ตารางที่ 3.16 ข้อมูลแมสสเปกตรัมขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าว วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ chemical ionisation

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                          |
|----------|---------------------------------------------------------------------|
| 1        | 61(12), 67(1), 69(2), 71(100), 72(6), 73(8), 87(4)                  |
| 2        | 61(9), 71(4), 97(100), 99(63), 101(10)                              |
| 3        | -                                                                   |
| 4        | 71(1), 79(100), 91(5), 107(6), 119(2)                               |
| 4a       | 61(2), 75(32), 85(100), 86(6)                                       |
| 4b       | 61(3), 69(100), 71(7), 87(11), 93(17)                               |
| 5        | 61(10), 70(50), 86(46), 100(82), 102(100), 130(17)                  |
| 6        | 61(7), 69(100), 77(14), 86(4), 98(8), 102(8), 110(2), 130(1)        |
| 6a       | 61(30), 70(82), 71(97), 73(25), 89(100), 98(23), 101(7), 110(8)     |
| 7        | 61(20), 70(34), 77(25), 97(100), 125(19), 137(7)                    |
| 7a       | 61(19), 70(33), 85(100), 98(8), 103(8)                              |
| 7b       | 61(13), 70(21), 85(100), 101(30)                                    |
| 7c       | 61(21), 71(75), 83(100), 101(58)                                    |
| 7d       | 61(32), 70(52), 80(100), 99(41), 108(25)                            |
| 8        | 61(2), 70(1), 93(100), 105(3), 121(9), 133(3)                       |
| 9        | 73(30), 101(100), 129(9), 141(2)                                    |
| 10       | 63(27), 73(30), 85(15), 91(98), 101(98), 119(100), 129(10), 159(14) |
| 11       | 61(2), 73(100), 89(2), 101(9), 113(1), 123(1)                       |
| 12       | 71(17), 83(100), 99(52), 101(21), 113(5), 129(3)                    |
| 12a      | 69(16), 83(23), 87(100), 105(68), 107(24)                           |
| 13       | 69(18), 87(100), 105(30), 107(10)                                   |
| 14       | 69(10), 87(17), 105(100), 107(36)                                   |
| 15       | 69(60), 83(28), 101(31), 111(100), 125(63)                          |
| 16       | 61(7), 70(4), 83(1), 101(7), 207(100), 223(47), 251(8)              |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                          |
|----------|---------------------------------------------------------------------|
| 16a      | 60(35), 71(76), 83(40), 101(38), <b>111(100)</b> , 125(65)          |
| 16b      | 69(41), 83(88), 99(27), <b>111(100)</b> , 125(33)                   |
| 17       | 61(6), 83(2), <b>99(100)</b> , 117(2), 127(2)                       |
| 18       | 79(36), 91(8), <b>107(100)</b> , 135(15), 147(6)                    |
| 19       | 91(2), 105(14), <b>107(100)</b> , 135(12), 147(4)                   |
| 20       | 69(16), <b>97(100)</b> , 115(28), 125(5), 137(2)                    |
| 21       | 85(10), 91(18), <b>105(100)</b> , 113(30), 133(12)                  |
| 22       | 91(2), <b>107(100)</b> , 118(5), 135(11), 147(5)                    |
| 22a      | 71(60), 83(30), 99(24), 107(26), <b>125(100)</b> , 149(99)          |
| 22b      | 71(24), 83(7), <b>97(100)</b> , 111(21), 113(52), 115(14)           |
| 23       | <b>63(100)</b> , 73(16), 83(2), 91(10), 101(10), 119(12)            |
| 24       | 69(1), <b>87(100)</b> , 99(1), 111(1), 127(25)                      |
| 25       | 69(3), <b>87(100)</b> , 97(17), 115(14), 127(3)                     |
| 26       | 69(13), <b>85(100)</b> , 95(15), 111(18), 125(50), 139(14)          |
| 27       | 70(2), 83(2), <b>112(100)</b> , 140(12), 152(7)                     |
| 28       | -                                                                   |
| 29       | 63(9), 71(35), 83(56), 95(58), <b>113(100)</b> , 131(9), 141(6)     |
| 30       | 69(28), <b>71(100)</b> , 83(35), 111(9), 125(14), 139(8)            |
| 31       | 71(52), 83(38), 97(35), <b>113(100)</b> , 125(67), 139(26)          |
| 32       | <b>71(100)</b> , 83(46), 107(27), 113(22), 121(48)                  |
| 33       | 71(12), 83(6), 107(47), <b>112(100)</b> , 140(10), 152(6)           |
| 34       | -                                                                   |
| 35       | 69(3), 83(19), 97(83), <b>121(100)</b> , 139(62), 151(49)           |
| 36       | 69(1), 83(2), 94(18), <b>99(100)</b> , 101(9)                       |
| 37       | 83(26), 94(39), 99(25), 112(93), <b>130(100)</b> , 137(56), 151(57) |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                |
|----------|---------------------------------------------------------------------------|
| 38       | 69(9), 83(9), 94(17), 112(40), 123(48), <b>131(100)</b> , 151(17)         |
| 39       | 69(16), 83(20), 101(36), 112(35), <b>125(100)</b> , 137(53), 151(41)      |
| 40       | 69(4), 83(1), 101(7), <b>122(100)</b> , 150(21), 162(6)                   |
| 41       | 69(24), 83(40), 95(65), <b>115(100)</b> , 139(76)                         |
| 42       | -                                                                         |
| 43       | 61(12), 75(8), 87(14), 93(40), <b>113(100)</b> , 115(32), 133(31), 153(6) |
| 44       | 73(25), 83(13), 98(15), 112(13), <b>128(100)</b> , 156(12), 168(4)        |
| 45       | 73(10), 83(4), 98(5), 112(4), 128(26), <b>281(100)</b> , 297(20), 325(6)  |
| 46       | 83(16), 98(17), 112(16), <b>128(100)</b> , 156(11), 168(5)                |
| 47       | 83(31), 98(33), 111(13), <b>128(100)</b> , 142(19), 156(14)               |
| 48       | <b>71(100)</b> , 83(14), 98(56), 111(29), 129(19)                         |
| 49       | 83(3), 98(18), <b>113(100)</b> , 131(32), 155(12)                         |
| 50       | 87(22), <b>100(100)</b> , 111(14), 127(21), 140(6), 153(6), 171(9)        |
| 51       | 69(17), 97(51), <b>115(100)</b> , 129(5), 143(6), 155(6)                  |
| 52       | 71(71), <b>85(100)</b> , 99(84), 113(51), 127(31), 155(15)                |
| 53       | 68(6), 83(3), 99(7), <b>110(100)</b> , 121(6), 138(7), 150(4)             |
| 54       | 71(55), 85(64), 99(60), <b>110(100)</b> , 121(51), 127(29)                |
| 55       | <b>86(100)</b> , 100(7), 114(2), 126(6), 141(1)                           |
| 55a      | 71(1), <b>86(100)</b> , 97(1), 100(1), 111(1), 114(1), 126(5), 139(1)     |
| 56       | 69(1), <b>86(100)</b> , 97(1), 100(1), 114(2), 126(6), 139(1), 143(1)     |
| 57       | -                                                                         |
| 58       | 70(6), <b>86(100)</b> , 111(62), 113(28), 127(9), 155(11)                 |
| 59       | 86(69), <b>114(100)</b> , 126(5), 137(4), 154(5)                          |
| 60       | 86(14), 123(5), <b>139(100)</b> , 167(11), 179(3)                         |
| 61       | 70(7), <b>87(100)</b> , 101(15), 109(5), 127(20), 161(8)                  |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                  |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------|
| 62       | 71(28), 86(100), 99(20), 111(15), 137(10), 155(13)                          |
| 63       | 69(100), 83(72), 97(13), 125(31), 143(24), 171(11)                          |
| 64       | 87(5), 99(70), 101(100), 123(16), 141(71), 169(4), 181(2)                   |
| 65       | 86(11), 101(13), 123(90), 181(100), 197(3)                                  |
| 65a      | 61(20), 75(20), 86(49), 97(57), 111(100), 123(32), 139(17), 151(17) 181(14) |
| 66       | 86(18), 99(16), 117(100), 137(12), 155(52)                                  |
| 67       | 86(7), 100(20), 115(11), 138(100), 166(14), 178(8)                          |
| 67a      | 67(17), 83(15), 97(100), 115(54), 123(36), 139(53)                          |
| 67b      | 69(12), 83(93), 99(100), 111(21), 123(23), 139(25)                          |
| 67c      | 71(2), 86(24), 99(9), 115(100), 128(19), 155(4)                             |
| 67d      | 70(26), 86(29), 98(86), 114(100), 125(31), 143(16)                          |
| 68       | 83(6), 99(15), 113(100), 125(18), 141(26), 341(35)                          |
| 69       | 81(19), 109(79), 123(35), 141(19), 155(14), 169(100), 209(12)               |
| 70       | 69(18), 97(42), 115(55), 155(100), 169(11), 183(11), 355(45), 371(11)       |
| 71       | 85(46), 103(100), 115(11), 123(18), 139(48), 155(11)                        |
| 72       | 61(25), 71(51), 85(61), 103(100), 111(37), 123(43), 135(43), 153(97)        |
| 73       | 88(20), 99(100), 115(12), 122(19), 139(11)                                  |
| 74       | 86(24), 99(20), 109(100), 127(25), 141(22), 155(20), 169(44)                |
| 75       | 61(11), 75(13), 97(47), 111(28), 115(100), 123(24), 139(10)                 |
| 76       | 83(51), 99(100), 101(91), 137(83), 165(9)                                   |
| 76a      | 85(36), 100(51), 113(100), 125(93), 139(24)                                 |
| 77       | 71(79), 85(100), 99(85), 113(82), 121(93), 27(5), 169(57)                   |
| 78       | 69(48), 83(100), 97(84), 121(42), 137(28), 157(28), 185(15)                 |
| 79       | 83(11), 100(35), 121(37), 128(100), 139(17), 157(21)                        |
| 80       | 83(10), 95(7), 111(28), 121(43), 128(72), 135(100), 160(57)                 |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                            |
|----------|-----------------------------------------------------------------------|
| 81       | 83(3), 94(12), 122(100), 150(12), 163(9)                              |
| 82       | 70(15), 98(68), 136(100), 164(24), 176(8)                             |
| 83       | 95(47), 115(100), 121(67), 139(36), 155(12), 161(6)                   |
| 84       | 95(72), 99(100), 109(44), 123(49), 141(79), 155(60), 169(18)          |
| 85       | 83(17), 97(100), 101(46), 109(41), 121(40), 139(27), 155(58), 167(68) |
| 85a      | 83(38), 111(65), 121(74), 130(75), 137(100), 155(97)                  |
| 86       | 95(3), 111(9), 140(100), 168(6), 180(5)                               |
| 87       | 100(10), 123(100), 156(15), 180(9), 197(5)                            |
| 87a-b    | 100(4), 114(100), 137(11), 142(11), 154(7)                            |
| 88       | 83(17), 97(50), 114(61), 125(100), 143(81), 170(34), 183(11)          |
| 88a      | 97(44), 114(40), 142(100), 155(13), 170(11), 197(8)                   |
| 89       | 99(15), 111(24), 127(26), 169(100), 197(16)                           |
| 90       | 97(22), 114(17), 142(100), 155(31), 197(19)                           |
| 91       | 61(33), 99(81), 123(52), 141(100), 169(29)                            |
| 92       | 113(29), 123(23), 142(16), 172(100), 200(16)                          |
| 93       | 114(5), 123(100), 139(9), 151(9), 163(9), 180(5)                      |
| 94       | 71(91), 85(18), 99(100), 113(94), 127(78), 141(67), 155(42)           |
| 95       | 97(48), 113(29), 125(100), 143(65), 185(42)                           |
| 96       | 97(36), 113(62), 125(32), 136(100), 159(27), 415(30)                  |
| 97       | 71(22), 85(20), 109(100), 127(15), 169(61), 183(16), 209(9)           |
| 98       | 109(31), 123(31), 137(17), 158(100), 186(20), 198(9), 209(5)          |
| 99       | 98(11), 114(59), 142(100), 170(15), 182(10)                           |
| 100      | 83(28), 111(100), 125(97), 153(82), 171(18), 211(3)                   |
| 101      | 71(60), 85(72), 99(100), 113(97), 127(72), 141(61), 153(41), 169(20)  |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                   |
|----------|------------------------------------------------------------------------------|
| 102      | 98(12), 109(33), <b>142(100)</b> , 151(11), 170(11), 182(7)                  |
| 103      | 99(73), 109(47), 127(61), 141(43), 155(37), 169(42), <b>429(100)</b>         |
| 104      | 95(5), 109(37), 135(20), <b>155(100)</b> , 183(11), 195(9)                   |
| 105      | <b>99(100)</b> , 111(65), 125(67), 141(49), 155(43), 169(43), 185(40)        |
| 106      | 81(47), <b>97(100)</b> , 109(94), 125(85), 141(80), 169(53), 185(57)         |
| 107      | 111(9), 128(12), 149(20), <b>156(100)</b> , 184(18), 196(6)                  |
| 108      | 97(17), <b>139(100)</b> , 157(76), 185(6), 197(7)                            |
| 109      | 71(79), <b>99(100)</b> , 127(94), 141(71), 162(57), 197(78)                  |
| 110      | 99(52), 109(73), 126(57), 144(42), <b>169(100)</b> , 197(28), 209(12)        |
| 111      | 99(17), 114(56), 126(62), 144(48), <b>156(100)</b> , 184(22), 197(12)        |
| 112      | 71(58), 85(59), <b>99(100)</b> , 123(73), 141(56), 155(45), 193(42), 211(23) |
| 113      | 98(28), 126(96), <b>144(100)</b> , 170(57), 183(45), 199(21), 210(6)         |
| 113a     | 83(22), 99(40), <b>123(100)</b> , 139(59), 155(37), 169(37)                  |
| 114      | 96(17), 123(6), <b>140(100)</b> , 186(33), 214(13), 226(5)                   |
| 115      | 71(94), 85(95), 99(75), 113(70), 123(94), 141(53), <b>197(100)</b>           |
| 116      | 105(29), <b>123(100)</b> , 139(30), 153(29), 170(98), 198(26)                |
| 117      | 83(13), 101(44), 123(88), <b>165(100)</b> , 183(28), 209(29)                 |
| 118      | 98(24), 123(11), 142(12), 156(11), <b>170(100)</b> , 198(18), 210(7)         |
| 119      | 98(14), 126(13), 142(71), <b>170(100)</b> , 188(46), 216(13), 228(4)         |
| 120      | 99(61), <b>123(100)</b> , 141(28), 181(31), 166(19), 195(29)                 |
| 121      | 98(7), <b>142(100)</b> , 170(54), 188(37), 216(9), 228(3)                    |
| 122      | 81(11), 109(12), 137(16), <b>163(100)</b> , 177(14), 193(6), 223(6)          |
| 123      | 123(13), 165(12), 193(15), <b>221(100)</b> , 249(12), 261(7)                 |
| 124      | 109(14), 125(28), 163(62), 179(28), 205(76), <b>220(100)</b> , 237(8)        |
| 125      | 71(89), 85(88), <b>97(100)</b> , 111(82), 125(40), 140(28), 169(30), 185(48) |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                     |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------|
| 126      | -                                                                              |
| 127      | 95(15), 109(12), 123(60), 165(100), 183(25)                                    |
| 128      | 71(55), 85(73), 99(75), 113(55), 127(54), 142(76), 169(57), 195(100)           |
| 129      | 71(72), 85(83), 99(75), 113(64), 127(59), 141(59), 155(43), 169(33), 211(100)  |
| 130      | 71(39), 99(100), 113(82), 123(72), 141(58), 155(50), 169(43), 212(70)          |
| 131      | 99(10), 109(11), 123(9), 137(8), 165(9), 205(71), 220(100)                     |
| 132      | 97(20), 109(18), 139(12), 151(14), 123(24), 191(100), 206(56)                  |
| 133      | 111(5), 123(4), 153(2), 181(100), 209(16), 221(7)                              |
| 134      | 99(35), 111(52), 129(100), 167(42), 197(27), 215(48)                           |
| 135      | 99(100), 139(60), 155(49), 173(94), 201(32), 229(43)                           |
| 136      | 85(86), 99(100), 113(80), 139(90), 155(58), 169(53), 197(24)                   |
| 137      | 79(11), 93(11), 111(12), 121(14), 139(100), 157(11), 167(10), 179(6)           |
| 138      | 99(37), 123(93), 139(60), 181(100), 197(40), 211(27), 253(21)                  |
| 139      | 99(44), 109(43), 123(100), 139(68), 167(31), 181(48)                           |
| 140      | 85(55), 99(100), 113(81), 123(73), 141(61), 155(75), 195(55), 211(53)          |
| 141      | -                                                                              |
| 142      | 95(70), 109(79), 137(100), 155(94), 205(98), 221(33)                           |
| 143      | 99(53), 123(100), 139(53), 155(35), 181(49), 199(22)                           |
| 144      | 111(43), 123(53), 137(39), 155(37), 169(68), 181(55), 195(100), 199(28)        |
| 145      | 109(82), 123(96), 137(78), 153(100), 183(80), 195(54), 205(80)                 |
| 146      | 95(40), 111(83), 127(21), 137(60), 155(100), 173(24), 183(22), 201(25)         |
| 147      | 123(3), 149(12), 177(100), 223(4), 251(2), 263(3)                              |
| 148      | 71(23), 111(100), 123(10), 149(9), 177(8), 199(36)                             |
| 149      | 85(74), 99(62), 113(62), 127(55), 141(62), 155(52), 170(79), 225(100), 244(36) |
| 150      | 69(44), 121(22), 149(15), 163(16), 191(100), 209(39), 237(14)                  |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                                         |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 151      | 105(26), 123(5), <b>183(100)</b> , 211(15), 223(6)                                                                                                                                                 |
| 152      | 109(52), 123(76), 173(50), 201(54), 217(72), <b>281(100)</b> , 377(38)                                                                                                                             |
| 153      | 109(25), 121(30), 149(24), 165(56), 189(15), <b>205(100)</b> , 221(12)                                                                                                                             |
| 154      | 109(58), 123(63), 149(75), 169(30), 185(38), <b>205(100)</b>                                                                                                                                       |
| 155      | 99(82), <b>113(100)</b> , <b>123(100)</b> , 137(61), 151(97), 165(60), 193(52), 211(46)                                                                                                            |
| 156      | 99(45), 109(30), 123(53), 137(31), 151(37), 165(27), 183(46), <b>205(100)</b>                                                                                                                      |
| 157      | 123(65), 139(39), <b>153(100)</b> , 165(45), 195(52), 209(98), 227(52), 255(33)                                                                                                                    |
| 158      | 123(8), 139(12), 156(21), <b>171(100)</b> , 183(17), 211(7), 249(4)                                                                                                                                |
| 159      | 71(73), 83(71), <b>97(100)</b> , 111(95), 125(64), 139(48), 171(56), 213(66), 355(64)                                                                                                              |
| 160      | 85(73), 99(64), 113(49), 127(47), 141(40), <b>155(47)</b> , 169(38), 183(26), 197(22), <b>239(100)</b><br>99(54), 113(48), 127(40), 141(29), 155(40), 169(100), 183(31), 194(42), 205(20), 221(27) |
| 161      | -                                                                                                                                                                                                  |
| 162      | -                                                                                                                                                                                                  |
| 163      | 71(70), 85(93), <b>99(100)</b> , 113(96), 127(83), 141(70), 155(59), 169(58), 183(36), 197(31)                                                                                                     |
| 164      | -                                                                                                                                                                                                  |
| 165      | 109(17), 121(19), 135(25), 151(13), 179(38), <b>197(100)</b> , 225(23), 237(28)                                                                                                                    |
| 166      | 111(6), 123(6), 135(5), <b>159(100)</b> , 187(27), 217(21), 245(6)                                                                                                                                 |
| 167      | -                                                                                                                                                                                                  |
| 168      | 88(30), 99(34), 113(35), 127(27), 141(27), 155(30), 169(17), 183(13), 197(14),<br><b>219(100)</b> , 247(28), 259(9)                                                                                |
| 169      | 135(13), 179(26), <b>197(100)</b> , 225(18), 237(10)                                                                                                                                               |
| 170      | 99(41), 113(61), 123(40), 137(30), 159(43), 181(99), <b>197(100)</b> , 217(30), 225(31),<br>235(21)                                                                                                |
| 171      | 99(94), 113(84), 123(80), 159(75), 179(89), 197(91), <b>237(100)</b> , 253(57)                                                                                                                     |
| 172      | 99(49), <b>123(100)</b> , 149(43), 182(71), 207(84), 229(42), 253(23)                                                                                                                              |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 173      | 111(31), 123(34), 149(30), 163(31), 191(37), <b>207(100)</b> , 223(77), 235(20), 247(11),<br>263(9)                                  |
| 174      | -                                                                                                                                    |
| 175      | -                                                                                                                                    |
| 176      | 71(47), 85(45), 99(45), 113(40), 121(83), 141(32), 155(20), 169(30), 183(28),<br>197(16), 215(35), <b>253(100)</b>                   |
| 177      | <b>105(100)</b> , 121(27), 146(46), 179(22), 197(27), 211(70), 239(19), 267(17)                                                      |
| 178      | 71(77), 85(78), 99(93), 113(70), 127(78), 141(70), 155(80), 169(53), 183(75),<br><b>197(100)</b> , 211(46), 225(39)                  |
| 179      | 111(7), 124(10), <b>170(100)</b> , 210(7), 251(5)                                                                                    |
| 180      | 170(6), 211(11), <b>229(100)</b> , 257(18), 269(16)                                                                                  |
| 181      | 195(14), 221(5), 281(5), 355(21), <b>429(100)</b>                                                                                    |
| 182      | 83(45), 111(86), 139(59), 169(36), 195(49), <b>267(100)</b> , 297(68)                                                                |
| 183      | 97(99), 111(65), 125(69), 139(53), 203(75), <b>221(100)</b> , 267(54), 277(51)                                                       |
| 184      | 123(7), <b>149(100)</b> , 177(13), 205(23), 223(9), 263(4), 279(11)                                                                  |
| 185      | 83(49), <b>97(100)</b> , 111(76), 123(76), 139(57), 149(66), 163(63), 207(49), 219(46), 267(81)                                      |
| 186      | 71(21), 85(23), 97(28), 111(23), 125(19), 151(18), <b>225(100)</b> , 241(25), 253(11), 265(4)                                        |
| 187      | <b>99(100)</b> , 111(96), 123(86), 139(51), 153(51), 169(57), 207(53), 221(47), 252(44)                                              |
| 188      | 71(38), 85(42), 99(40), 113(32), 127(31), 141(32), 155(27), 169(24), 183(28), 197(22),<br>211(18), 225(13), 255(14), <b>267(100)</b> |
| 189      | 99(86), <b>119(100)</b> , 139(39), 153(37), 169(38), 193(49), 207(45), 239(38), 259(50)                                              |
| 190      | 113(26), <b>149(100)</b> , 177(20), 205(48), 223(16), 268(22), 279(12)                                                               |
| 191      | 111(19), 123(18), 161(24), 203(73), <b>221(100)</b> , 277(32)                                                                        |
| 192      | 71(56), 85(94), 99(91), 113(97), 127(68), 141(74), 155(67), <b>195(100)</b> , 211(39), 223(27)                                       |
| 193      | 99(10), 111(12), 123(10), 195(12), 239(13), <b>271(100)</b> , 299(17)                                                                |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                    |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 194      | -                                                                                                                                                             |
| 195      | 71(45), 83(34), 99(63), 111(55), 125(54), 137(45), 151(42), 169(37), <b>187(100)</b> , 213(39), 225(35)                                                       |
| 196      | 99(58), 111(71), 123(64), 139(59), 149(48), 175(40), 205(55), <b>221(100)</b> , 277(55)                                                                       |
| 197      | 71(40), 85(53), 99(81), <b>111(100)</b> , 125(82), 141(49), 155(55), 169(51), 207(56), 281(65)                                                                |
| 198      | 123(7), <b>149(100)</b> , 177(13), 205(67), 223(5), 279(14), 319(6)                                                                                           |
| 199      | 237(17), <b>257(100)</b> , 285(17), 297(1)                                                                                                                    |
| 200      | 247(11), 257(24), 281(3), 355(14), 429(44), <b>503(100)</b>                                                                                                   |
| 201      | 71(34), 85(45), 99(33), 113(30), 141(22), 169(25), 197(29), 257(53), <b>281(100)</b> , 295(7)                                                                 |
| 202      | 71(30), 83(25), 97(63), 111(36), 125(36), 139(30), 169(23), 181(20), 193(20), 207(23), 221(23), 237(40), <b>257(100)</b> , 269(24), 285(21)                   |
| 203      | 71(45), 85(57), <b>97(100)</b> , 111(85), 125(58), 139(51), 153(30), 169(29), 225(52), 239(39), 257(89), 269(28), 285(39)                                     |
| 204      | 71(40), 83(33), 99(47), 111(52), 125(52), 139(34), 151(30), 169(25), <b>199(100)</b> , 237(36), 257(76), 269(24), 285(28)                                     |
| 205      | 239(11), <b>257(100)</b> , 285(20), 297(18)                                                                                                                   |
| 206      | -                                                                                                                                                             |
| 207      | 97(13), 111(12), 125(9), 158(27), 186(28), <b>204(100)</b> , 223(6), 244(11), 257(9), 295(5)                                                                  |
| 208      | 97(29), 111(24), 125(20), 139(13), 151(12), 165(12), 179(14), 207(18), 227(3), 239(16), <b>255(100)</b> , 269(13), 283(28)                                    |
| 209      | 97(50), 111(47), 125(37), 137(26), <b>179(100)</b> , 207(42), 255(34), 295(22)                                                                                |
| 210      | 71(47), 85(48), <b>97(100)</b> , 111(64), 123(69), 137(52), 149(33), 167(32), 191(47), 207(59), 225(31), 239(30), 245(45), 257(31), 269(37), 295(47)          |
| 211      | <b>73(100)</b> , 85(39), <b>97(100)</b> , 111(71), 123(54), 141(42), 155(38), 169(43), 183(30), 197(34), 207(48), 223(33), 237(31), 255(31), 281(31), 295(44) |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                      |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 212      | 71(42), 85(44), 97(100), 111(94), 123(80), 137(39), 153(43), 167(46), 179(36),<br>193(43), 207(52), 223(46), 255(40), 279(52)                   |
| 213      | 71(63), 85(51), 97(100), 111(100), 125(75), 141(77), 151(48), 169(45), 207(70),<br>223(45), 239(54), 257(44), 269(44), 295(96)                  |
| 214      | 71(43), 83(27), 99(61), 111(68), 127(59), 145(100), 169(77), 197(26), 207(36),<br>255(31), 269(41), 313(52)                                     |
| 215      | 71(75), 85(85), 97(95), 111(100), 125(72), 139(54), 151(47), 169(48), 207(62),<br>227(52), 253(53), 269(58), 287(56)                            |
| 216      | 71(7), 85(11), 97(18), 111(15), 125(14), 139(9), 153(8), 165(10), 179(7), 197(7),<br>207(12), 223(100), 251(21), 281(6)                         |
| 217      | 71(32), 81(49), 97(100), 111(93), 125(73), 139(51), 151(58), 179(47), 207(74),<br>223(52), 239(43), 263(52), 293(39)                            |
| 218      | 71(28), 85(34), 99(33), 113(27), 127(21), 141(24), 155(20), 169(20), 183(20),<br>197(21), 211(23), 225(18), 239(14), 255(22), 265(12), 295(100) |
| 219      | -                                                                                                                                               |
| 220      | -                                                                                                                                               |
| 221      | -                                                                                                                                               |
| 222      | 71(17), 83(16), 97(30), 111(25), 123(28), 139(19), 153(12), 207(29), 269(18),<br>283(17), 299(100), 327(21)                                     |
| 223      | 71(1), 85(2), 99(2), 113(2), 125(1), 141(1), 155(1), 169(1), 183(1), 197(1), 207(1),<br>231(100), 259(30), 271(8)                               |
| 224      | 73(7), 83(7), 97(11), 111(10), 125(8), 137(5), 151(7), 163(5), 179(4), 193(3), 207(3),<br>221(11), 257(13), 279(9), 355(100), 429(29), 503(59)  |
| 225      | 83(41), 97(59), 111(46), 125(33), 139(23), 151(21), 165(24), 179(26), 199(17),<br>223(13), 245(26), 257(24), 263(100), 279(74), 311(15), 321(6) |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                 |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 226      | 83(23), 97(33), 111(31), 125(24), 139(18), 153(16), 179(20), 199(17), 213(13),<br>227(11), 247(19), 265(100), 283(42), 311(20), 323(8)                                     |
| 227      | -                                                                                                                                                                          |
| 228      | -                                                                                                                                                                          |
| 229      | -                                                                                                                                                                          |
| 230      | 71(34), 83(39), 97(57), 111(52), 125(46), 141(28), 153(25), 169(31), 181(23),<br>199(22), 225(14), 247(24), 257(34), 265(100), 283(69), 311(19)                            |
| 231      | 97(32), 111(29), 123(20), 139(17), 155(13), 179(12), 193(11), 207(19), 223(11),<br>238(14), 256(100), 265(45), 285(45), 311(32)                                            |
| 232      | 71(23), 85(20), 97(28), 111(31), 123(100), 151(29), 167(10), 207(10), 223(6), 247(5),<br>265(15), 291(31), 313(18), 331(6)                                                 |
| 233      | 71(41), 85(35), 99(30), 113(30), 127(28), 141(29), 155(25), 183(23), 197(25),<br>211(30), 225(25), 239(19), 253(16), 267(19), 285(36), 309(100), 323(9)                    |
| 234      | 71(52), 83(51), 97(100), 111(84), 125(56), 139(48), 153(36), 167(30), 183(29),<br>197(34), 207(33), 253(52), 265(32), 285(46), 301(19), 311(23)                            |
| 235      | 71(21), 83(23), 97(46), 111(32), 125(28), 139(21), 153(16), 169(16), 179(14),<br>193(21), 207(25), 270(100), 283(25), 298(24), 323(11)                                     |
| 236      | 71(38), 85(36), 97(66), 111(58), 125(46), 139(31), 155(33), 169(30), 183(27), 197(32),<br>207(56), 225(30), 239(21), 253(20), 269(36), 285(31), 297(21), 309(22), 323(100) |
| 237      | 83(17), 97(33), 111(25), 125(23), 139(15), 151(14), 165(10), 193(10), 207(19), 223(13),<br>255(14), 268(16), 284(100), 312(24)                                             |
| 238      | 71(75), 83(62), 97(95), 111(100), 123(70), 137(46), 149(64), 169(33), 183(41), 207(65),<br>223(56), 267(50), 284(90), 301(29), 317(29), 323(79)                            |
| 239      | 83(43), 97(100), 111(25), 123(60), 137(37), 151(31), 165(34), 179(32), 193(33),<br>207(68), 223(33), 269(41), 281(31), 298(82), 317(34)                                    |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                      |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 240      | 71(47), 83(33), 97(93), 111(93), 125(62), 139(59), 155(39), 183(35), 207(50), 223(38), 269(34), <b>323(100)</b>                                                                 |
| 241      | 71(34), 83(48), <b>97(100)</b> , 111(85), 125(69), 145(72), 153(41), 165(34), 181(29), 197(33), 207(76), 223(39), 239(37), 265(31), 281(30), 307(48), 315(29), 329(27), 341(34) |
| 242      | 71(45), 83(45), 97(90), <b>111(100)</b> , 125(59), 139(47), 153(40), 165(44), 179(39), 193(43), 207(83), 223(35), 251(32), 269(47), 281(41), 317(52), 337(45)                   |
| 243      | 207(6), 221(7), 281(7), 295(6), 355(49), <b>429(100)</b> , 503(21)                                                                                                              |
| 244      | 71(28), 85(23), 105(29), <b>123(100)</b> , 151(27), 169(10), 183(13), 197(7), 207(10), 225(8), 239(10), 253(6), 267(7), 281(5), 305(35), 323(49), 345(6)                        |
| 245      | 161(34), <b>179(100)</b> , 207(24), 291(91), 319(19)                                                                                                                            |
| 246      | 71(7), 83(16), 97(38), 111(30), 123(32), 139(21), 153(18), 165(15), 179(14), 183(12), 207(31), 255(26), 299(25), <b>315(100)</b> , 329(19), 343(19)                             |
| 247      | 71(25), 83(26), 99(38), 111(43), 125(35), 141(25), 155(27), 169(22), 183(20), 197(18), 207(37), 223(22), 253(21), 267(12), 281(14), 315(27), <b>337(100)</b>                    |
| 248      | <b>91(100)</b> , 149(66), 205(34), 313(13), 337(14)                                                                                                                             |
| 249      | 71(45), 85(61), <b>97(100)</b> , 111(87), 125(88), 139(51), 155(47), 167(36), 183(37), 197(33), 207(70), 223(47), 263(44), 315(44), 337(87)                                     |
| 250      | 71(45), 85(51), <b>97(100)</b> , 111(69), 125(61), 139(47), 155(51), 169(35), 207(71), 223(47), 269(40), 282(94), 310(33), 329(36), 337(77)                                     |
| 251      | 71(47), 85(16), 97(89), 111(71), 125(60), 139(44), 155(36), 197(39), 207(65), 223(41), 253(36), 281(34), 321(37), <b>337(100)</b> , 351(28)                                     |
| 252      | 71(47), 85(61), <b>97(100)</b> , 111(83), 125(70), 139(59), 153(46), 169(34), 197(32), 207(76), 225(39), 263(32), 281(48), 321(53), 331(42), 343(35), 351(39)                   |
| 253      | 71(28), 85(37), 97(76), 111(70), 125(56), 139(45), 151(33), 165(25), 179(33), 193(27), 207(66), 269(35), 285(34), <b>294(100)</b> , 329(28), 351(38)                            |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                       |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 254      | 71(33), 85(35), 99(29), 113(35), 129(58), 147(28), 169(23), 207(29), 259(29), 281(18), 315(13), 337(100), 371(31)                                                                |
| 255      | 71(28), 83(20), 105(34), 123(100), 151(28), 169(11), 207(22), 223(13), 269(12), 319(42)                                                                                          |
| 256      | 71(33), 83(28), 97(73), 111(58), 125(46), 139(50), 155(41), 167(29), 183(24), 207(57), 223(37), 251(20), 265(23), 308(100), 331(32), 343(29)                                     |
| 257      | 71(15), 83(12), 97(40), 111(31), 125(27), 137(17), 153(14), 165(12), 179(10), 207(37), 223(18), 239(12), 253(10), 269(17), 295(10), 310(100), 338(27)                            |
| 258      | 207(9), 221(10), 281(12), 295(9), 355(47), 369(7), 429(98), 503(100)                                                                                                             |
| 259      | 71(28), 85(58), 97(69), 111(75), 125(57), 139(42), 153(41), 169(39), 179(31), 197(36), 207(65), 223(46), 253(36), 269(39), 287(44), 315(27), 331(36), 343(36), 351(100), 359(31) |
| 260      | 71(45), 85(41), 111(76), 125(70), 139(57), 169(38), 181(35), 197(31), 207(66), 239(35), 253(34), 267(41), 281(23), 329(32), 343(39), 351(100), 365(27)                           |
| 261      | 71(45), 85(58), 97(95), 111(99), 125(75), 139(59), 155(48), 163(44), 183(43), 197(56), 207(95), 223(54), 253(31), 269(46), 312(40), 329(53), 343(39), 351(100)                   |
| 262      | 71(55), 83(48), 97(100), 111(94), 125(79), 139(61), 153(51), 167(39), 181(34), 193(41), 207(72), 225(43), 239(46), 269(37), 299(48), 331(55), 365(50), 387(87)                   |
| 263      | 71(21), 85(26), 99(25), 113(28), 141(21), 155(20), 169(22), 183(15), 197(22), 207(22), 225(15), 239(18), 253(14), 267(23), 281(20), 295(15), 309(12), 351(100), 365(9), 385(7)   |
| 264      | 71(43), 83(41), 99(30), 113(52), 125(45), 139(30), 149(100), 167(84), 207(50), 257(55), 331(29), 343(26), 359(14)                                                                |
| 265      | 71(28), 85(31), 97(39), 111(35), 123(100), 151(28), 207(27), 239(16), 281(17), 333(32), 365(35)                                                                                  |
| 266      | 71(48), 83(35), 97(100), 111(93), 125(68), 139(45), 151(48), 165(45), 193(38), 207(89), 223(27), 253(33), 269(33), 281(33), 315(37), 329(77), 343(47), 359(31), 373(24), 387(25) |
| 267      | 71(21), 85(25), 97(30), 111(35), 127(24), 141(23), 153(18), 169(19), 207(32), 239(21), 281(21), 295(14), 329(13), 343(15), 365(100), 385(11)                                     |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                 |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 268      | 113(49), 149(100), 167(41), 177(14), 195(8), 279(47), 307(9), 319(7), 375(7), 391(47)<br>207(12), 221(14), 281(15), 295(15), 355(71), 429(88), 503(100)                    |
| 269      | -                                                                                                                                                                          |
| 270      | -                                                                                                                                                                          |
| 271      | 71(47), 85(53), 97(79), 111(95), 125(57), 149(48), 169(35), 183(37), 197(29), 207(100),                                                                                    |
| 272      | 223(51), 281(45), 329(59), 343(41), 357(42), 379(44), 431(24)                                                                                                              |
| 273      | 71(56), 85(56), 97(89), 111(91), 125(72), 149(56), 207(96), 223(53), 281(47), 365(100),<br>379(42), 343(38)                                                                |
| 274      | 207(13), 221(17), 281(16), 295(14), 355(83), 429(96), 503(100)                                                                                                             |
| 275      | -                                                                                                                                                                          |
| 276      | 71(28), 85(25), 99(24), 111(22), 125(22), 141(24), 155(20), 169(26), 183(20), 197(18),<br>207(36), 239(23), 267(18), 281(24), 295(17), 343(24), 365(100), 387(20)          |
| 277      | 71(64), 85(45), 97(87), 111(81), 125(73), 139(57), 169(44), 207(100), 223(74), 281(51),<br>295(38), 309(26), 343(56), 357(69), 379(91)                                     |
| 278      | 71(36), 83(40), 97(93), 111(78), 125(75), 139(45), 153(46), 183(28), 207(89), 223(69),<br>239(48), 267(45), 317(100), 359(49), 387(50), 461(87)                            |
| 279      | 71(25), 85(22), 97(27), 111(31), 127(21), 141(20), 155(22), 169(19), 183(17), 197(16),<br>207(36), 239(17), 267(19), 281(19), 295(18), 357(20), 371(31), 379(100), 387(13) |
| 280      | -                                                                                                                                                                          |
| 281      | 71(51), 83(31), 99(52), 111(74), 131(74), 155(54), 169(30), 183(50), 197(25), 207(100),<br>223(46), 239(37), 267(46), 281(48), 295(28), 331(36), 359(22), 413(70)          |
| 282      | -                                                                                                                                                                          |
| 283      | -                                                                                                                                                                          |
| 284      | -                                                                                                                                                                          |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                             |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 285      | 71(17), 85(21), 97(37), 111(37), 125(31), 139(22), 151(18), 165(16), 179(16), 207(50),<br>223(29), 271(100), 281(20), 299(25), 315(47), 357(29), 371(35), 387(20), 413(19)             |
| 286      | 71(48), 83(37), 97(72), 111(67), 125(61), 139(40), 153(37), 183(35), 207(100), 223(51),<br>281(42), 267(35), 295(31), 357(83), 371(48), 393(47)                                        |
| 287      | 71(21), 85(23), 99(20), 111(25), 125(22), 141(18), 155(19), 169(17), 183(19), 207(38),<br>223(19), 239(18), 253(21), 267(21), 281(25), 301(18), 313(17), 357(13), 379(100), 413(16)    |
| 288      | 85(42), 97(62), 111(72), 125(57), 137(43), 179(38), 207(82), 223(54), 281(43), 343(100),<br>357(49), 373(45), 387(54)                                                                  |
| 289      | -                                                                                                                                                                                      |
| 290      | 71(21), 85(24), 97(29), 111(26), 125(25), 141(19), 153(16), 169(19), 183(17), 197(16),<br>207(46), 223(24), 239(17), 253(22), 267(20), 281(28), 301(19), 357(19), 379(100), 411(16)    |
| 291      | -                                                                                                                                                                                      |
| 292      | 207(14), 221(16), 281(2), 295(13), 355(71), 369(13), 429(100), 503(73)                                                                                                                 |
| 293      | 71(22), 85(25), 99(25), 111(28), 125(18), 139(19), 153(15), 169(17), 183(16), 197(15),<br>207(41), 223(24), 239(20), 281(25), 301(17), 343(10), 371(24), 393(100), 413(20)             |
| 294      | -                                                                                                                                                                                      |
| 295      | 71(9), 83(8), 97(17), 111(17), 125(14), 139(5), 151(5), 169(8), 197(8), 207(26), 223(4),<br>239(7), 253(3), 269(9), 283(8), 301(21), 319(12), 336(11), 352(100), 380(27), 413(18)      |
| 296      | -                                                                                                                                                                                      |
| 297      | -                                                                                                                                                                                      |
| 298      | 71(32), 83(29), 97(65), 111(60), 125(49), 139(25), 151(29), 165(25), 179(31), 193(30),<br>207(100), 223(51), 269(37), 281(34), 301(18), 371(55), 387(31), 413(39), 471(23),<br>487(53) |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                                                                                                              |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 299      | 71(21), 85(21), 99(18), 111(26), 125(11), 155(14), 169(10), 183(18), 207(52), 223(28), 239(15), 253(17), 267(15), 281(21), 295(13), 309(10), 323(9), 337(7), 351(9), 371(14), 393(100), 413(15), 487(7) |
| 300      | 69(60), 81(67), 95(35), 109(40), 123(36), 137(100), 149(30), 163(20), 177(25), 191(30), 207(27), 259(20), 341(12), 409(74)                                                                              |
| 301      | 71(17), 85(23), 97(35), 111(35), 125(33), 139(19), 155(19), 183(19), 207(60), 223(35), 253(20), 281(29), 295(17), 371(13), 385(20), 407(100), 421(16)                                                   |
| 302      | 71(28), 85(28), 97(66), 111(57), 125(39), 137(35), 165(35), 179(34), 207(100), 223(55), 269(37), 281(37), 355(36), 369(62), 385(34), 397(22), 407(35), 429(16)                                          |
| 303      | 73(15), 111(6), 147(11), 207(19), 221(15), 281(18), 295(13), 355(60), 429(100), 503(73)                                                                                                                 |
| 304      | 71(16), 85(21), 99(20), 113(14), 125(10), 139(9), 155(11), 169(14), 183(9), 197(15), 207(33), 223(18), 239(16), 253(12), 267(12), 281(20), 295(8), 309(10), 323(5), 337(5), 351(6), 407(100), 421(6)    |
| 305      | 71(33), 83(24), 97(20), 111(35), 125(20), 137(23), 149(20), 179(16), 197(20), 207(95), 223(49), 281(33), 355(36), 393(28), 421(100), 503(20)                                                            |
| 306      | 83(12), 97(10), 111(12), 125(10), 137(17), 151(8), 165(8), 179(7), 207(52), 223(28), 281(17), 376(100), 404(24), 429(10)                                                                                |
| 307      | 83(10), 97(8), 111(14), 125(14), 139(10), 151(5), 165(5), 181(4), 193(3), 207(33), 223(19), 281(13), 378(100), 406(22)                                                                                  |
| 308      | 73(15), 111(8), 147(11), 207(30), 223(17), 269(5), 281(17), 295(15), 355(60), 429(100), 503(74)                                                                                                         |
| 309      | 83(14), 95(10), 111(37), 137(23), 165(21), 191(22), 207(100), 223(40), 269(32), 281(28), 397(38), 411(53), 427(15)                                                                                      |

ตารางที่ 3.16 (ต่อ)

| Peak no. | m/z (% relative abundance)                                                                                    |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 310      | 83(15), 111(22), 155(14), 183(11), 207(41), 223(33), 281(25), 331(11), 411(13),<br>435(100)                   |
| 311      | 73(20), 111(17), 147(14), 207(64), 223(28), 269(13), 281(30), 295(18), 355(72),<br>369(16), 429(100), 503(80) |

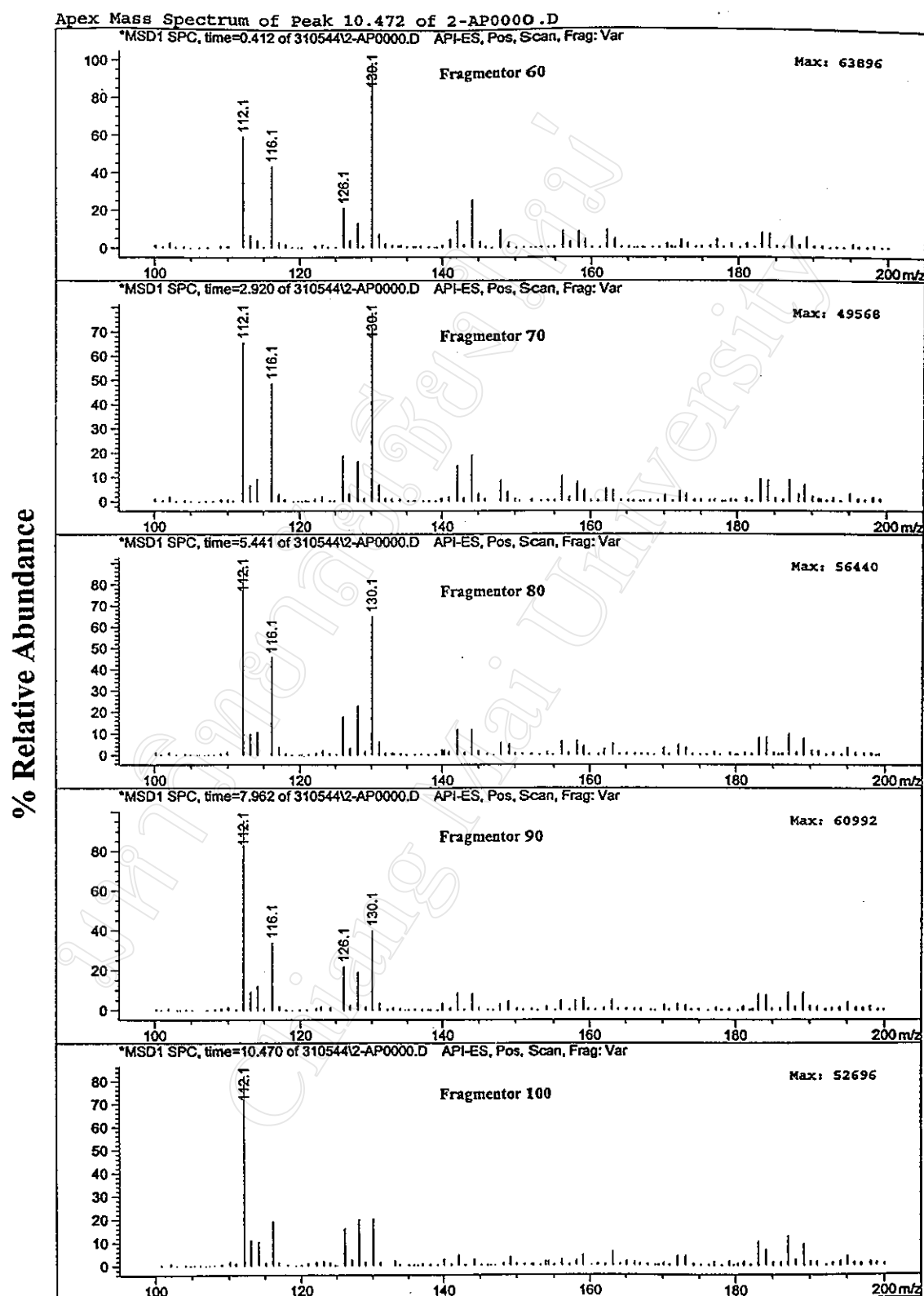
จากผลการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ chemical ionisation พบองค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวมากกว่า 300 องค์ประกอบเช่นเดียวกับการวิเคราะห์องค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบ electron impact ionisation และพบสารที่มีน้ำหนักโมเลกุลของไอออนเท่ากับ 112 amu (peak no. 33) ซึ่งเท่ากับน้ำหนักโมเลกุลของไอออนที่เกิดจากการรับโปรตอนของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline (peak no. 27)

ดังนั้นการวิเคราะห์เชิงคุณภาพขององค์ประกอบในสารสกัดจากเมล็ดข้าวโดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนทั้งแบบ electron impact ionisation และ chemical ionisation สรุปได้ว่า พบองค์ประกอบที่มีมวลโมเลกุลเท่ากับ 111 amu ซึ่งมีเท่ากับมวลโมเลกุลของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline หรือมีน้ำหนักโมเลกุลของไอออนเท่ากับ 112 amu ซึ่งเกิดจากการรับโปรตอน นอกเหนือจากสารหอม และเมื่อหาพื้นที่ใต้พีคของสาร peak no. 33 พบว่ามีพื้นที่ใต้พีคเท่ากับ 1534859 หรือมีปริมาณคิดเป็นเปอร์เซ็นต์เท่ากับ 16.37 % ส่วนสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline มีพื้นที่ใต้พีคเท่ากับ 7842135 หรือมีปริมาณคิดเป็นเปอร์เซ็นต์เท่ากับ 83.63 % ของสารที่มีมวลโมเลกุลเท่ากับ 111 amu หรือมีน้ำหนักโมเลกุลของไอออนเท่ากับ 112 amu ในสารสกัดข้าวที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ดังนั้นการตรวจวัดปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวด้วยเทคนิคฟลูออโรเจนเซนซิเล็กโตรสเปกโตรอิมเมชันแมสสเปกโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปกโตรอิมเมชัน และมีแบบของสแกนมวลต่อประจุเป็นแบบเก็บเฉพาะที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 amu สามารถทำได้โดยหาพื้นที่ใต้พีคเฉพาะที่เป็นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline จากเปอร์เซ็นต์ของสารหอมที่มีอยู่ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวดังกล่าว

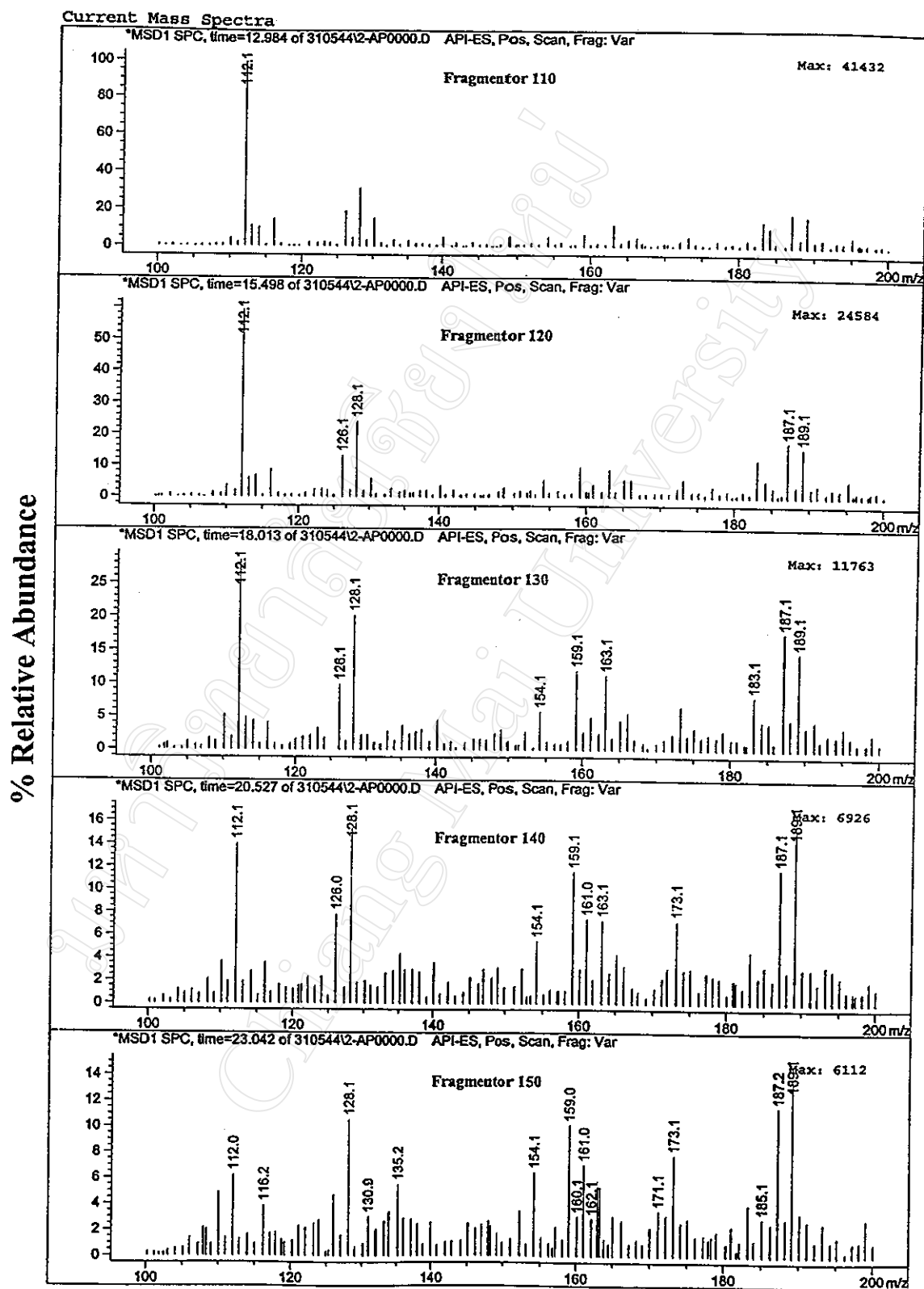
### 3.12 ผลของการศึกษาความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่อรูปแบบการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline โดยใช้เทคนิคฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรี

ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์มีผลต่อการแตกตัวเป็นไอออนย่อยของสาร จากการนำสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline 20 ppm ในสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชัน โดยทำการทดลองเปลี่ยนค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ตั้งแต่ 60-150 โวลท์ และแบบของการสแกนมวลต่อประจุ คือ เก็บทุกมวลต่อประจุตั้งแต่ 100-200 amu โดยใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.14 ได้แมสสเป็คตรัมของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ดังรูปที่ 3.29

เมื่อพิจารณาและเปรียบเทียบข้อมูลแมสสเป็คตรัมของการแตกตัวเป็นไอออนย่อยของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline (ไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline มีมวลต่อประจุเท่ากับ 112 amu) ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ ดังรูปที่ 3.29 สรุปได้ว่า ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ที่เหมาะสมต่อรูปแบบการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline อยู่ในช่วง 90-110 โวลท์ เนื่องจากค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์นี้ ทำให้ไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline เกิดขึ้นมาก และมี adduct ion เกิดขึ้นน้อยกว่าที่ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าอื่นๆ



รูปที่ 3.29 แมสสเปกตรัมของสารตั้งเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ



รูปที่ 3.29 (ต่อ) แมสสเปกตรัมของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ

### 3.13 การหาสภาวะที่เหมาะสมต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนโดยอิเล็กโตรสเปรย์ของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline โดยใช้เทคนิคโฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรี

เทคนิคโฟลอินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเป็คโตรเมตรีที่มีแหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันนั้นมีพารามิเตอร์ต่างๆ ที่มีผลต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารดังนี้ คือ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี อัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง ความดันที่เนบิวไลเซอร์ และอุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง ในการทดลองนี้จึงได้ทำการหาสภาวะที่เหมาะสมของการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline โดยเปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ต่างๆ ดังกล่าวข้างต้น และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15 และได้ผลการทดลองดังนี้

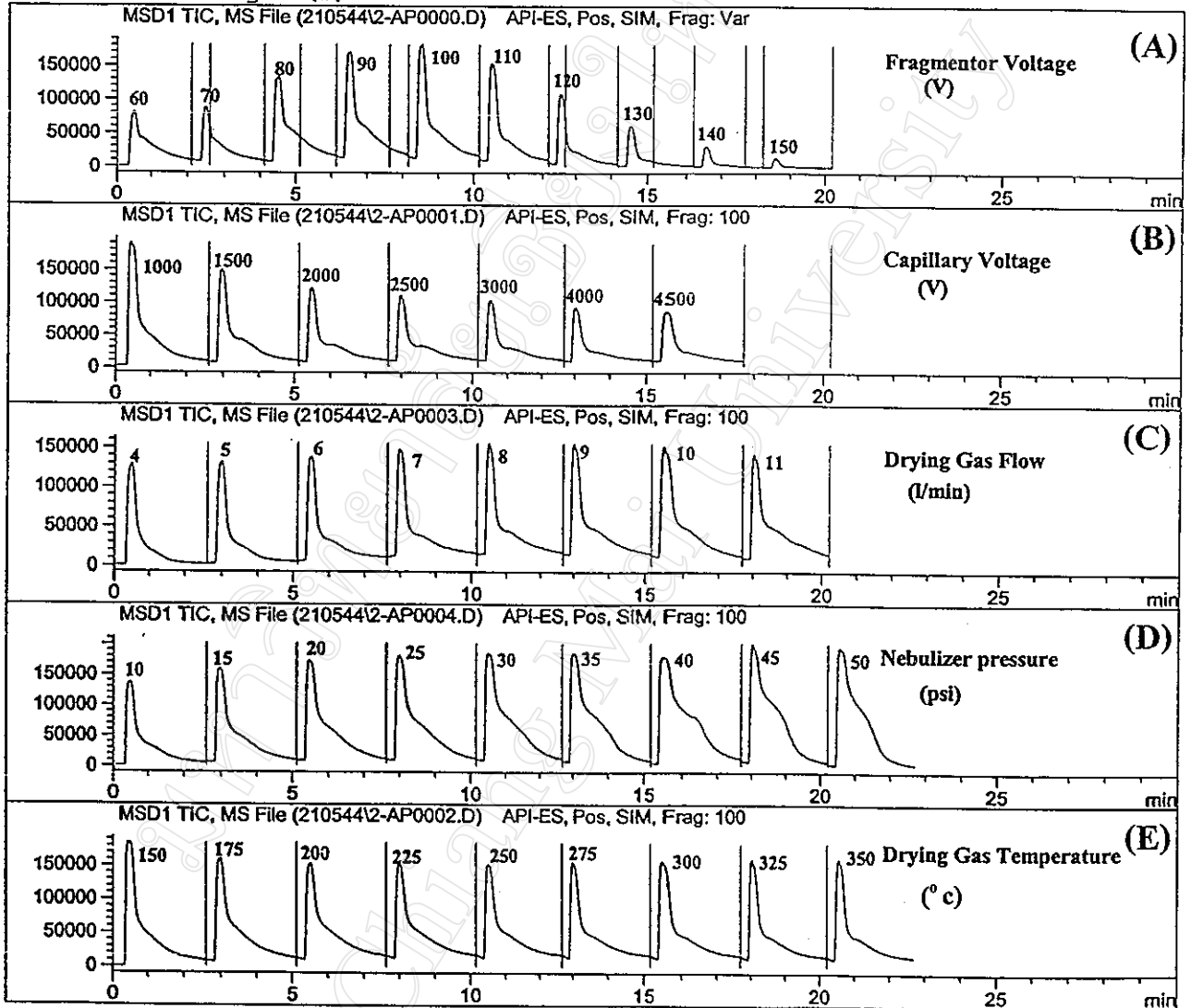
#### 3.13.1 ผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์

ในการศึกษาผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ตั้งแต่ 60-150 โวลต์ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15.1 ได้ผลดังแมสโครมาโทแกรมรูปที่ 3.30 และจากแมสโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.17 และรูปที่ 3.31

#### 3.13.2 ผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี

ในการศึกษาผลของความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารีต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารีตั้งแต่ 1000-4500 โวลต์ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15.2 ได้ผลดังแมสโครมาโทแกรมรูปที่ 3.30 และจากแมสโครมาโทแกรมที่ได้ ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.18 และรูปที่ 3.32

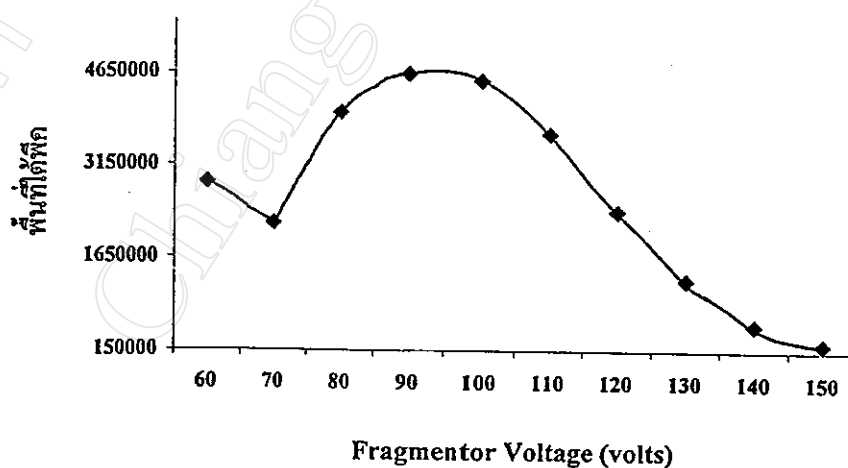
## Current Chromatogram(s)



รูปที่ 3.30 แมสโครมาโทแกรมของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline เมื่อเปลี่ยนค่า (A) ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่เฟรกเมนเตอร์ (B) ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี (C) อัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง (D) ความดันที่เนบิวไลเซอร์ และ (E) อุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง

ตารางที่ 3.17 พื้นที่ใต้พีคของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ต่างๆ

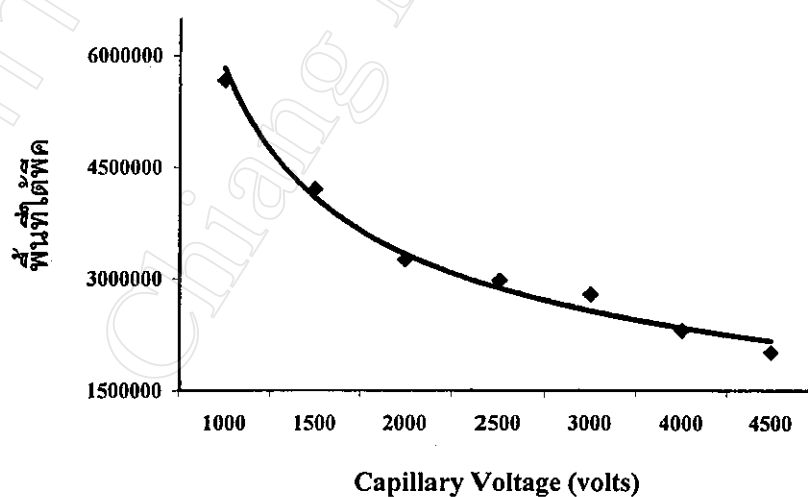
| ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์ (โวลต์) | พื้นที่ใต้พีค |
|-------------------------------------------|---------------|
| 60                                        | 2866686       |
| 70                                        | 2204435       |
| 80                                        | 4005359       |
| 90                                        | 4633651       |
| 100                                       | 4516584       |
| 110                                       | 3656359       |
| 120                                       | 2397729       |
| 130                                       | 1299771       |
| 140                                       | 572500        |
| 150                                       | 269883        |



รูปที่ 3.31 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ใต้พีคของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่แฟรกเมนเตอร์

ตารางที่ 3.18 พื้นที่ใต้พีคของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารีต่างๆ

| ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี (โวลต์) | พื้นที่ใต้พีค |
|-------------------------------------------|---------------|
| 1000                                      | 5669725       |
| 1500                                      | 4210049       |
| 2000                                      | 3261584       |
| 2500                                      | 2977463       |
| 3000                                      | 2790213       |
| 4000                                      | 2304854       |
| 4500                                      | 2015169       |



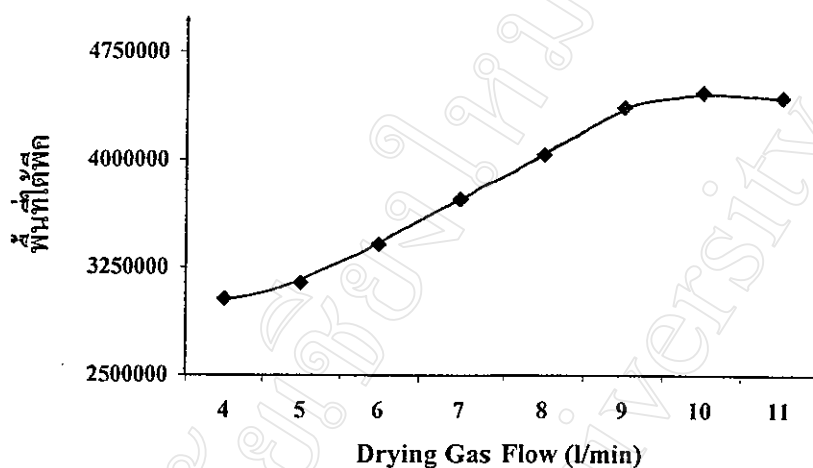
รูปที่ 3.32 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ใต้พีคของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และความต่างศักย์ไฟฟ้าที่คาปิลลารี

### 3.13.3 ผลการศึกษาอัตราการไหลของแก๊สออบแห้ง

ในการศึกษาผลของอัตราการไหลของแก๊สออบแห้งต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ได้ทำการทดลองเปลี่ยนอัตราการไหลของแก๊สออบแห้งตั้งแต่ 4-11 ลิตรต่อนาที และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15.3 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.30 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ใต้พีค ได้ผลดังตารางที่ 3.19 และรูปที่ 3.33

ตารางที่ 3.19 พื้นที่ใต้พีคของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่อัตราการไหลของแก๊สออบแห้งต่าง ๆ

| อัตราการไหลของแก๊สออบแห้ง (ลิตรต่อนาที) | พื้นที่ใต้พีค |
|-----------------------------------------|---------------|
| 4                                       | 3028277       |
| 5                                       | 3138598       |
| 6                                       | 3411521       |
| 7                                       | 3727955       |
| 8                                       | 4038309       |
| 9                                       | 4370261       |
| 10                                      | 4473495       |
| 11                                      | 4437897       |



รูปที่ 3.33 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ได้ฟักของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และอัตราการไหลของแก๊สอบแห้ง

#### 3.13.4 ผลการศึกษาความดันที่เนบิวไลเซอร์

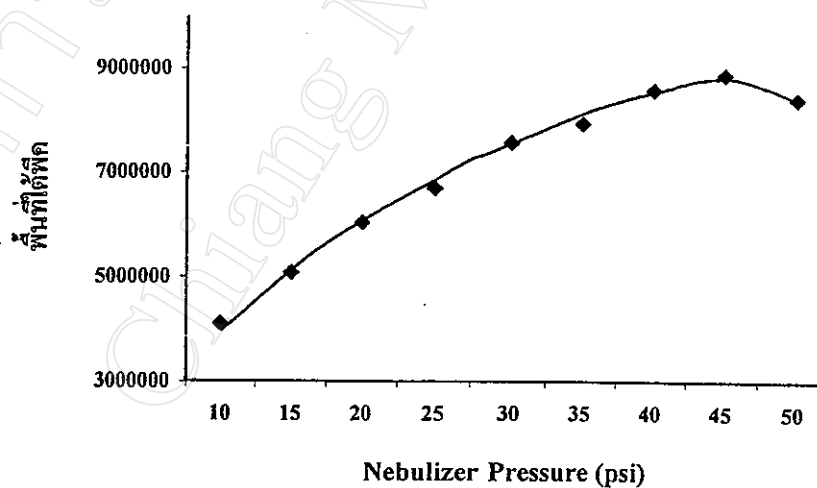
ในการศึกษาผลของความดันที่เนบิวไลเซอร์ต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ได้ทำการทดลองเปลี่ยนความดันที่เนบิวไลเซอร์ตั้งแต่ 10-50 พีเอสไอ และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15.4 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.30 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ได้ฟัก ได้ผลดังตารางที่ 3.20 และรูปที่ 3.34

#### 3.13.5 ผลการศึกษาอุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง

ในการศึกษาผลของอุณหภูมิของแก๊สอบแห้งต่อปริมาณการเกิดเป็นไอออนของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ได้ทำการทดลองเปลี่ยนค่าอุณหภูมิของแก๊สอบแห้งตั้งแต่ 260-350 องศาเซลเซียส และใช้สภาวะการทดลองดังการทดลองที่ 2.15.5 ได้ผลดังโครมาโทแกรมรูปที่ 3.30 และจากโครมาโทแกรมที่ได้ทำการหาพื้นที่ได้ฟัก ได้ผลดังตารางที่ 3.21 และรูปที่ 3.35

ตารางที่ 3.20 พื้นที่ที่ได้ฟุ้งของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่ความดันที่เนบิวไลเซอร์ต่างๆ

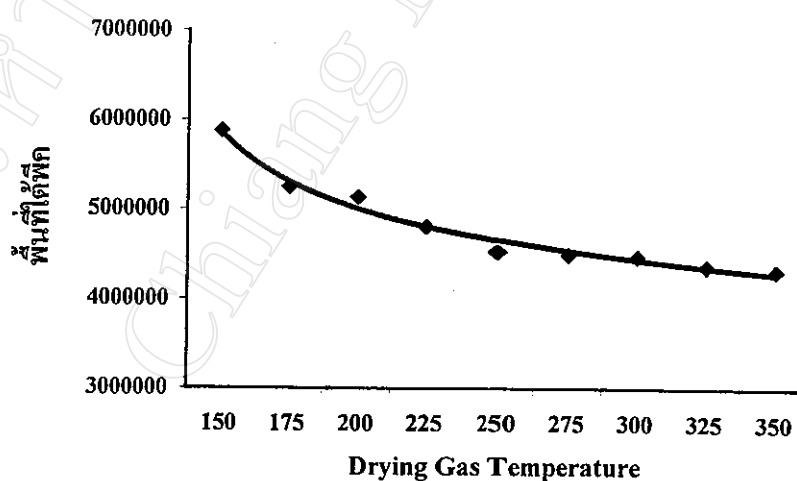
| ความดันที่เนบิวไลเซอร์ (พีเอสไอ) | พื้นที่ที่ได้ฟุ้ง |
|----------------------------------|-------------------|
| 10                               | 4106782           |
| 15                               | 5080210           |
| 20                               | 6035791           |
| 25                               | 6693989           |
| 30                               | 7563511           |
| 35                               | 7925237           |
| 40                               | 8576376           |
| 45                               | 8869257           |
| 50                               | 8405235           |



รูปที่ 3.34 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ที่ได้ฟุ้งของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และความดันที่เนบิวไลเซอร์

ตารางที่ 3.21 พื้นที่ผิวที่ได้ออกของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline ที่อุณหภูมิของแก๊สอบแห้งต่างๆ

| อุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง (องศาเซลเซียส) | พื้นที่ผิวที่ได้ออก |
|--------------------------------------|---------------------|
| 150                                  | 5875420             |
| 175                                  | 5248644             |
| 200                                  | 5132167             |
| 225                                  | 4807579             |
| 250                                  | 4527084             |
| 275                                  | 4488383             |
| 300                                  | 4472510             |
| 325                                  | 4365979             |
| 350                                  | 4317805             |

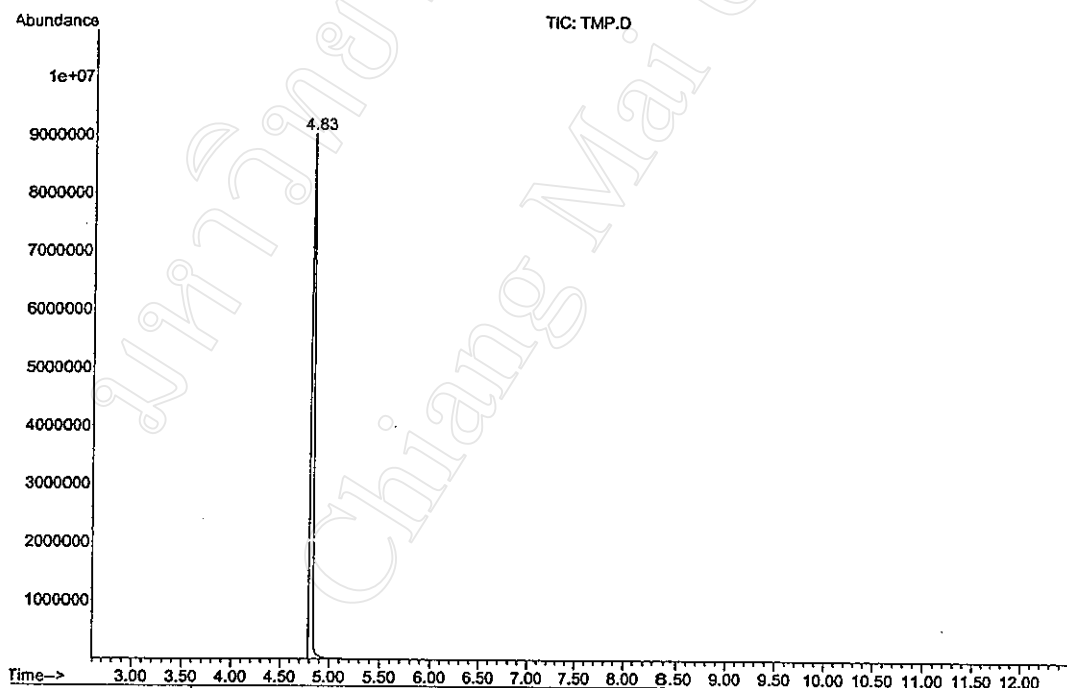


รูปที่ 3.35 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพื้นที่ผิวที่ได้ออกของสารสังเคราะห์ 2-acetyl-1-pyrroline และอุณหภูมิของแก๊สอบแห้ง

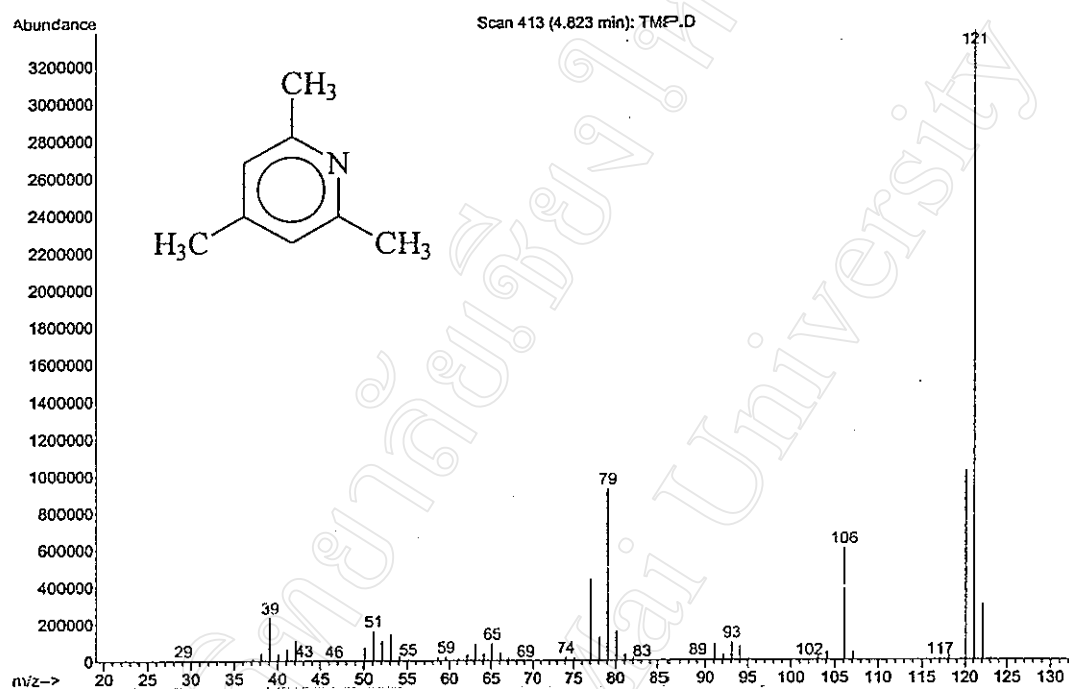
### 3.14 ผลการวิเคราะห์ปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ต่างๆ ที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร

#### 3.14.1 ผลการวิเคราะห์ความบริสุทธิ์ของสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี

จากการนำสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี ดังการทดลองที่ 2.16.1 ได้โครมาโทแกรมและแมสสเปกตรัมของ 2,4,6-trimethylpyridine แสดงในรูปที่ 3.36 และ 3.37 ตามลำดับ



รูปที่ 3.36 โครมาโทแกรมของสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine วิเคราะห์โดยใช้เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี



รูปที่ 3.37 แมสสเปกตรัมของสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine วิเคราะห์โดยใช้เทคนิค แก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี

### 3.14.2 ผลการทำกราฟมาตรฐาน

ในการทดลองนี้ได้วิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้วิธี internal standardization ซึ่งมีการ สังเคราะห์สารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline ขึ้น และใช้ 2,4,6-trimethylpyridine เป็นสารมาตรฐาน ภายใน เมื่อนำสารละลายผสมมาตรฐานซึ่งเตรียมดังการทดลองที่ 2.16.2 หัวข้อ (3) ที่ความเข้มข้น ต่างๆ มาวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคโพลินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชันแมสสเปกโตรเมตรีที่มี แหล่งกำเนิดไอออนเป็นแบบอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนไนเซชัน โดยมีสภาวะที่ใช้ในการทดลองดังการ ทดลองที่ 2.16.2 หัวข้อ (3) จากแมสโครมาโทแกรมของไอออนที่มวลต่อประจุเท่ากับ 112 ซึ่งเป็น

น้ำหนักโมเลกุลของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline ที่เกิดจากการรับโปรตอน และที่มวลต่อประจุเท่ากับ 122 ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine ที่เกิดจากการรับโปรตอนเช่นกัน ทำการหาพื้นที่ใต้พีคของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline และสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine สรุปได้ดังตารางที่ 3.22 และคำนวณหาอัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline ต่อสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine สรุปได้ดังตารางที่ 3.23

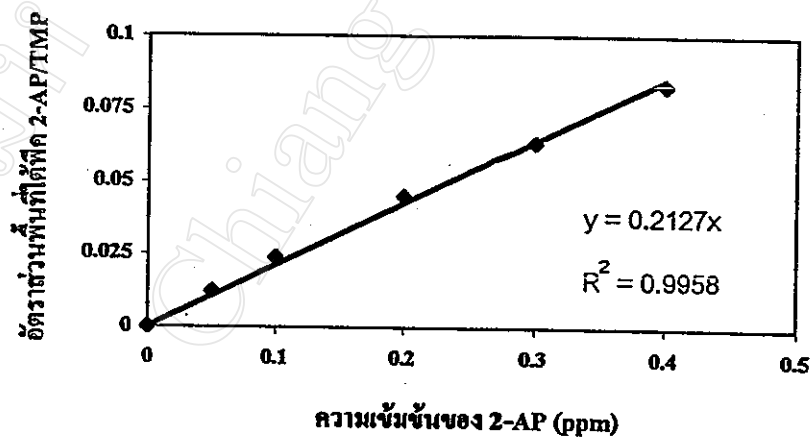
ตารางที่ 3.22 พื้นที่ใต้พีคของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline (2-AP) และสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine (TMP) ที่ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-acetyl-1-pyrroline

| ความเข้มข้นของ<br>2-AP (ppm) | พื้นที่ใต้พีค |         |            |         |            |         |
|------------------------------|---------------|---------|------------|---------|------------|---------|
|                              | ครั้งที่ 1    |         | ครั้งที่ 2 |         | ครั้งที่ 3 |         |
|                              | 2-AP          | TMP     | 2-AP       | TMP     | 2-AP       | TMP     |
| 0.05                         | 89631         | 7520402 | 89578      | 7152129 | 90199      | 7082519 |
| 0.10                         | 161453        | 6741725 | 159649     | 6685590 | 158468     | 6545585 |
| 0.20                         | 256730        | 5927015 | 276725     | 6005048 | 281083     | 6107164 |
| 0.30                         | 392935        | 5945881 | 460431     | 7673087 | 443902     | 6938330 |
| 0.40                         | 548715        | 6368864 | 517294     | 6472650 | 524842     | 6288514 |

ตารางที่ 3.23 อัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของสารมาตรฐาน 2-AP ต่อสารมาตรฐานภายใน TMP ที่ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-AP

| ความเข้มข้นของ 2-AP<br>(ppm) | อัตราส่วนพื้นที่ใต้พีค 2-AP ต่อ TMP |            |            |          |
|------------------------------|-------------------------------------|------------|------------|----------|
|                              | ครั้งที่ 1                          | ครั้งที่ 2 | ครั้งที่ 3 | เฉลี่ย   |
| 0.05                         | 0.011918                            | 0.012525   | 0.012736   | 0.012393 |
| 0.10                         | 0.023948                            | 0.023880   | 0.024210   | 0.024013 |
| 0.20                         | 0.043315                            | 0.046082   | 0.046025   | 0.045141 |
| 0.30                         | 0.066085                            | 0.060006   | 0.063978   | 0.063356 |
| 0.40                         | 0.086156                            | 0.079920   | 0.083461   | 0.083179 |

สร้างกราฟมาตรฐานโดยการพล็อตระหว่างอัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคเฉลี่ยของสารมาตรฐาน 2-AP ต่อสารมาตรฐานภายใน TMP และความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-AP ได้กราฟมาตรฐาน ดังรูปที่ 3.38



รูปที่ 3.38 กราฟมาตรฐานระหว่างอัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของสารมาตรฐาน 2-AP ต่อสารมาตรฐานภายใน TMP และความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 2-AP

### 3.14.3 ผลการหาปริมาณสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ต่างๆ ที่สกัดด้วยสารละลายกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 0.10 โมลต่อลิตร

ในการทดลองนี้ใช้ตัวอย่างเมล็ดข้าวจากแปลงเพาะปลูกต่างๆ กันดังนี้ คือ ข้าวกล้องพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 จากคณะเกษตรศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ จากภาควิชาพืชไร่ วิทยาเขตกำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และจาก ค.บ้านไผ่ อ. ราชบุรี จ.ร้อยเอ็ด ข้าวกล้องพันธุ์นางมลิ-เอส 4 ข้าวกล้องพันธุ์ กข 7 ข้าวสารพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 จากภาควิชาพืชไร่ วิทยาเขตกำแพงแสน มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ และข้าวเหนียวแพรว วิธีการสกัดสารหอมจากเมล็ดข้าวเพื่อนำไปหาปริมาณทำการทดลองดังรายละเอียดใน 2.16.3 และนำสารสกัดที่ได้ไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคฟิสิกส์อินเจกชันอิเล็กโตรสเปรย์ไอออนในเซชันแมสสเปกโตรเมตรี โดยมีสภาวะที่ใช้ดังการทดลองที่ 2.16.3 จาก total ion chromatogram ที่ได้ นำมาหาแมสโครมาโทแกรมของไอออนที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 112 ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนที่เกิดจากการรับโปรตอนของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline (peak no. 27 มีปริมาณคิดเป็นเปอร์เซ็นต์เท่ากับ 83.63) รวมกับสารที่มีมวลโมเลกุลเท่ากับสารหอม (peak no. 33 มีปริมาณคิดเป็นเปอร์เซ็นต์เท่ากับ 16.37) และหาแมสโครมาโทแกรมที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 122 ซึ่งเป็นน้ำหนักโมเลกุลของไอออนที่เกิดจากการรับโปรตอนของสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine ทำการหาพื้นที่ใต้พีค สรุปได้ดังตารางที่ 3.24

จากพื้นที่ใต้พีคของไอออนที่มีมวลต่อประจุเท่ากับ 112 (สารหอม 2-acetyl-1-pyrroline รวมกับ peak no. 33 ) นำมาหาพื้นที่ใต้พีคเฉพาะที่เป็นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline โดยเทียบจากเปอร์เซ็นต์ของสารหอมที่มีอยู่ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวดังกล่าว จากนั้นหาอัตราส่วนพื้นที่ใต้พีคของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ต่อสารมาตรฐานภายใน 2,4,6-trimethylpyridine สรุปได้ดังตารางที่ 3.25

ตารางที่ 3.24 พื้นที่ใต้พีคของไอออนที่  $m/z$  เท่ากับ 112 และ TMP ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ต่างๆ

| พันธุ์ข้าว                                                | น้ำหนัก<br>(กรัม) | พื้นที่ใต้พีค                 |           |
|-----------------------------------------------------------|-------------------|-------------------------------|-----------|
|                                                           |                   | ไอออนที่ $m/z$<br>เท่ากับ 112 | TMP       |
| 1. ข้าวเหนียวแพร์                                         | -                 | -                             | -         |
| 2. ข้าวพันธุ์ กข 7                                        | 1.0013            | 6937                          | 4563351.2 |
|                                                           | 1.0017            | 34172                         | 4000321.2 |
|                                                           | 1.0033            | 23409                         | 3178224.2 |
| 3. ข้าวสารพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ก.พ.ส.)               | 1.0001            | 54117                         | 2180572.1 |
|                                                           | 1.0010            | 59527                         | 2247031.2 |
|                                                           | 1.0012            | 67195                         | 2289716.1 |
| 4. ข้าวพันธุ์นางมล<br>เอส 4                               | 1.0006            | 144354                        | 3242535.2 |
|                                                           | 1.0014            | 186194                        | 2969148.2 |
|                                                           | 1.0012            | 177863                        | 3068461.2 |
| 5. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ต.บ้านไผ่<br>จ.ร้อยเอ็ด) | 1.0010            | 41584                         | 1971497   |
|                                                           | 1.0009            | 76622                         | 2558649.2 |
|                                                           | 1.0003            | 75435                         | 2440923.2 |
| 6. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (มข.)                     | 1.0004            | 53180                         | 2495092.2 |
|                                                           | 1.0007            | 78624                         | 2441650.9 |
|                                                           | 1.0014            | 79563                         | 2083719.8 |
| 7. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ก.พ.ส.)                  | 1.0005            | 46485                         | 2078438.1 |
|                                                           | 1.0010            | 42633                         | 1754891.4 |
|                                                           | 1.014             | 59435                         | 2201949.2 |

ตารางที่ 3.25 พื้นที่ได้ฟักและอัตราส่วนพื้นที่ได้ฟักของ 2-AP ต่อ TMP ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ต่างๆ

| พันธุ์ข้าว                                                | น้ำหนัก<br>(กรัม) | พื้นที่ได้ฟัก |           | อัตราส่วนพื้นที่ได้ฟัก<br>2-AP ต่อ TMP |
|-----------------------------------------------------------|-------------------|---------------|-----------|----------------------------------------|
|                                                           |                   | 2-AP          | TMP       |                                        |
| 1. ข้าวเหนียวแพร์                                         | -                 | -             | -         | -                                      |
| 2. ข้าวพันธุ์ กข. 7                                       | 1.0013            | 5801          | 4563351.2 | 0.0012712                              |
|                                                           | 1.0017            | 28578         | 4000321.2 | 0.0071439                              |
|                                                           | 1.0033            | 19577         | 3178224.2 | 0.0061597                              |
| 3. ข้าวสารพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ก.พ.ส)                | 1.0001            | 45258         | 2180572.1 | 0.020755                               |
|                                                           | 1.0010            | 49782         | 2247031.2 | 0.022154                               |
|                                                           | 1.0012            | 56195         | 2289716.1 | 0.024542                               |
| 4. ข้าวพันธุ์นางมล<br>เอส 4                               | 1.0006            | 120723        | 3242535.2 | 0.037231                               |
|                                                           | 1.0014            | 155714        | 2969148.2 | 0.052444                               |
|                                                           | 1.0012            | 148747        | 3068461.2 | 0.048476                               |
| 5. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ต.บ้านไผ่<br>จ.ร้อยเอ็ด) | 1.0010            | 34777         | 1971497   | 0.017640                               |
|                                                           | 1.0009            | 64079         | 2558649.2 | 0.025044                               |
|                                                           | 1.0003            | 63086         | 2440923.2 | 0.025845                               |
| 6. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 มช.                       | 1.0004            | 44474         | 2495092.2 | 0.017825                               |
|                                                           | 1.0007            | 65753         | 2441650.9 | 0.026930                               |
|                                                           | 1.0014            | 66539         | 2083719.8 | 0.031933                               |
| 7. ข้าวพันธุ์ขาวดอก<br>มะลิ 105 (ก.พ.ส)                   | 1.0005            | 38875         | 2078438.1 | 0.018704                               |
|                                                           | 1.0010            | 35654         | 1754891.4 | 0.020317                               |
|                                                           | 1.014             | 49705         | 2201949.2 | 0.022573                               |

จากกราฟมาตรฐานสามารถคำนวณหาความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดจากเมล็ดข้าวพันธุ์ต่างๆ ได้ดังนี้

จากตารางที่ 3.25 คำนวณหาความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในข้าวกล้องพันธุ์ กข 7 ครั้งที่ 1

$$\begin{aligned}\text{อัตราส่วนพื้นที่ที่ได้พีค} &= \text{พื้นที่ที่ได้พีค 2-AP} / \text{พื้นที่ที่ได้พีค TMP} \\ &= 0.0012712\end{aligned}$$

จากกราฟมาตรฐานสามารถคำนวณหาความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ได้จากสมการเส้นตรง  $Y = 0.2127 X$  เมื่อ  $Y$  คือ อัตราส่วนพื้นที่ที่ได้พีค และ  $X$  คือ ความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline

$$\begin{aligned}Y &= 0.2127 X \\ 0.0012712 &= 0.2127 X \\ X &= 0.0012712 / 0.2127 = 0.005976\end{aligned}$$

นั่นคือ ความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดข้าวเท่ากับ 0.005976 ppm

คำนวณแบบเดียวกันจะได้ ความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ในสารสกัดข้าว ในครั้งที่ 2 และ 3 คือ 0.03359 และ 0.02896 ppm ดังนั้นคิดเป็นความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline เฉลี่ย เท่ากับ  $(0.005976 + 0.03359 + 0.02896) / 3$  เท่ากับ 0.0228 ppm

จากตัวอย่างวิธีการคำนวณหาความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline ทำให้สามารถคำนวณหาความเข้มข้นของสารหอม 2-acetyl-1-pyrroline จากตัวอย่างข้าวอื่นๆได้ และสรุปได้ดังตารางที่ 3.26

ตารางที่ 3.26 ความเข้มข้นของสารหอม 2-AP ในตัวอย่างข้าวพันธุ์ต่างๆ

| พันธุ์ข้าว                               | ความเข้มข้นของ<br>2-AP (ppm) |
|------------------------------------------|------------------------------|
| 1. ข้าวเหนียวแพร์                        | -                            |
| 2. ข้าวพันธุ์ กข. 7                      | 0.0228                       |
| 3. ข้าวสารพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 (ก.พ.ส.) | 0.1057                       |
| 4. ข้าวพันธุ์นางมลิ-เอส 4                | 0.2165                       |
| 5. ข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 (ต.บ้านไผ่) | 0.1074                       |
| 6. ข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 (มช.)       | 0.1202                       |
| 7. ข้าวพันธุ์ข้าวดอกมะลิ 105 (ก.พ.ส)     | 0.0965                       |