NAME:1,3-Octadiene

COMMENT: RI=827.2, 14.0546 min ASCOMYCETE|RI:827.20

RI:827.20

CASNO:1002-33-1

RT:14.055

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 1000) ( 41 404) ( 53 133) ( 54 250) ( 65 352)

( 67 900) ( 68 351) ( 77 211) ( 79 375) ( 81 539)

(110 173)

NAME:2-Pyridinealdehyde

COMMENT: RI=967.8, 19.4728 min ASCOMYCETE|RI:967.80

RI:967.80

CASNO:1121-60-4

RT:19.473

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 5

( 50 236) ( 51 357) ( 52 368) ( 78 207) ( 79 1000)

NAME:Benzene, butyl-

COMMENT: RI=1065.8, 22.9166 min ASCOMYCETE|RI:1065.80

RI:1065.80

CASNO:104-51-8

RT:22.917

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 65 167) ( 77 152) ( 91 1000) ( 92 692) (105 160)

(134 364) (135 43)

NAME:Benzene, pentyl-

COMMENT: RI=1167.5, 26.2068 min ASCOMYCETE|RI:1167.50

RI:1167.50

CASNO:538-68-1

RT:26.207

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 21

( 39 36) ( 45 8) ( 51 27) ( 65 151) ( 66 12)

( 77 132) ( 78 98) ( 91 1000) ( 92 545) ( 93 84)

( 96 4) (102 11) (105 139) (106 47) (107 117)

(108 8) (115 27) (122 58) (133 89) (148 380)

(149 18)

NAME:2-(N-Methyl-N-ethylamino)phenol

COMMENT: RI=1207.3, 27.4367 min ASCOMYCETE|RI:1207.30

RI:1207.30

CASNO:23504-11-2

RT:27.437

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 24

( 38 16) ( 39 80) ( 43 54) ( 50 17) ( 51 24)

( 52 27) ( 53 119) ( 54 42) ( 55 5) ( 57 7)

( 67 19) ( 80 428) ( 81 92) ( 82 60) ( 85 4)

( 91 2) ( 95 50) (108 284) (109 335) (110 141)

(136 1000) (137 51) (151 215) (152 30)

NAME:Benzene, hexyl-

COMMENT: RI=1273.0, 29.3038 min ASCOMYCETE|RI:1273.00

RI:1273.00

CASNO:1077-16-3

RT:29.304

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 31

( 39 42) ( 40 4) ( 42 18) ( 45 6) ( 51 30)

( 52 8) ( 63 11) ( 65 134) ( 68 7) ( 71 7)

( 77 123) ( 78 84) ( 79 85) ( 80 30) ( 91 1000)

( 92 708) ( 94 38) ( 95 18) ( 98 2) (104 18)

(105 137) (108 8) (119 57) (121 35) (129 11)

(133 157) (134 43) (135 7) (162 418) (163 57)

(165 11)

NAME:Benzene, (1,3-dimethylbutyl)-

COMMENT: RI=1279.1, 29.4756 min ASCOMYCETE|RI:1279.10

RI:1279.10

CASNO:19219-84-2

RT:29.476

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 5

( 79 215) ( 91 278) (105 1000) (106 438) (162 458)

NAME:Benzene, heptyl-

COMMENT: RI=1375.5, 32.2146 min ASCOMYCETE|RI:1375.50

RI:1375.50

CASNO:1078-71-3

RT:32.215

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 30

( 39 50) ( 41 14) ( 51 24) ( 65 137) ( 69 5)

( 70 10) ( 77 59) ( 78 87) ( 79 65) ( 80 13)

( 89 28) ( 91 927) ( 92 1000) ( 93 37) ( 94 30)

(104 10) (105 100) (115 31) (117 75) (119 110)

(131 8) (133 143) (134 112) (147 77) (151 10)

(159 15) (161 22) (176 503) (177 80) (179 11)

NAME:Phenol, 4-methyl-

COMMENT: RI=1092.3, 23.8167 min BACTERIODETES|RI:1087.00

RI:1087.00

FORM:C7H8O

CASNO:106-44-5

RT:23.817

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 34

( 45 7) ( 50 55) ( 51 88) ( 53 27) ( 63 30)

( 64 5) ( 65 22) ( 67 13) ( 71 1) ( 74 15)

( 77 602) ( 79 343) ( 80 205) ( 85 6) ( 89 27)

( 90 66) ( 91 51) ( 93 27) ( 95 8) ( 99 1)

(106 25) (107 1000) (108 600) (109 46) (110 8)

(122 4) (124 5) (135 2) (148 5) (167 9)

(179 2) (211 1) (232 1) (269 1)

NAME:3-methylphenol

FORM:C7H8O

CASNO:108-39-4

RI:1111.9

RW:

RT:22.597

COMMENT: RI=1095.5, 23.9283 min BACTERIODETES|RI:1066.00

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 14

( 50 33) ( 51 109) ( 53 17) ( 61 7) ( 62 19)

( 68 29) ( 77 535) ( 79 293) ( 80 180) ( 81 39)

( 91 24) ( 96 39) (107 1000) (108 698)

NAME:Ethanone, 1-(1-methyl-1H-pyrrol-2-yl)-

COMMENT: RI=1085.5, 23.5879 min BACTERIODETES|RI:1085.50

RI:1085.50

CASNO:932-16-1

RT:23.588

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 6

( 50 64) ( 53 212) ( 80 629) (108 983) (123 1000)

(124 87)

NAME:Heptadecanitrile

COMMENT: RI=1978.0, 45.9797 min BACTERIODETES|RI:1978.00

RI:1978.00

CASNO:5399-02-0

RT:45.980

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 18

( 41 392) ( 57 413) ( 70 651) ( 79 275) ( 81 279)

( 82 548) ( 83 278) ( 84 449) ( 85 613) ( 93 327)

( 96 805) ( 97 462) (110 800) (124 491) (180 310)

(194 370) (208 1000) (236 836)

NAME:Pentadecane

COMMENT: RI=1495.5, 35.3031 min BASIDIOMYCETE|RI:1500.00

RI:1500.00

FORM:C15H32

CASNO:629-62-9

RT:35.303

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Microbial.MSL

NUM PEAKS: 21

( 39 298) ( 41 733) ( 43 527) ( 55 176) ( 56 126)

( 57 1000) ( 58 43) ( 69 140) ( 70 159) ( 71 867)

( 82 76) ( 83 131) ( 84 75) ( 85 667) ( 96 65)

( 97 126) ( 98 80) ( 99 220) (111 78) (112 63)

(113 96)

NAME:Phenol, 4-ethyl-2-methoxy- (Ethylguaiacol)

COMMENT: 31.278 min SF1-LF.FIN|RI:1294.00

RI:1294.00

FORM:C9H12O2

CASNO:2785-89-9

RT:31.278

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 42

( 39 37) ( 42 3) ( 43 8) ( 45 2) ( 50 14)

( 51 29) ( 52 7) ( 53 13) ( 65 37) ( 66 22)

( 77 62) ( 78 14) ( 79 45) ( 80 7) ( 81 33)

( 82 14) ( 85 4) ( 91 92) ( 92 8) ( 93 10)

( 94 73) (105 17) (108 6) (109 26) (110 8)

(117 17) (119 48) (121 20) (122 105) (124 12)

(129 7) (133 2) (135 15) (136 6) (137 1000)

(138 87) (139 10) (144 8) (145 2) (151 12)

(152 463) (153 79)

NAME:Benzofuran, 2,3-dihydro-

COMMENT: 29.563 min SF1-LF.FIN|RI:1237.00

RI:1237.00

FORM:C8H8O

CASNO:496-16-2

RT:29.563

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 71) ( 41 8) ( 43 13) ( 50 39) ( 51 69)

( 53 33) ( 55 18) ( 63 79) ( 65 142) ( 77 38)

( 89 76) ( 90 22) ( 91 919) ( 92 186) ( 94 90)

(105 45) (119 291) (120 1000) (121 135)

NAME:Furan, 2,5-dimethyl-

COMMENT: 10.638 min SF1-LF.FIN|RI:706.00

RI:706.00

FORM:C6H8O

CASNO:625-86-5

RT:10.638

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 43 199) ( 49 22) ( 50 159) ( 51 164) ( 53 603)

( 54 38) ( 65 201) ( 67 156) ( 81 209) ( 95 1000)

( 96 820)

NAME:Furan, 2,4-dimethyl-

FORM:C6H8O

CASNO:3710-43-8

RI:983.2

RW:

RT:21.122

COMMENT: 10.983 min SF1-LF.FIN|RI:715.00

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 643) ( 41 315) ( 50 231) ( 53 400) ( 65 571)

( 67 638) ( 81 752) ( 95 848) ( 96 1000)

NAME:Toluene

COMMENT: 13.252 min SF1-LF.FIN|RI:770.00

RI:770.00

FORM:C7H8

CASNO:108-88-3

RT:13.252

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 38 11) ( 39 57) ( 50 50) ( 51 48) ( 62 24)

( 63 50) ( 65 135) ( 89 38) ( 91 1000) ( 92 400)

( 93 21)

NAME:3-Furaldehyde

COMMENT: 15.440 min SF1-LF.FIN|RI:827.00

RI:827.00

FORM:C5H4O2

CASNO:498-60-2

RT:15.440

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 36 7) ( 37 91) ( 38 112) ( 39 346) ( 40 13)

( 49 15) ( 50 40) ( 51 18) ( 53 18) ( 67 214)

( 95 1000) ( 96 329) ( 97 31)

NAME:2-Furanmethanol

COMMENT: 16.859 min SF1-LF.FIN|RI:865.00

RI:865.00

FORM:C5H6O2

CASNO:98-00-0

RT:16.859

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 38 195) ( 39 1000) ( 41 674) ( 42 666) ( 50 334)

( 51 329) ( 52 96) ( 53 554) ( 69 464) ( 70 251)

( 81 467) ( 97 808) ( 98 589)

NAME:Ethylbenzene

COMMENT: 17.107 min SF1-LF.FIN|RI:867.00

RI:867.00

FORM:C8H10

CASNO:100-41-4

RT:17.107

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 50 52) ( 51 89) ( 65 131) ( 77 88) ( 78 61)

( 79 42) ( 89 26) ( 91 1000) ( 92 67) (103 33)

(106 240)

NAME:2,5-dimethylpyrrole

COMMENT: 17.291 min SF1-LF.FIN|RI:872.00

RI:872.00

FORM:C6H9N

CASNO:625-84-3

RT:17.291

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 54 97) ( 65 142) ( 67 162) ( 78 300) ( 93 207)

( 94 1000) ( 95 783) ( 96 161)

NAME:2(3H)-Furanone, 5-methyl-

COMMENT: 17.542 min SF1-LF.FIN|RI:880.00

RI:880.00

FORM:C5H6O2

CASNO:591-12-8

RT:17.542

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 37 27) ( 38 29) ( 39 63) ( 40 26) ( 42 144)

( 43 272) ( 44 53) ( 50 78) ( 55 1000) ( 56 40)

( 69 31) ( 70 68) ( 98 850) ( 99 46)

NAME:2H-Pyran-2-one

COMMENT: 18.222 min SF1-LF.FIN|RI:898.80

RI:898.80

CASNO:504-31-4

RT:18.222

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 39 524) ( 40 265) ( 42 319) ( 50 231) ( 68 1000)

( 96 475)

NAME:Styrene

COMMENT: 18.414 min SF1-LF.FIN|RI:900.00

RI:900.00

FORM:C8H8

CASNO:100-42-5

RT:18.414

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 22

( 38 25) ( 43 90) ( 50 221) ( 51 241) ( 52 62)

( 53 35) ( 55 50) ( 62 45) ( 63 81) ( 73 16)

( 74 94) ( 75 54) ( 76 56) ( 77 350) ( 78 1000)

( 79 61) ( 89 16) ( 97 50) (102 122) (103 439)

(104 897) (105 80)

NAME:Furan, 2-ethyl-5-methyl-

COMMENT: 19.160 min SF1-LF.FIN|RI:799.00

RI:799.00

FORM:C7H10O

CASNO:1703-52-2

RT:19.160

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 37 38) ( 38 41) ( 39 210) ( 51 46) ( 53 24)

( 67 65) ( 81 34) ( 95 1000) ( 96 56) (110 238)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 19.346 min SF1-LF.FIN|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 43 142) ( 50 137) ( 51 133) ( 52 40) ( 53 156)

( 61 10) ( 81 143) (109 1000) (110 669)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 21.139 min SF1-LF.FIN|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 50) ( 49 15) ( 50 126) ( 51 146) ( 53 440)

( 54 21) ( 81 119) (109 1000) (110 695) (111 66)

NAME:1H-Pyrrole-2-carboxaldehyde

COMMENT: 23.038 min SF1-LF.FIN|RI:1032.00

RI:1032.00

FORM:C5H5NO

CASNO:1003-29-8

RT:23.038

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 37 121) ( 38 142) ( 39 502) ( 66 651) ( 94 1000)

( 95 908)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl-

COMMENT: 23.384 min SF1-LF.FIN|RI:1041.00

RI:1041.00

FORM:C6H8O2

CASNO:80-71-7

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 37 41) ( 38 45) ( 39 567) ( 40 25) ( 41 457)

( 42 35) ( 43 135) ( 50 103) ( 51 31) ( 53 74)

( 55 372) ( 56 155) ( 57 11) ( 65 99) ( 66 72)

( 69 197) ( 70 85) ( 71 12) ( 83 261) ( 84 842)

( 85 51) ( 97 78) (105 17) (112 1000) (113 47)

NAME:Methyl 2-furoate

COMMENT: 25.437 min SF1-LF.FIN|RI:985.00

RI:985.00

CASNO:611-13-2

RT:25.437

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 36) ( 38 64) ( 39 228) ( 51 65) ( 95 1000)

( 96 260) (126 110) (129 24)

NAME:Phenol, 2-methoxy- (Guaiacol)

COMMENT: 25.517 min SF1-LF.FIN|RI:1102.00

RI:1102.00

FORM:C7H8O2

CASNO:90-05-1

RT:25.517

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 64) ( 50 95) ( 51 129) ( 52 55) ( 53 228)

( 63 42) ( 81 921) ( 82 53) (109 932) (110 63)

(124 1000) (125 86)

NAME:4H-Pyran-4-one, 3-hydroxy-2-methyl-

COMMENT: 26.401 min SF1-LF.FIN|RI:1132.00

RI:1132.00

FORM:C6H6O3

CASNO:118-71-8

RT:26.401

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 10) ( 39 35) ( 41 34) ( 42 18) ( 43 158)

( 50 31) ( 51 30) ( 52 55) ( 53 62) ( 54 10)

( 55 95) ( 56 17) ( 69 106) ( 70 21) ( 71 170)

( 80 10) ( 81 7) ( 97 231) ( 98 37) (108 11)

(126 1000) (127 69)

NAME:Levoglucosenone

COMMENT: 26.569 min SF1-LF.FIN|RI:1136.00

RI:1136.00

FORM:C5H6O2

CASNO:37112-31-5

RT:26.569

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 111) ( 38 130) ( 39 758) ( 40 205) ( 41 237)

( 42 429) ( 43 109) ( 50 204) ( 51 230) ( 52 150)

( 53 413) ( 55 85) ( 68 1000) ( 69 179) ( 70 117)

( 96 218) ( 97 703) ( 98 516)

NAME:Phenol, 3,4-dimethyl-

COMMENT: 27.368 min SF1-LF.FIN|RI:1178.00

RI:1178.00

FORM:C8H10O

CASNO:95-65-8

RT:27.368

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 24

( 43 54) ( 58 14) ( 69 23) ( 71 18) ( 77 290)

( 78 59) ( 79 202) ( 80 24) ( 82 21) ( 84 20)

( 91 106) ( 93 30) ( 94 18) ( 97 20) (101 34)

(106 97) (107 1000) (108 80) (121 264) (122 546)

(123 55) (124 22) (134 64) (144 49)

NAME:Benzyl nitrile

COMMENT: 27.412 min SF1-LF.FIN|RI:1153.00

RI:1153.00

FORM:C8H7N

CASNO:140-29-4

RT:27.412

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 89 634) ( 90 1000) (116 385) (117 743)

NAME:Phenol, 4-ethyl-

COMMENT: 27.897 min SF1-LF.FIN|RI:27.90

RI:27.90

CASNO:123-07-9

RT:27.897

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 30

( 37 3) ( 38 17) ( 45 5) ( 50 21) ( 51 50)

( 52 12) ( 53 9) ( 55 16) ( 63 16) ( 65 17)

( 70 4) ( 71 8) ( 74 11) ( 77 372) ( 78 43)

( 79 66) ( 80 8) ( 81 19) ( 85 26) ( 91 103)

( 94 11) ( 95 14) ( 99 6) (105 30) (107 1000)

(108 100) (115 8) (121 25) (122 367) (123 45)

NAME:Phenol, 2-methoxy-4-methyl- (Methylguaiacol)

COMMENT: 28.778 min SF1-LF.FIN|RI:1206.00

RI:1206.00

FORM:C8H10O2

CASNO:93-51-6

RT:28.778

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 39 92) ( 41 58) ( 50 37) ( 55 31) ( 65 181)

( 66 55) ( 67 308) ( 77 136) ( 78 77) ( 95 377)

(106 48) (123 802) (124 61) (138 1000) (139 94)

NAME:Indole

COMMENT: 32.226 min SF1-LF.FIN|RI:1328.00

RI:1328.00

FORM:C8H7N

CASNO:120-72-9

RT:32.226

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 63 114) ( 89 600) ( 90 532) (117 1000) (118 99)

NAME:Phenol, 2-Methoxy-4-vinyl- (Vinylguaiacol)

COMMENT: 32.434 min SF1-LF.FIN|RI:1335.00

RI:1335.00

FORM:C9H10O2

CASNO:7786-61-0

RT:32.434

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 50 34) ( 51 76) ( 52 18) ( 77 373) ( 78 51)

( 79 174) ( 89 39) ( 91 38) (107 473) (108 41)

(135 728) (136 75) (150 1000) (151 109)

NAME:Eugenol

COMMENT: 33.511 min SF1-LF.FIN|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 55 124) ( 77 242) ( 91 279) ( 93 96) (103 287)

(104 210) (105 138) (121 243) (131 361) (132 212)

(133 203) (149 395) (164 1000) (165 131)

NAME:4(1H)-Pyridinone, 2,3-dihydro-1-methyl-

COMMENT: 33.645 min SF1-LF.FIN|RI:1111.00

RI:1111.00

FORM:C6H9NO

CASNO:35488-00-7

RT:33.645

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

( 68 119) ( 82 590) (111 1000)

NAME:Phenol, 2-methoxy-4-propyl-

COMMENT: 33.756 min SF1-LF.FIN|RI:1382.00

RI:1382.00

FORM:C10H14O2

CASNO:2785-87-7

RT:33.756

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 21

( 50 15) ( 51 21) ( 52 20) ( 53 23) ( 65 59)

( 66 25) ( 77 44) ( 79 61) ( 91 97) ( 94 86)

(105 31) (106 30) (109 22) (122 125) (134 10)

(137 1000) (138 87) (143 19) (148 40) (151 21)

(166 322)

NAME:Vanillin

COMMENT: 34.997 min SF1-LF.FIN|RI:1430.00

RI:1430.00

FORM:C8H8O3

CASNO:121-33-5

RT:34.997

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 39 19) ( 41 16) ( 43 7) ( 50 33) ( 51 61)

( 52 45) ( 53 48) ( 62 13) ( 65 36) ( 67 26)

( 73 10) ( 74 7) ( 77 54) ( 79 21) ( 80 20)

( 81 152) ( 93 10) ( 95 9) (108 56) (109 130)

(123 225) (124 16) (151 1000) (152 894) (153 96)

NAME:Isoeugenol

COMMENT: 36.155 min SF1-LF.FIN|RI:1476.00

RI:1476.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-54-1

RT:36.155

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 20

( 51 57) ( 55 107) ( 65 45) ( 77 166) ( 78 53)

( 79 55) ( 91 217) ( 93 73) (103 224) (104 151)

(105 90) (107 67) (121 199) (131 267) (132 95)

(133 155) (147 38) (149 282) (164 1000) (165 101)

NAME:Acetovanillone

COMMENT: 37.208 min SF1-LF.FIN|RI:1518.00

RI:1518.00

FORM:C9H10O3

CASNO:498-02-2

RT:37.208

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 39 30) ( 41 19) ( 43 10) ( 50 34) ( 51 43)

( 52 33) ( 53 15) ( 55 15) ( 63 18) ( 65 30)

( 67 23) ( 69 10) ( 77 62) ( 79 6) ( 93 26)

( 97 2) (108 57) (109 12) (121 19) (123 278)

(136 27) (151 1000) (152 100) (166 427) (167 38)

NAME:Vanillic Acid, methyl ester

COMMENT: 37.872 min SF1-LF.FIN|RI:1544.00

RI:1544.00

FORM:C9H10O4

CASNO:3943-74-6

RT:37.872

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 50 29) ( 65 43) (111 55) (123 156) (151 1000)

(152 110) (182 609)

NAME:Guaiacylacetone

COMMENT: 38.156 min SF1-LF.FIN|RI:1555.00

RI:1555.00

FORM:C10H12O3

CASNO:2503-46-0

RT:38.156

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 94 109) (122 184) (137 1000) (138 112) (180 254)

NAME:Vanillic acid

COMMENT: 38.901 min SF1-LF.FIN|RI:1467.00

RI:1467.00

FORM:C8H8O4

CASNO:121-34-6

RT:38.901

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 97 338) (125 322) (153 712) (168 1000)

NAME:1-Heptene

COMMENT: 9.963 min WM3-LF.FIN|RI:688.00

RI:688.00

FORM:C7H14

CASNO:592-76-7

RT:9.963

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 1000) ( 41 839) ( 42 114) ( 53 73) ( 55 365)

( 56 180) ( 57 56) ( 67 110) ( 69 131) ( 70 237)

NAME:????1-Hexene, 3-methyl-

COMMENT: 13.954 min WM3-LF.FIN|RI:803.10

RI:803.10

FORM:C7H14

CASNO:3404-61-3

RT:13.954

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 1000) ( 40 75) ( 41 853) ( 42 140) ( 55 893)

( 56 198) ( 65 47) ( 67 326) ( 69 229) ( 70 118)

( 83 256) ( 84 68)

NAME:Pyrrole

COMMENT: 12.358 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:757.00

RI:757.00

FORM:C4H5N

CASNO:109-97-7

RT:12.358

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 69) ( 38 64) ( 39 278) ( 40 61) ( 41 298)

( 66 18) ( 67 1000) ( 68 52)

NAME:Benzene, propyl-

COMMENT: 20.440 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:962.00

RI:962.00

FORM:C9H12

CASNO:103-65-1

RT:20.440

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 65 153) ( 78 120) ( 89 37) ( 91 1000) ( 92 129)

(105 118) (115 44) (120 366)

NAME:Phenol

COMMENT: 20.831 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 204) ( 40 49) ( 50 56) ( 51 56) ( 62 48)

( 63 86) ( 65 430) ( 66 666) ( 94 1000)

NAME:Benzofuran

COMMENT: 22.258 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1011.00

RI:1011.00

FORM:C8H6O

CASNO:271-89-6

RT:22.258

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 121) ( 62 80) ( 63 180) ( 89 426) ( 90 387)

( 94 322) (106 40) (109 122) (118 1000) (119 96)

NAME:Acetophenone

COMMENT: 23.008 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1084.00

RI:1084.00

FORM:C8H8O

CASNO:98-86-2

RT:22.2177

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 51 66) ( 77 311) ( 79 297) ( 91 305) (105 1000)

(120 462)

NAME:Indane

COMMENT: 23.227 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1006.00

RI:1006.00

FORM:C9H10

CASNO:496-11-7

RT:23.227

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 51 70) ( 63 81) ( 77 168) ( 79 198) ( 80 72)

( 89 71) ( 91 156) (108 83) (115 662) (116 107)

(117 1000) (118 557) (119 70)

NAME:3-methylphenol

FORM:C7H8O

CASNO:108-39-4

RI:1111.9

RW:

RT:22.597

COMMENT: 23.729 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1066.00

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 50 112) ( 51 180) ( 63 91) ( 77 743) ( 78 123)

( 79 839) ( 80 254) ( 89 142) ( 90 131) (107 790)

(108 1000)

NAME:Phenol, 4-ethyl-

COMMENT: Phenol, 4-ethyl-|RI:27.90

RI:27.90

CASNO:123-07-9

RT:27.897

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 31) ( 51 40) ( 77 308) ( 78 39) ( 79 76)

( 91 74) (107 1000) (108 75) (122 313)

NAME:C10H10

COMMENT: 27.515 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN

FORM:C1OH10

CASNO:C10H10

RT:27.605

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 42 81) ( 50 82) ( 51 162) ( 63 77) ( 75 63)

( 91 144) (102 86) (105 438) (115 783) (116 62)

(119 109) (126 111) (127 253) (128 563) (129 1000)

(130 940)

NAME:1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-

COMMENT: 31.776 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1317.00

RI:1317.00

FORM:C9H8O

CASNO:83-33-0

RT:31.776

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 50 133) ( 63 82) ( 76 114) ( 77 258) ( 78 711)

(103 418) (104 702) (131 329) (132 1000)

NAME:Methylindole

COMMENT: 34.690 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1422.00

RI:1422.00

FORM:C9H9N

CASNO:83-34-1

RT:34.690

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 51 47) ( 77 130) (102 48) (103 94) (128 96)

(130 1000) (131 536)

NAME:2H-1-Benzopyran-2-one

COMMENT: 36.324 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1495.00

RI:1495.00

FORM:C9H6O2

CASNO:91-64-5

RT:36.324

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 89 359) ( 90 393) (118 1000) (146 977)

NAME:Phenylpyridine

COMMENT: 36.814 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1505.00

RI:1505.00

FORM:C11H9N

CASNO:1008-88-4

RT:36.814

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 24

( 50 27) ( 51 38) ( 63 32) ( 74 19) ( 76 38)

( 77 30) ( 78 22) (101 18) (102 61) (119 24)

(121 17) (126 59) (127 211) (128 108) (129 34)

(138 11) (145 37) (153 13) (154 626) (155 1000)

(156 137) (162 40) (163 13) (176 22)

NAME:Fluorene

COMMENT: 40.041 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1637.00

RI:1637.00

FORM:C13H10

CASNO:86-73-7

RT:40.041

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 42

( 39 8) ( 63 17) ( 67 8) ( 68 10) ( 75 20)

( 77 28) ( 81 18) ( 82 33) ( 83 22) ( 89 35)

(109 12) (111 9) (120 10) (122 15) (123 6)

(127 8) (139 58) (144 13) (146 27) (147 9)

(150 26) (152 33) (153 63) (154 10) (157 7)

(159 20) (160 17) (163 204) (164 203) (165 1000)

(166 964) (167 89) (169 13) (172 13) (173 18)

(177 17) (179 21) (180 4) (181 21) (184 50)

(188 7) (191 12)

NAME:1-hexadecene, 6-ethyl?

COMMENT: 47.614 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1988.20

RI:1988.20

CASNO:3452-07-1

RT:47.614

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 22

( 39 276) ( 41 552) ( 43 168) ( 55 646) ( 57 406)

( 66 49) ( 67 309) ( 69 586) ( 70 240) ( 71 197)

( 81 301) ( 82 255) ( 83 706) ( 84 155) ( 96 294)

( 97 1000) ( 99 56) (111 639) (112 91) (124 155)

(125 299) (139 156)

NAME:Furan, 3-methyl-

COMMENT: 6.910 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:614.00

RI:614.00

FORM:C5H6O

CASNO:930-27-8

RT:6.910

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 38 58) ( 39 459) ( 43 915) ( 49 55) ( 50 309)

( 51 223) ( 53 565) ( 54 160) ( 57 191) ( 81 887)

( 82 1000)

NAME:Styrene

COMMENT: 18.483 min DM3.FIN|RI:900.00

RI:900.00

FORM:C8H8

CASNO:100-42-5

RT:18.414

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 40) ( 50 93) ( 51 141) ( 63 45) ( 76 46)

( 77 299) ( 78 734) ( 79 82) ( 91 400) (102 106)

(103 518) (104 1000) (105 179) (106 248)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 51 92) ( 52 37) ( 53 401) ( 81 155) (109 916)

(110 1000)

NAME:Benzaldehyde

COMMENT: 21.422 min DM3.FIN|RI:980.00

RI:980.00

FORM:C7H6O

CASNO:100-52-7

RT:21.422

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 42 20) ( 50 81) ( 51 172) ( 62 33) ( 63 54)

( 73 25) ( 74 30) ( 76 42) ( 77 461) ( 78 90)

( 83 16) ( 92 6) ( 93 40) (103 8) (105 1000)

(106 421) (107 105) (110 7)

NAME:Furan, 3-methyl-

COMMENT: Furan, 3-methyl-|RI:614.00

RI:614.00

FORM:C5H6O

CASNO:930-27-8

RT:6.910

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 37 81) ( 39 377) ( 43 544) ( 49 69) ( 50 306)

( 51 250) ( 53 638) ( 54 175) ( 57 127) ( 81 974)

( 82 1000) ( 83 72)

NAME:Ethylbenzene

COMMENT: 16.824 min AG1\_040726114128.FIN|RI:867.00

RI:867.00

FORM:C8H10

CASNO:100-41-4

RT:17.107

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 39 50) ( 50 48) ( 51 76) ( 62 23) ( 63 48)

( 65 142) ( 77 161) ( 78 89) ( 79 64) ( 89 25)

( 91 1000) ( 92 93) (103 47) (105 65) (106 410)

(107 39)

NAME:Dimethylpyrrole (2,5 or 2,4)

COMMENT: 19.244 min AG1\_040726114128.FIN

CASNO:19.24

RT:19.244

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 65 84) ( 67 93) ( 78 180) ( 80 123) ( 93 168)

( 94 1000) ( 95 625)

NAME:C3-Alkylbenzene

COMMENT: 21.980 min AG1\_040726114128.FIN

CASNO:21.98

RT:21.980

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 137) ( 41 96) ( 51 49) ( 65 79) ( 67 89)

( 77 147) ( 78 50) ( 79 249) ( 91 143) ( 93 45)

( 95 109) ( 96 67) (105 1000) (106 67) (119 60)

(120 425) (121 113)

NAME:Phenol, 2,6-dimethoxy-4-(2-propenyl)-

COMMENT: 42.068 min AG1\_040726114128.FIN|RI:1741.00

RI:1741.00

CASNO:6627-88-9

RT:42.079

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 55

( 39 57) ( 51 16) ( 55 47) ( 65 73) ( 68 14)

( 77 76) ( 79 21) ( 81 87) ( 83 13) ( 85 26)

( 91 259) ( 92 40) ( 93 22) ( 99 5) (103 74)

(105 103) (108 42) (109 15) (116 64) (117 21)

(120 58) (121 54) (125 6) (128 5) (129 24)

(130 46) (131 235) (132 76) (134 85) (144 55)

(147 97) (148 43) (149 22) (151 131) (157 54)

(158 27) (159 20) (161 53) (162 65) (163 125)

(164 37) (165 17) (166 15) (170 22) (171 48)

(172 29) (173 19) (174 37) (175 58) (177 49)

(179 137) (185 10) (193 36) (194 1000) (195 80)

NAME:Furan, 2,4-dimethyl-

FORM:C6H8O

CASNO:3710-43-8

RI:983.2

RW:

RT:21.122

COMMENT: Unknown6|RI:715.00

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 39 327) ( 53 175) ( 65 396) ( 67 477) ( 95 629)

( 96 1000)

NAME:Furan, 2,4-dimethyl-

FORM:C6H8O

CASNO:3710-43-8

RI:983.2

RW:

RT:21.122

COMMENT: 21.137 min AG1\_040726114128.FIN|RI:715.00

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 50) ( 38 62) ( 39 504) ( 41 163) ( 53 459)

( 63 58) ( 65 355) ( 67 762) ( 68 69) ( 81 526)

( 95 864) ( 96 1000) ( 97 112)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl-

COMMENT: 33.607 min DM1\_040728112623.FIN|RI:1041.00

RI:1041.00

FORM:C6H8O2

CASNO:80-71-7

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 123) ( 41 295) ( 43 203) ( 55 317) ( 56 176)

( 69 353) ( 83 185) ( 84 140) (112 1000)

NAME:Phenol

COMMENT: Phenol|RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 37 33) ( 38 31) ( 39 227) ( 40 61) ( 50 55)

( 51 40) ( 55 31) ( 61 22) ( 62 56) ( 63 93)

( 65 456) ( 66 672) ( 67 45) ( 74 28) ( 75 12)

( 94 1000) ( 95 78)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 39 153) ( 43 214) ( 50 127) ( 51 117) ( 53 160)

( 81 154) (109 1000) (110 820)

NAME:Phenol, 2,6-dimethoxy- (Syringol)

COMMENT: Phenol, 2,6-dimethoxy- (Syringol)|RI:1370.00

RI:1370.00

FORM:C8H10O3

CASNO:91-10-1

RT:33.282

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 39 67) ( 50 28) ( 52 28) ( 53 45) ( 65 310)

( 68 52) ( 93 348) ( 96 152) (109 50) (111 160)

(124 57) (125 33) (139 452) (154 1000) (155 84)

NAME:Eugenol

COMMENT: 33.519 min AG1-LF\_040901180114.FIN|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 55 131) ( 77 160) ( 79 92) ( 91 286) (103 313)

(104 209) (105 150) (121 263) (122 87) (131 323)

(132 257) (133 256) (137 125) (149 404) (164 1000)

(165 135)

NAME:Phenol, 4-methyl-2,6-dimethoxy- (Methylsyringol)

COMMENT: 35.897 min AG1-LF\_040901180114.FIN|RI:1466.00

RI:1466.00

CASNO:6638-05-7

RT:35.897

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 53 44) ( 65 72) ( 67 35) ( 77 81) ( 79 251)

( 82 39) ( 85 72) ( 97 100) (107 265) (108 31)

(125 290) (153 540) (154 55) (167 38) (168 1000)

(169 108)

NAME:Phenol, 4-ethyl-2,6-dimethoxy- (Ethylsyringol)

COMMENT: 37.824 min AG1-LF\_040901180114.FIN|RI:1543.00

RI:1543.00

CASNO:14059-92-8

RT:37.824

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 21

( 39 33) ( 66 23) ( 77 53) ( 78 40) ( 79 95)

( 91 74) ( 93 42) ( 94 31) (106 26) (107 119)

(121 77) (124 52) (134 27) (135 61) (137 51)

(164 18) (167 1000) (168 118) (181 30) (182 481)

(183 63)

NAME:Vanillic Acid, methyl ester

COMMENT: Benzoic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester|RI:1544.00

RI:1544.00

FORM:C9H10O4

CASNO:3943-74-6

RT:37.872

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 50 32) ( 51 43) ( 52 41) ( 53 19) ( 62 16)

( 63 37) ( 65 58) (108 45) (123 185) (139 56)

(151 1000) (152 101) (182 666) (183 61)

NAME:Benzene, (1-methylethyl)-

COMMENT: 19.516 min SENBECK1.FIN|RI:933.00

RI:933.00

FORM:C9H12

CASNO:98-82-8

RT:20.707

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 36) ( 51 57) ( 77 129) ( 78 61) ( 79 250)

( 91 52) (103 201) (105 1000) (106 77) (120 217)

NAME:Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-

COMMENT: 21.771 min SENBECK1.FIN|RI:990.80

RI:990.80

CASNO:100-80-1

RT:21.771

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 77 211) ( 78 175) ( 91 154) (103 336) (115 467)

(117 901) (118 1000)

NAME:Benzene, 1,2-diethyl-

COMMENT: 23.230 min SENBECK1.FIN|RI:1032.00

RI:1032.00

CASNO:135-01-3

RT:23.230

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 77 152) ( 79 188) ( 91 452) (103 176) (105 907)

(115 159) (117 301) (119 1000) (120 478) (134 279)

NAME:Biphenyl

COMMENT: 34.626 min SENBECK1.FIN|RI:1412.00

RI:1412.00

CASNO:92-52-4

RT:34.626

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

(152 399) (153 434) (154 1000) (155 143)

NAME:Benzene, 1,3-diisocyanato-2-methyl-

COMMENT: 33.238 min NM-5\_041025150549.FIN

FORM:C9H6N2O2

CASNO:91-08-7

RT:33.238

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 91 175) (118 414) (145 271) (146 748) (174 1000)

(175 115)

NAME:Benzene, 2,4-diisocyanato-1-methyl-

COMMENT: 33.389 min NM-5\_041025150549.FIN

FORM:C9H6N2O2

CASNO:584-84-9

RT:33.389

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 51 30) ( 63 46) ( 64 31) ( 76 37) ( 90 58)

( 91 95) (117 81) (118 72) (119 39) (132 91)

(145 629) (146 651) (147 67) (173 223) (174 1000)

(175 117)

NAME:Benzonitrile

COMMENT: 22.039 min NM-5\_041025150549.FIN|RI:1002.00

RI:1002.00

FORM:C7H5N

CASNO:100-47-0

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 50 152) ( 75 90) ( 76 402) (103 1000)

NAME:Benzofuran

COMMENT: 22.331 min NM-5\_041025150549.FIN|RI:1011.00

RI:1011.00

FORM:C8H6O

CASNO:271-89-6

RT:22.258

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 62 77) ( 63 208) ( 89 510) ( 90 431) (118 1000)

NAME:Benzofuran, 2-methyl-

COMMENT: 26.158 min NM-2.FIN|RI:1126.00

RI:1126.00

CASNO:4265-25-2

RT:26.158

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 77 103) ( 78 93) (103 158) (131 1000) (132 633)

NAME:Benzofuran, 2-methyl-

COMMENT: 26.158 min NM-2.FIN|RI:1126.00

RI:1126.00

CASNO:4265-25-2

RT:26.158

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

(103 146) (131 1000) (132 641)

NAME:Pyrrole

COMMENT: Pyrrole|RI:757.00

RI:757.00

FORM:C4H5N

CASNO:109-97-7

RT:12.358

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 175) ( 38 226) ( 39 764) ( 40 133) ( 41 323)

( 66 40) ( 67 1000) ( 68 46)

NAME:Toluene

COMMENT: Toluene|RI:770.00

RI:770.00

FORM:C7H8

CASNO:108-88-3

RT:13.252

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 67) ( 50 37) ( 51 39) ( 61 11) ( 62 31)

( 63 75) ( 65 145) ( 89 32) ( 91 1000) ( 92 459)

( 93 28)

NAME:????1-Hexene, 3-methyl-

COMMENT: Unknown27|RI:803.10

RI:803.10

FORM:C7H14

CASNO:3404-61-3

RT:13.954

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 39 888) ( 41 1000) ( 55 891) ( 56 300) ( 69 244)

( 70 194) ( 83 290)

NAME:3-Furaldehyde

COMMENT: Furfural|RI:827.00

RI:827.00

FORM:C5H4O2

CASNO:498-60-2

RT:15.440

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 37 96) ( 38 122) ( 39 379) ( 40 15) ( 50 31)

( 67 158) ( 68 13) ( 95 1000) ( 96 488) ( 97 38)

NAME:Benzyl Alcohol

COMMENT: 23.729 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:15.74

RI:15.74

FORM:C7H8O

CASNO:100-51-6

RT:15.736

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 50 82) ( 51 119) ( 62 42) ( 63 66) ( 77 482)

( 78 105) ( 79 1000) ( 80 91) ( 91 38) (105 61)

(107 325) (108 406)

NAME:Benzyl Alcohol

COMMENT: Methylphenol 2/3/4?|RI:15.74

RI:15.74

FORM:C7H8O

CASNO:100-51-6

RT:15.736

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 77 505) ( 79 1000) (107 329) (108 377)

NAME:3-methylphenol

FORM:C7H8O

CASNO:108-39-4

RI:1111.9

RW:

RT:22.597

COMMENT: |RI:1066.00

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 50 105) ( 51 169) ( 63 127) ( 77 507) ( 78 110)

( 79 678) ( 80 265) ( 89 265) ( 90 214) (107 841)

(108 1000) (109 92)

NAME:Phenol, 4-methyl-

COMMENT: 24.929 min AG1-LF\_040901180114.FIN|RI:1087.00

RI:1087.00

FORM:C7H8O

CASNO:106-44-5

RT:23.817

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 39 77) ( 50 76) ( 51 121) ( 53 49) ( 63 70)

( 77 531) ( 78 80) ( 79 483) ( 80 223) ( 89 61)

( 90 118) ( 91 56) (107 1000) (108 901) (109 97)

NAME:Phenol, 2-methyl-

COMMENT: Benzyl Alcohol|RI:24.23

RI:24.23

FORM:C7H8O

CASNO:95-48-7

RT:15.74

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 51 115) ( 53 104) ( 77 354) ( 79 320) ( 80 47)

(107 718) (108 1000)

NAME:Acetophenone

COMMENT: 23.008 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:1084.00

RI:1084.00

FORM:C8H8O

CASNO:98-86-2

RT:22.2177

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

( 79 168) (105 1000) (120 544)

NAME:Phenol, 4-ethyl-

COMMENT: 27.605 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:27.90

RI:27.90

CASNO:123-07-9

RT:27.897

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 31

( 37 14) ( 39 90) ( 42 68) ( 43 12) ( 45 10)

( 51 61) ( 57 16) ( 61 7) ( 63 28) ( 65 21)

( 67 18) ( 69 15) ( 77 286) ( 78 40) ( 79 64)

( 81 12) ( 91 49) ( 93 27) ( 94 36) ( 95 14)

( 96 20) (103 24) (107 1000) (108 78) (113 28)

(120 11) (121 14) (122 251) (123 53) (124 14)

(139 6)

NAME:Eugenol

COMMENT: Eugenol|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 55 102) ( 77 178) ( 78 61) ( 79 63) ( 91 167)

( 93 74) (103 232) (104 143) (105 95) (121 208)

(131 214) (132 111) (133 169) (149 312) (164 1000)

(165 109)

NAME:Pyridinol

COMMENT: 25.689 min WM1\_040726150756.FIN

FORM:C5H5NO

CASNO:109-00-2

RT:25.689

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 37 48) ( 38 51) ( 39 172) ( 40 49) ( 41 178)

( 42 33) ( 66 32) ( 67 154) ( 68 102) ( 95 1000)

( 96 88)

NAME:Phenol, 2,6-dimethoxy-4-(2-propenyl)-

COMMENT: 42.079 min WM1\_040726150756.FIN|RI:1741.00

RI:1741.00

CASNO:6627-88-9

RT:42.079

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 79

( 39 22) ( 41 14) ( 42 7) ( 43 9) ( 53 5)

( 54 10) ( 55 20) ( 57 31) ( 63 9) ( 65 50)

( 68 22) ( 70 12) ( 77 99) ( 79 66) ( 80 17)

( 87 12) ( 89 19) ( 90 10) ( 91 203) ( 92 16)

( 93 10) ( 94 20) ( 95 18) ( 96 10) (103 88)

(104 12) (105 149) (106 14) (107 36) (108 18)

(109 9) (110 10) (115 29) (116 39) (117 23)

(118 22) (119 209) (120 34) (121 28) (122 5)

(123 124) (124 14) (129 18) (130 36) (131 195)

(132 59) (133 185) (134 74) (135 7) (136 10)

(137 23) (138 122) (139 14) (143 8) (144 24)

(145 14) (146 20) (147 150) (148 23) (149 19)

(151 230) (152 21) (156 9) (161 68) (162 13)

(163 108) (164 12) (165 46) (166 23) (167 23)

(172 6) (177 29) (179 198) (180 27) (185 14)

(193 21) (194 1000) (195 158) (196 10)

NAME:Phenol

COMMENT: 21.367 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 37 33) ( 38 38) ( 39 234) ( 40 59) ( 50 60)

( 51 47) ( 55 29) ( 61 25) ( 62 54) ( 63 98)

( 65 465) ( 66 690) ( 67 47) ( 74 30) ( 75 10)

( 94 1000) ( 95 81)

NAME:Phenol

COMMENT: 21.364 min AG3\_040729080404\_040729103908.FIN|RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 37 33) ( 38 38) ( 39 235) ( 40 59) ( 50 61)

( 51 48) ( 55 29) ( 61 26) ( 62 53) ( 63 98)

( 65 466) ( 66 693) ( 67 46) ( 74 30) ( 75 10)

( 94 1000) ( 95 81)

NAME:1-Heptene

COMMENT: 9.666 min DM1-HF.FIN|RI:688.00

RI:688.00

FORM:C7H14

CASNO:592-76-7

RT:9.963

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 57) ( 39 955) ( 41 1000) ( 42 199) ( 53 67)

( 55 507) ( 56 418) ( 57 101) ( 69 201) ( 70 426)

NAME:????1-Hexene, 3-methyl-

COMMENT: 1-Hexene, 3-methyl-|RI:803.10

RI:803.10

FORM:C7H14

CASNO:3404-61-3

RT:13.954

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 38 36) ( 39 777) ( 40 62) ( 41 905) ( 42 271)

( 43 206) ( 53 93) ( 55 1000) ( 56 389) ( 57 62)

( 67 235) ( 69 303) ( 70 272) ( 82 127) ( 83 378)

( 84 152)

NAME:Furan, 2,5-dimethyl-

COMMENT: Furan, 2,5-dimethyl-|RI:706.00

RI:706.00

FORM:C6H8O

CASNO:625-86-5

RT:10.638

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 57) ( 43 235) ( 50 93) ( 51 91) ( 53 305)

( 65 99) ( 67 137) ( 81 160) ( 95 978) ( 96 1000)

( 97 57)

NAME:Toluene

COMMENT: Toluene|RI:770.00

RI:770.00

FORM:C7H8

CASNO:108-88-3

RT:13.252

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 38 13) ( 39 62) ( 50 33) ( 51 32) ( 61 13)

( 62 22) ( 63 48) ( 65 133) ( 66 12) ( 74 9)

( 89 42) ( 90 14) ( 91 1000) ( 92 541) ( 93 44)

NAME:Benzofuran, 2-methyl-

COMMENT: Benzofuran, 2-methyl-|RI:1126.00

RI:1126.00

CASNO:4265-25-2

RT:26.158

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

(103 151) (131 1000) (132 610)

NAME:Benzofuran, 2,3-dihydro-

COMMENT: Benzofuran, 2,3-dihydro-|RI:1237.00

RI:1237.00

FORM:C8H8O

CASNO:496-16-2

RT:29.563

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 61) ( 63 85) ( 65 137) ( 66 35) ( 89 50)

( 91 804) ( 92 122) ( 94 72) (109 87) (119 256)

(120 1000) (121 99)

NAME:Benzoic acid, 4-methoxy-, methyl ester

COMMENT: 19.851 min AG4-TMAH.FIN|RI:1363.00

RI:1363.00

CASNO:121-98-2

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 63 73) ( 77 242) (107 130) (135 1000) (136 90)

(165 37) (166 413) (167 41)

NAME:Isoeugenol

COMMENT: Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (Propenylguaiacol)|RI:1476.00

RI:1476.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-54-1

RT:36.155

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 50 28) ( 51 62) ( 55 124) ( 65 52) ( 77 190)

( 78 58) ( 91 242) ( 93 88) (103 276) (104 180)

(105 103) (121 244) (122 32) (131 284) (132 106)

(133 185) (149 309) (164 1000) (165 122)

NAME:Eugenol

COMMENT: Eugenol|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 67) ( 51 109) ( 55 109) ( 77 264) ( 78 77)

( 91 259) (103 296) (104 214) (105 128) (121 311)

(122 93) (131 344) (132 231) (133 224) (137 151)

(149 435) (151 183) (164 1000) (165 121)

NAME:Acetovanillone

COMMENT: Ethanone, 1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-|RI:1518.00

RI:1518.00

FORM:C9H10O3

CASNO:498-02-2

RT:37.208

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 50 26) ( 51 36) ( 52 46) ( 65 68) ( 67 51)

( 77 82) ( 93 35) (108 80) (123 276) (151 1000)

(152 106) (166 471) (167 45)

NAME:Acetophenone

COMMENT: Acetophenone|RI:1084.00

RI:1084.00

FORM:C8H8O

CASNO:98-86-2

RT:22.2177

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 2

(105 1000) (120 503)

NAME:Benzofuran, 2,3-dihydro-

COMMENT: Benzofuran, 2,3-dihydro-|RI:1237.00

RI:1237.00

FORM:C8H8O

CASNO:496-16-2

RT:29.563

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 107) ( 62 40) ( 63 92) ( 65 183) ( 66 48)

( 89 54) ( 91 962) ( 92 163) ( 94 84) (119 275)

(120 1000) (121 91)

NAME:Isoeugenol

COMMENT: Isoeugenol|RI:1476.00

RI:1476.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-54-1

RT:36.155

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 51 38) ( 55 113) ( 65 44) ( 77 163) ( 79 57)

( 91 214) (103 256) (104 164) (105 94) (107 57)

(121 222) (131 236) (133 157) (137 55) (149 307)

(150 37) (164 1000) (165 112)

NAME:Acetosyringone

COMMENT: 42.752 min A1-1X.FIN|RI:1767.00

RI:1767.00

CASNO:2478-38-8

RT:42.752

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 43 150) (153 150) (181 1000) (196 580)

NAME:Furfural

COMMENT: 15.994 min A1-1X\_041124105414.FIN|RI:845.00

RI:845.00

CASNO:98-01-1

RT:15.994

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 37 98) ( 38 93) ( 39 360) ( 42 14) ( 50 24)

( 51 33) ( 67 88) ( 68 14) ( 95 1000) ( 96 568)

( 97 40)

NAME:1H-Pyrrole, 2-methyl-

COMMENT: 16.362 min A1-1X\_041124105414.FIN|RI:854.00

RI:854.00

CASNO:636-41-9

RT:16.362

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 41 64) ( 50 59) ( 51 81) ( 52 59) ( 53 261)

( 54 174) ( 78 174) ( 80 1000) ( 81 516)

NAME:Levoglucosan

COMMENT: 37.430 min A1-1X\_041124105414.FIN

CASNO:498-07-7

RT:37.430

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 39 173) ( 41 112) ( 42 614) ( 43 315) ( 45 152)

( 55 154) ( 57 157) ( 60 1000) ( 61 74) ( 69 128)

( 70 94) ( 71 131) ( 73 490) ( 97 234) ( 98 95)

NAME:Cyclopentanone

COMMENT: 14.301 min A1-PRE\_041129203956.FIN|RI:802.00

RI:802.00

CASNO:120-92-3

RT:14.301

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 45) ( 39 434) ( 41 286) ( 42 108) ( 50 35)

( 51 49) ( 53 52) ( 55 1000) ( 56 411) ( 84 201)

NAME:1H-Pyrrole, 2-methyl-

COMMENT: 1H-Pyrrole, 3-methyl-|RI:854.00

RI:854.00

CASNO:636-41-9

RT:16.362

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 50 73) ( 51 95) ( 52 53) ( 53 317) ( 78 167)

( 80 1000) ( 81 516)

NAME:Chitin C8H9NO3

CASNO:Chitin C8H9NO3

RT:42.086

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 57 50) ( 83 50) ( 96 120) (110 570) (124 310)

(125 1000)

NAME:Homovanillic acid

COMMENT: 40.896 min ULUHE.FIN|RI:1680.40

RI:1680.40

CASNO:306-08-1

RT:40.896

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 91 149) ( 94 135) (122 221) (123 150) (137 1000)

(138 575) (182 923) (183 123)

NAME:Homocatechol (1,2-Benzenediol, 4-methyl-)

COMMENT: 31.515 min ULUHE.FIN|RI:1299.00

RI:1299.00

CASNO:452-86-8

RT:31.515

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 65 79) ( 67 127) ( 77 252) ( 78 578) ( 79 78)

(106 173) (123 464) (124 1000) (125 71)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2,3-dimethyl-

COMMENT: 23.663 min ULUHE.FIN|RI:1051.00

RI:1051.00

CASNO:1121-05-7

RT:23.663

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 302) ( 41 136) ( 65 260) ( 67 1000) ( 79 119)

( 82 80) ( 95 237) (109 165) (110 899) (111 99)

NAME:Pyruvaldehyde

COMMENT: 9.178 min OHIA.FIN

CASNO:78-98-8

RT:9.178

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 38 9) ( 42 61) ( 43 1000) ( 44 36) ( 45 190)

( 53 15) ( 55 10) ( 75 22)

NAME:3-Penten-2-one, (E)-

COMMENT: 9.390 min OHIA.FIN|RI:749.00

RI:749.00

CASNO:3102-33-8

RT:9.390

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 91) ( 38 107) ( 39 1000) ( 40 40) ( 41 708)

( 42 75) ( 43 226) ( 69 848) ( 84 57)

NAME:2H-Pyran-2-one

COMMENT: 18.045 min OHIA.FIN|RI:898.80

RI:898.80

CASNO:504-31-4

RT:18.222

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 603) ( 40 271) ( 42 446) ( 49 77) ( 50 159)

( 51 86) ( 54 83) ( 68 1000) ( 96 744)

NAME:2,5-Furandione, 3-methyl-

COMMENT: 20.406 min OHIA.FIN|RI:966.40

RI:966.40

CASNO:616-02-4

RT:20.406

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 37 120) ( 38 142) ( 39 1000) ( 40 410) ( 53 59)

( 68 355)

NAME:Alpha-amino-gamma-butyrolactone

COMMENT: 20.854 min OHIA.FIN

CASNO:1192-20-7

RT:20.854

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 42 183) ( 43 1000) ( 56 172) ( 57 233) (101 153)

NAME:4H-Pyran-4-one, 3-hydroxy-2-methyl-

COMMENT: 26.305 min OHIA.FIN|RI:1132.00

RI:1132.00

FORM:C6H6O3

CASNO:118-71-8

RT:26.401

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 26

( 37 15) ( 40 21) ( 42 13) ( 43 149) ( 50 30)

( 51 39) ( 52 53) ( 53 121) ( 54 37) ( 55 335)

( 56 89) ( 61 8) ( 65 33) ( 66 32) ( 67 63)

( 69 101) ( 71 75) ( 79 87) ( 84 155) ( 91 46)

( 95 91) ( 97 201) ( 98 56) (110 8) (126 1000)

(127 65)

NAME:1,2-Benzenediol, 3-methoxy-

COMMENT: 30.782 min OHIA.FIN|RI:1285.00

RI:1285.00

FORM:C7H8O3

CASNO:934-00-9

RT:30.782

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

( 97 743) (125 722) (140 1000)

NAME:Eugenol

COMMENT: 33.351 min OHIA.FIN|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 77 156) ( 78 100) ( 91 258) (103 369) (104 226)

(121 252) (131 339) (132 225) (133 190) (149 350)

(164 1000)

NAME:1,2,3-Benzenetriol

COMMENT: 34.030 min OHIA.FIN

CASNO:87-66-1

RT:34.030

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 52 366) ( 80 240) (108 319) (126 1000)

NAME:C15H24 - Silinene

COMMENT: 37.277 min OHIA.FIN

CASNO:C15H24

RT:37.277

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 53

( 39 53) ( 41 50) ( 42 84) ( 43 58) ( 51 20)

( 53 27) ( 56 23) ( 61 4) ( 65 109) ( 67 88)

( 77 143) ( 81 155) ( 91 391) ( 92 31) ( 93 370)

( 95 172) ( 97 7) (103 15) (104 9) (105 315)

(106 50) (107 292) (108 74) (109 126) (111 17)

(117 31) (119 206) (121 49) (126 11) (129 86)

(131 129) (132 24) (133 600) (134 188) (143 13)

(144 4) (145 62) (146 24) (147 468) (152 37)

(161 350) (162 298) (163 69) (165 61) (167 25)

(169 5) (175 208) (182 21) (189 1000) (190 196)

(204 272) (205 83) (207 19)

NAME:C15H24 - Cadinene?

COMMENT: 37.611 min OHIA.FIN|RI:1546.00

RI:1546.00

CASNO:C15H24b

RT:37.611

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 27

( 51 29) ( 53 6) ( 57 45) ( 63 6) ( 77 43)

( 80 13) ( 81 261) ( 91 355) ( 95 58) ( 97 7)

(105 620) (106 120) (107 20) (111 42) (119 575)

(120 112) (121 43) (126 37) (129 108) (133 249)

(134 114) (135 28) (151 27) (161 1000) (175 27)

(189 131) (204 594)

NAME:Calacorene?

COMMENT: 38.403 min OHIA.FIN

CASNO:Calacorene?

RT:38.403

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 47

( 40 15) ( 53 39) ( 55 56) ( 77 22) ( 78 32)

( 83 9) ( 94 13) (101 20) (103 33) (107 18)

(115 111) (117 35) (121 32) (123 18) (126 106)

(129 54) (131 80) (133 22) (135 49) (137 6)

(138 61) (139 42) (141 352) (142 937) (143 54)

(144 31) (145 19) (147 52) (150 48) (152 57)

(153 167) (154 69) (155 192) (156 302) (157 1000)

(163 49) (164 27) (167 25) (168 28) (174 20)

(175 43) (179 49) (183 81) (200 389) (202 18)

(207 30) (210 25)

NAME:Phenol, 2,6-dimethoxy-4-(2-propenyl)-

COMMENT: 40.738 min AG+N.FIN|RI:1741.00

RI:1741.00

CASNO:6627-88-9

RT:42.079

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 54

( 44 7) ( 51 10) ( 63 18) ( 65 96) ( 66 23)

( 67 31) ( 68 6) ( 69 9) ( 73 15) ( 77 66)

( 78 18) ( 81 40) ( 82 23) ( 83 23) ( 89 19)

( 91 269) ( 93 34) ( 95 21) (102 21) (103 95)

(105 154) (107 47) (119 146) (122 6) (123 94)

(125 14) (128 12) (131 245) (132 56) (133 207)

(134 81) (135 19) (145 6) (147 104) (149 8)

(150 26) (151 231) (152 41) (160 12) (161 54)

(163 143) (164 22) (166 20) (167 21) (175 20)

(177 33) (178 33) (179 163) (182 9) (186 10)

(193 40) (194 1000) (195 150) (196 42)

NAME:Syringaldehyde

COMMENT: 41.180 min AG+N.FIN

CASNO:134-96-3

RT:41.180

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 46

( 38 15) ( 41 93) ( 43 17) ( 44 17) ( 53 45)

( 55 67) ( 65 85) ( 67 45) ( 68 50) ( 69 83)

( 73 12) ( 75 6) ( 83 69) ( 91 29) ( 93 134)

( 94 22) ( 95 19) ( 96 73) ( 97 75) (109 12)

(110 18) (115 28) (119 9) (122 24) (123 38)

(130 21) (131 58) (133 20) (135 70) (136 18)

(138 21) (139 96) (143 11) (148 17) (149 26)

(152 58) (153 150) (154 65) (159 23) (162 13)

(165 65) (166 16) (167 67) (181 583) (182 1000)

(184 19)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 20.990 min C6-PRE.FIN|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 80) ( 49 15) ( 50 77) ( 51 111) ( 53 552)

( 54 31) ( 55 23) ( 81 148) ( 82 17) (109 1000)

(110 840) (111 68)

NAME:Thiophene

COMMENT: 9.282 min BG\_SED-EF0207.FIN

FORM:C4H4S

CASNO:110-02-1

RT:9.282

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 45 247) ( 57 126) ( 58 618) ( 84 1000)

NAME:p-xylene

COMMENT: 17.309 min BG\_SED-EF0207.FIN

CASNO:106-42-3

RT:17.309

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 6) ( 39 63) ( 50 24) ( 51 54) ( 62 25)

( 63 53) ( 65 79) ( 77 92) ( 78 63) ( 79 104)

( 80 7) ( 91 1000) ( 92 85) (102 16) (103 75)

(105 115) (106 421) (107 34)

NAME:m-xylene

COMMENT: 17.363 min BG\_SED-EF0207.FIN|RI:877.00

RI:877.00

CASNO:108-38-3

RT:17.363

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 50 36) ( 51 42) ( 65 70) ( 77 80) ( 79 123)

( 91 1000) (103 72) (105 112) (106 393) (107 36)

NAME:o-xylene

COMMENT: 18.245 min BG\_SED-EF0207.FIN

CASNO:95-47-6

RT:18.245

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 50) ( 50 29) ( 51 71) ( 62 13) ( 63 40)

( 65 98) ( 77 87) ( 79 99) ( 91 1000) ( 92 74)

(105 92) (106 403) (107 35)

NAME:Benzene, (1-methylethyl)-

COMMENT: 19.366 min BG\_SED-EF0207.FIN|RI:933.00

RI:933.00

FORM:C9H12

CASNO:98-82-8

RT:20.707

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 79 232) (103 159) (105 1000) (120 219)

NAME:2-Methylthiophene

COMMENT: 13.308 min BG\_SED-VF0104.FIN|RI:771.00

RI:771.00

CASNO:554-14-3

RT:13.308

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 53 98) ( 97 1000) ( 98 475) ( 99 55)

NAME:Thiophene, 3-methyl-

COMMENT: 13.671 min BG\_SED-VF0104.FIN|RI:776.00

RI:776.00

FORM:C5H6S

CASNO:616-44-4

RT:13.671

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

( 55 118) ( 97 1000) ( 98 514)

NAME:Dichlorobenzaldehyde

COMMENT: 31.175 min SCHUUR583\_050701102108.FIN

CASNO:DOC Extract 1

RT:31.175

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 20

( 37 8) ( 74 169) ( 75 205) ( 84 34) (109 123)

(110 85) (111 133) (112 65) (113 31) (145 236)

(146 87) (147 169) (148 55) (149 28) (173 1000)

(174 638) (175 706) (176 409) (177 126) (178 69)

NAME:Dichlorobenzonitrile

COMMENT: 31.918 min SCHUUR583\_050701102108.FIN

CASNO:DOC Extract 2

RT:31.918

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 28

( 50 32) ( 60 6) ( 62 12) ( 73 26) ( 74 49)

( 75 55) ( 76 11) ( 85 11) ( 86 11) ( 98 8)

( 99 44) (100 213) (101 23) (109 23) (110 37)

(126 5) (135 40) (136 190) (137 26) (138 65)

(144 19) (146 9) (171 1000) (172 86) (173 626)

(174 54) (175 100) (176 10)

NAME:C7H10

COMMENT: 10.736 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:735.00

RI:735.00

CASNO:C7H10

RT:10.736

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 43 269) ( 50 46) ( 51 103) ( 55 101) ( 65 61)

( 70 45) ( 77 822) ( 78 93) ( 79 1000) ( 91 188)

( 93 56) ( 94 345)

NAME:C7H10 #2

COMMENT: 11.012 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:754.00

RI:754.00

CASNO:C7H10 #2

RT:11.012

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 121) ( 51 140) ( 65 108) ( 77 937) ( 78 125)

( 79 1000) ( 80 78) ( 91 419) ( 93 61) ( 94 362)

NAME:C8H16

COMMENT: 12.514 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C8H16

RT:12.514

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 867) ( 40 64) ( 41 1000) ( 42 213) ( 43 155)

( 53 75) ( 55 851) ( 56 241) ( 67 158) ( 69 208)

( 70 140) ( 72 62) ( 83 228) ( 84 85)

NAME:Furan, 2,3,5-trimethyl-

COMMENT: 13.579 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:815.00

RI:815.00

CASNO:10504-04-8

RT:13.579

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 180) ( 43 351) ( 65 217) ( 66 48) ( 67 315)

( 79 169) ( 95 422) (109 961) (110 1000) (111 72)

NAME:C8H12

COMMENT: 14.824 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C8H12

RT:14.824

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 41 31) ( 63 32) ( 65 118) ( 67 73) ( 77 354)

( 79 66) ( 91 1000) ( 92 129) ( 93 969) ( 94 57)

(105 67) (107 87) (108 626) (109 117)

NAME:C8H12 #2

COMMENT: 15.614 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C8H12 #2

RT:15.614

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 39 68) ( 50 33) ( 51 73) ( 63 37) ( 65 114)

( 77 279) ( 78 65) ( 79 121) ( 91 1000) ( 92 83)

( 93 419) (105 58) (106 156) (107 31) (108 251)

(109 50)

NAME:Xylene

COMMENT: 16.040 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:876.00

RI:876.00

CASNO:Xylene

RT:16.040

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 50 38) ( 51 71) ( 62 20) ( 63 48) ( 65 76)

( 77 162) ( 78 70) ( 79 108) ( 89 20) ( 91 1000)

( 92 71) (103 83) (104 20) (105 123) (106 438)

(107 46)

NAME:Furan, 2-ethyl-

COMMENT: 16.133 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:689.00

RI:689.00

CASNO:3208-16-0

RT:16.133

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 331) ( 40 49) ( 41 94) ( 50 54) ( 51 68)

( 53 728) ( 67 307) ( 68 69) ( 81 1000) ( 95 73)

( 96 211)

NAME:Benzene, 1,2,3-trimethyl-

COMMENT: 20.712 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:991.00

RI:991.00

CASNO:526-73-8

RT:20.712

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 77 110) ( 78 52) ( 79 181) ( 91 135) (103 154)

(104 26) (105 1000) (106 98) (115 46) (119 89)

(120 501)

NAME:C9H8

COMMENT: 22.717 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C9H8

RT:22.717

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 62 46) ( 63 98) ( 65 65) ( 89 151) ( 91 192)

( 92 104) (115 1000) (116 813)

NAME:Cyclopent-2-ene-1-one, 2,3,4-trimethyl-

COMMENT: 23.020 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1071.00

RI:1071.00

CASNO:83321-16-8

RT:23.020

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 189) ( 41 68) ( 53 87) ( 65 60) ( 67 123)

( 77 166) ( 79 731) ( 81 733) ( 96 438) (109 1000)

(110 84) (123 80) (124 507) (125 62)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2,3,4-trimethyl-

COMMENT: 24.017 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:28790-86-5

RT:24.017

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 38 39) ( 39 332) ( 41 89) ( 43 25) ( 53 100)

( 54 32) ( 63 54) ( 65 108) ( 66 40) ( 68 25)

( 69 37) ( 77 218) ( 78 13) ( 80 116) ( 81 866)

( 82 87) ( 83 24) ( 91 59) ( 94 26) ( 96 587)

( 97 35) (107 28) (109 1000) (122 25) (124 539)

NAME:5-Ethyl-2-furaldehyde

COMMENT: 25.364 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1145.30

RI:1145.30

CASNO:23074-10-4

RT:25.364

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 248) ( 53 113) ( 65 146) ( 67 584) ( 68 56)

( 79 580) ( 81 432) ( 95 239) (109 671) (122 55)

(123 239) (124 1000)

NAME:Phenol, 3,4-dimethyl-

COMMENT: 25.899 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1178.00

RI:1178.00

FORM:C8H10O

CASNO:95-65-8

RT:27.368

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 51 64) ( 65 63) ( 77 293) ( 78 96) ( 79 258)

( 91 388) ( 93 73) (103 75) (107 1000) (119 108)

(121 343) (122 836)

NAME:Dimethylphenol

COMMENT: 25.968 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1125.00

RI:1125.00

CASNO:Dimethylphenol

RT:25.968

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 20

( 39 113) ( 50 40) ( 51 71) ( 62 20) ( 65 59)

( 67 71) ( 77 396) ( 78 128) ( 79 311) ( 81 57)

( 91 316) ( 93 64) ( 95 298) (103 59) (107 1000)

(108 78) (110 264) (121 298) (122 822) (138 58)

NAME:C10H14

COMMENT: 26.096 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C10H14

RT:26.096

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 65 54) ( 91 492) (117 523) (119 1000) (120 165)

(134 461)

NAME:Dihydronaphthalene

COMMENT: 26.232 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1172.00

RI:1172.00

CASNO:Dihydronaphthalene

RT:26.232

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 51 106) ( 76 36) ( 89 75) (102 70) (115 769)

(116 81) (126 80) (127 204) (128 464) (129 797)

(130 1000) (131 129) (150 83)

NAME:3-Decene

COMMENT: 26.783 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:995.00

RI:995.00

CASNO:19398-37-9

RT:26.783

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 681) ( 41 968) ( 42 147) ( 43 177) ( 55 1000)

( 56 437) ( 57 198) ( 67 288) ( 69 677) ( 70 371)

( 82 125) ( 83 422) ( 84 145) ( 97 349) ( 98 72)

(110 66) (111 201)

NAME:Trimethylphenol

COMMENT: 27.783 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1289.00

RI:1289.00

CASNO:Trimethylphenol

RT:27.783

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 4

( 91 388) (121 1000) (135 228) (136 740)

NAME:Dimethylbenzofuran

COMMENT: 28.228 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1231.00

RI:1231.00

CASNO:Dimethylbenzofuran

RT:28.228

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 55 46) ( 89 31) (111 50) (115 206) (116 41)

(117 124) (131 150) (145 1000) (146 765) (147 69)

NAME:C9H12O

COMMENT: 28.254 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C9H12O

RT:28.254

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 65 52) ( 77 137) ( 78 59) ( 91 398) ( 92 69)

( 93 202) (103 53) (121 1000) (122 108) (123 54)

(133 66) (136 475)

NAME:C9H12O #2

COMMENT: 28.673 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C9H12O #2

RT:28.673

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 77 198) ( 91 451) ( 93 179) (121 1000) (122 142)

(136 758)

NAME:C11H12

COMMENT: 29.417 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C11H12

RT:29.417

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 55 18) ( 69 17) ( 98 35) (102 37) (115 119)

(126 30) (127 187) (128 621) (129 1000) (130 105)

(137 15) (138 7) (139 24) (141 90) (143 98)

(144 588) (145 27) (147 29)

NAME:C11H12 #2

COMMENT: 29.579 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C11H12 #2

RT:29.579

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 32

( 42 6) ( 43 25) ( 50 18) ( 51 37) ( 63 23)

( 69 31) ( 78 18) ( 82 84) ( 89 29) ( 96 27)

( 97 63) (102 43) (108 16) (109 15) (115 201)

(116 36) (117 12) (120 18) (126 29) (127 124)

(128 494) (129 1000) (130 131) (131 98) (139 55)

(141 75) (143 128) (144 562) (145 72) (146 61)

(157 21) (191 9)

NAME:C11H12 #3

COMMENT: 29.835 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:C11H12 #3

RT:29.835

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

(102 41) (115 146) (116 19) (118 30) (121 131)

(126 28) (127 122) (128 486) (129 1000) (130 82)

(136 128) (141 109) (142 44) (144 491) (145 33)

(147 58)

NAME:Methylnaphthalene

COMMENT: 30.836 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1335.00

RI:1335.00

CASNO:Methylnaphthalene

RT:30.836

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

(115 397) (141 939) (142 1000)

NAME:7-Methylindan-1-one

COMMENT: 32.343 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:39627-61-7

RT:32.343

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 26

( 43 109) ( 50 29) ( 51 37) ( 63 73) ( 65 55)

( 85 51) ( 89 199) ( 90 75) ( 91 167) (102 50)

(103 69) (115 477) (116 92) (117 1000) (118 438)

(119 95) (127 32) (128 55) (129 64) (131 167)

(145 161) (146 975) (147 157) (149 109) (164 47)

(173 60)

NAME:C12H14

COMMENT: 32.749 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1399.00

RI:1399.00

CASNO:C12H14

RT:32.749

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

(115 203) (128 613) (141 251) (143 1000) (144 107)

(158 689)

NAME:C12H14 #2

COMMENT: 32.900 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1406.00

RI:1406.00

CASNO:C12H14 #2

RT:32.900

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

(115 210) (127 109) (128 664) (141 307) (142 139)

(143 1000) (144 159) (158 631)

NAME:C12H14 #3

COMMENT: 33.425 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1405.00

RI:1405.00

CASNO:C12H14 #3

RT:33.425

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

(115 237) (128 612) (141 212) (142 148) (143 1000)

(144 109) (158 642)

NAME:Ethanone, 1-[4-(1-methylethenyl)phenyl]-

COMMENT: 34.408 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:5359-04-6

RT:34.408

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 51 44) ( 63 40) ( 65 59) ( 78 37) ( 89 51)

( 91 365) ( 92 20) (102 20) (103 38) (106 69)

(115 254) (116 61) (117 304) (118 33) (131 55)

(132 48) (134 184) (136 16) (143 68) (145 1000)

(146 118) (147 204) (160 704) (162 120) (163 21)

NAME:Benzoic acid, 4-ethoxy-, ethyl ester

COMMENT: 36.440 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:23676-09-7

RT:36.440

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 93 147) (121 1000) (138 423) (149 588) (166 893)

(194 793)

NAME:3-Ethyl-7-hydroxyphthalide

COMMENT: 36.605 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:485-26-7

RT:36.605

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 39 23) ( 65 67) ( 77 26) ( 81 18) ( 92 31)

( 93 100) (116 50) (118 21) (120 20) (121 766)

(122 73) (144 83) (145 46) (149 1000) (150 89)

(173 61) (178 163) (179 19)

NAME:Diethyltoluamide (DEET)

COMMENT: 37.760 min MANNUIAUG-27-2003.FIN|RI:1593.00

RI:1593.00

CASNO:134-62-3

RT:37.760

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 65 84) ( 91 313) (119 631) (120 60) (190 1000)

(191 224)

NAME:Naphthalene, C3-

COMMENT: 38.501 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:Naphthalene, C3-

RT:38.501

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 37

( 39 56) ( 41 113) ( 43 164) ( 55 76) ( 67 49)

( 69 139) ( 73 26) ( 81 63) ( 83 44) ( 85 152)

( 89 27) ( 95 73) ( 97 59) (107 28) (109 98)

(110 70) (111 83) (112 114) (117 40) (123 77)

(124 53) (127 49) (128 63) (130 39) (137 21)

(145 51) (146 40) (151 101) (152 168) (153 262)

(154 74) (155 1000) (156 145) (169 34) (170 820)

(173 90) (187 47)

NAME:1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl-3-phenyl-

COMMENT: 41.044 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

FORM:C18H20

CASNO:3910-35-8

RT:41.044

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 91 150) (143 595) (221 1000) (222 185) (236 55)

NAME:Benzothiazole, 2-phenyl-

COMMENT: 47.321 min MANNUIAUG-27-2003.FIN

CASNO:883-93-2

RT:47.321

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 82 27) (108 74) (184 73) (210 293) (211 1000)

(212 175) (213 60)

NAME:2-Propyn-1-amine

COMMENT: 6.151 min SCHUUR283.FIN

CASNO:2450-71-7

RT:6.151

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 39 158) ( 40 59) ( 51 419) ( 52 431) ( 54 1000)

( 55 76) ( 56 84)

NAME:Oxirane, ethenyl-

COMMENT: 7.972 min SCHUUR283.FIN|RI:658.40

RI:658.40

CASNO:930-22-3

RT:7.972

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 118) ( 38 126) ( 39 1000) ( 40 59) ( 41 448)

( 42 320) ( 69 498) ( 70 87)

NAME:Pyrimidine

COMMENT: 10.991 min SCHUUR283.FIN|RI:744.00

RI:744.00

CASNO:289-95-2

RT:10.991

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 3

( 52 177) ( 53 374) ( 80 1000)

NAME:1,2-Cyclopentanedione

COMMENT: 11.275 min SCHUUR283.FIN|RI:755.30

RI:755.30

CASNO:3008-40-0

RT:11.275

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 37 33) ( 38 32) ( 39 138) ( 40 46) ( 41 44)

( 42 102) ( 53 56) ( 55 59) ( 68 101) ( 69 249)

( 70 17) ( 83 90) ( 97 22) ( 98 1000) ( 99 59)

NAME:Acetonitrile, (dimethylamino)-

COMMENT: 11.511 min SCHUUR283.FIN|RI:760.40

RI:760.40

CASNO:926-64-7

RT:11.511

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 40 100) ( 42 1000) ( 43 126) ( 44 157) ( 56 77)

( 57 224) ( 58 749) ( 59 45) ( 83 995) ( 84 345)

( 85 20)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: 17.9934 min SCHUUR283|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 16) ( 39 83) ( 43 183) ( 49 12) ( 50 92)

( 51 122) ( 52 34) ( 53 214) ( 67 38) ( 81 153)

(109 1000) (110 859) (111 63)

NAME:2(5H)-Furanone, 5-methyl-

COMMENT: 19.0169 min SCHUUR283|RI:955.00

RI:955.00

CASNO:591-11-7

RT:19.017

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 31) ( 39 123) ( 41 60) ( 42 107) ( 43 289)

( 49 12) ( 50 54) ( 51 47) ( 53 76) ( 54 66)

( 55 1000) ( 56 52) ( 69 60) ( 70 38) ( 83 152)

( 98 155)

NAME:Pyridine, 4-methoxy-

COMMENT: 21.2646 min SCHUUR283|RI:1017.00

RI:1017.00

CASNO:620-08-6

RT:21.265

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 38 51) ( 39 300) ( 50 70) ( 51 84) ( 52 89)

( 59 94) ( 65 32) ( 66 218) ( 78 38) ( 79 258)

( 80 66) ( 94 63) (108 40) (109 1000)

NAME:C14 alkene

COMMENT: 32.5131 min SCHUUR483

CASNO:C14 alkene

RT:32.513

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 25

( 39 519) ( 41 778) ( 42 143) ( 43 189) ( 53 86)

( 54 61) ( 55 1000) ( 56 340) ( 57 265) ( 66 59)

( 67 359) ( 69 712) ( 70 342) ( 71 88) ( 81 243)

( 82 185) ( 83 537) ( 84 145) ( 96 187) ( 97 533)

( 98 83) (111 232) (124 97) (139 73) (196 279)

NAME:C14 alkene #2

COMMENT: 32.9586 min SCHUUR483

CASNO:C14 alkene #2

RT:32.959

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 24

( 39 570) ( 41 837) ( 42 135) ( 43 234) ( 53 98)

( 55 1000) ( 56 309) ( 57 323) ( 67 424) ( 69 774)

( 70 359) ( 71 83) ( 81 264) ( 82 177) ( 83 606)

( 84 179) ( 96 215) ( 97 636) ( 98 111) ( 99 59)

(110 138) (111 357) (124 116) (196 201)

NAME:C14 alkene #3

COMMENT: 33.2662 min SCHUUR483

CASNO:C14 alkene #3

RT:33.266

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 636) ( 41 889) ( 42 131) ( 43 242) ( 55 1000)

( 56 324) ( 57 315) ( 67 373) ( 69 851) ( 70 414)

( 81 241) ( 82 222) ( 83 641) ( 84 146) ( 96 233)

( 97 660) (111 393) (125 167) (196 172)

NAME:C16 alkenol

COMMENT: 34.9806 min SCHUUR483

CASNO:C16 alkenol

RT:34.981

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 22

( 39 606) ( 41 906) ( 53 99) ( 54 72) ( 55 1000)

( 56 326) ( 57 342) ( 67 381) ( 69 828) ( 70 335)

( 71 126) ( 81 329) ( 82 183) ( 83 585) ( 84 142)

( 95 149) ( 97 625) ( 98 105) (111 405) (124 119)

(125 143) (210 273)

NAME:1(2H)-Naphthalenone, 3,4-dihydro-3,3,6,8-tetramethyl-

COMMENT: 38.6652 min KOLYMAAUG-27-2003

FORM:C14H18O

CASNO:5409-55-2

RT:38.665

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

(103 42) (115 89) (117 174) (118 264) (128 56)

(146 1000) (147 120) (202 608) (203 99)

NAME:Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-

COMMENT: 40.5773 min KOLYMAAUG-27-2003

FORM:C14H22O

CASNO:140-66-9

RT:40.577

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 38

( 63 4) ( 65 13) ( 77 20) ( 78 8) ( 82 8)

( 91 58) ( 92 4) ( 96 10) (102 8) (103 5)

(105 23) (106 7) (107 165) (108 15) (115 13)

(119 34) (134 35) (135 1000) (136 88) (137 19)

(147 6) (161 14) (162 8) (166 8) (169 7)

(175 14) (176 12) (196 24) (197 6) (198 6)

(202 8) (206 100) (207 43) (211 5) (219 4)

(220 26) (267 4) (281 6)

NAME:1-Methyl-3,5-diisopropoxybenzene

COMMENT: 40.9021 min KOLYMAAUG-27-2003

FORM:C13H20O2

CASNO:1-Methyl-3,5-diisopropoxybenzene

RT:40.902

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 203) ( 41 173) ( 43 97) ( 57 166) ( 65 67)

( 69 88) ( 71 132) ( 79 114) ( 96 137) (107 139)

(111 86) (113 35) (124 1000) (125 129) (166 49)

(208 124) (224 17)

NAME:Hydroquinone, 2,5-di-tert-butyl-

COMMENT: 41.0007 min KOLYMAAUG-27-2003

FORM:C14H22O2

CASNO:88-58-4

RT:41.001

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 72

( 53 18) ( 55 8) ( 56 3) ( 57 105) ( 58 13)

( 73 7) ( 77 48) ( 79 37) ( 80 7) ( 81 51)

( 82 21) ( 85 27) ( 91 43) ( 93 47) (105 97)

(110 7) (113 4) (118 13) (119 15) (120 27)

(121 98) (122 25) (123 63) (124 24) (125 33)

(132 32) (137 62) (139 9) (141 30) (145 36)

(146 14) (147 43) (150 6) (151 41) (153 29)

(156 35) (157 49) (158 47) (160 47) (163 78)

(165 50) (166 93) (168 40) (169 28) (171 51)

(172 6) (173 12) (179 426) (181 19) (184 12)

(186 11) (187 42) (188 52) (189 13) (191 92)

(192 24) (193 37) (195 14) (199 14) (205 39)

(206 30) (207 1000) (208 94) (210 37) (211 8)

(213 44) (215 20) (220 30) (222 370) (223 131)

(224 11) (230 7)

NAME:Pyridine, 2,6-diamino-

COMMENT: 41.4476 min KOLYMAAUG-27-2003

FORM:C5H7N3

CASNO:141-86-6

RT:41.448

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 68

( 39 171) ( 40 4) ( 43 11) ( 51 2) ( 53 34)

( 54 149) ( 65 25) ( 67 7) ( 75 2) ( 77 6)

( 78 8) ( 79 61) ( 82 483) ( 91 46) ( 93 20)

( 94 6) ( 95 37) (106 4) (107 64) (108 122)

(109 1000) (110 80) (119 16) (120 8) (121 13)

(130 14) (131 19) (132 8) (137 10) (141 13)

(148 22) (149 58) (150 13) (151 8) (156 13)

(158 11) (159 25) (162 18) (166 13) (169 8)

(172 33) (173 6) (174 20) (175 25) (184 21)

(186 8) (187 29) (189 18) (190 17) (191 6)

(197 15) (202 14) (204 7) (206 8) (207 15)

(208 38) (209 7) (215 11) (221 4) (227 3)

(228 13) (229 6) (232 13) (233 3) (237 5)

(241 2) (242 10) (270 2)

NAME:Furan, 2,4-dimethyl-

FORM:C6H8O

CASNO:3710-43-8

RI:983.2

RW:

RT:21.122

COMMENT: Oxirane, ethenyl-|RI:715.00

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 20

( 37 65) ( 38 95) ( 39 589) ( 40 86) ( 41 175)

( 49 15) ( 50 85) ( 51 130) ( 53 884) ( 54 51)

( 62 45) ( 65 247) ( 66 52) ( 67 904) ( 68 89)

( 81 557) ( 82 92) ( 95 668) ( 96 1000) ( 97 85)

NAME:Dichlorobenzene

COMMENT: 21.3226 min MANNUIJUNE-20-2003

CASNO:Dichlorobenzene

RT:21.323

SOURCE:\\Moab\shared\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 28

( 38 12) ( 40 12) ( 41 6) ( 44 12) ( 47 11)

( 50 45) ( 51 9) ( 53 21) ( 55 7) ( 57 10)

( 61 9) ( 65 21) ( 74 169) ( 75 243) ( 76 22)

( 95 40) ( 97 12) (108 30) (109 37) (110 45)

(111 491) (112 45) (123 11) (146 1000) (148 600)

(149 49) (150 85) (207 28)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: |RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 18) ( 38 16) ( 39 56) ( 42 74) ( 43 61)

( 49 11) ( 50 88) ( 51 151) ( 52 38) ( 53 511)

( 54 25) ( 79 16) ( 81 133) (109 1000) (110 844)

(111 79)

NAME:Phenol

COMMENT: |RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 85) ( 38 85) ( 39 556) ( 40 90) ( 50 93)

( 51 96) ( 53 47) ( 54 6) ( 55 7) ( 58 11)

( 61 50) ( 62 57) ( 63 97) ( 64 23) ( 65 335)

( 66 711) ( 67 50) ( 73 19) ( 74 29) ( 79 12)

( 94 1000) ( 95 90)

NAME:Dichlorobenzonitrile

COMMENT: 32.9219 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:dichlorobenzonitrile

RT:32.922

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 15

( 49 9) ( 74 49) ( 75 53) ( 76 13) ( 84 20)

( 99 53) (100 204) (135 51) (136 204) (144 24)

(171 1000) (172 91) (173 685) (174 58) (175 112)

NAME:Piperidine-2,5-dione

COMMENT: 25.5735 min SCHUUR583\_050701102108|RI:1114.00

RI:1114.00

CASNO:52065-78-8

RT:32.922

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 42 97) ( 56 96) ( 58 78) ( 84 759) ( 85 465)

(113 1000) (114 69)

NAME:Chlorobenzonitrile

COMMENT: 28.1526 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzonitrile

RT:28.153

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 50 62) ( 51 33) ( 52 14) ( 74 64) ( 75 173)

( 76 50) ( 99 36) (100 33) (101 34) (102 378)

(103 32) (110 38) (137 1000) (138 90) (139 337)

(140 34)

NAME:Chlorobenzaldehyde

COMMENT: 26.5136 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzaldehyde

RT:26.514

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 50 127) ( 74 119) ( 76 67) (112 59) (139 1000)

(140 521) (141 375) (142 182)

NAME:Chlorobenzaldehyde

COMMENT: 26.5136 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzaldehyde

RT:26.514

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 12

( 50 116) ( 51 58) ( 74 111) ( 75 184) ( 76 64)

(111 302) (112 54) (113 88) (139 1000) (140 492)

(141 356) (142 157)

NAME:Chlorobenzaldehyde

COMMENT: 26.5136 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzaldehyde

RT:26.514

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 50 103) ( 51 54) ( 73 29) ( 74 125) ( 75 177)

( 77 62) (111 438) (112 60) (113 128) (139 1000)

(140 504) (141 355) (142 161)

NAME:Chlorobenzonitrile

COMMENT: 26.5136 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzonitrile

RT:28.153

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 16

( 50 62) ( 51 33) ( 52 14) ( 74 64) ( 75 173)

( 76 50) ( 99 36) (100 33) (101 34) (102 378)

(103 32) (110 38) (137 1000) (138 90) (139 337)

(140 34)

NAME:Chlorobenzaldehyde

COMMENT: 26.5136 min SCHUUR583\_050701102108

CASNO:Chlorobenzaldehyde

RT:26.514

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 50 103) ( 51 54) ( 73 29) ( 74 125) ( 75 177)

( 77 62) (111 438) (112 60) (113 128) (139 1000)

(140 504) (141 355) (142 161)

NAME:2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: 36.0075 min SCHUUR583\_050701102108|RI:1484.00

RI:1484.00

FORM:C14H20O2

CASNO:719-22-2

RT:36.008

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 57

( 37 16) ( 39 52) ( 41 76) ( 42 22) ( 43 82)

( 53 30) ( 57 62) ( 65 70) ( 66 19) ( 67 75)

( 77 72) ( 79 120) ( 81 38) ( 91 162) ( 93 92)

( 95 101) (105 97) (107 210) (109 80) (110 29)

(115 59) (117 103) (118 58) (119 117) (121 340)

(122 67) (123 82) (128 48) (131 125) (133 68)

(134 47) (135 509) (136 181) (137 60) (144 83)

(145 94) (146 65) (147 75) (149 444) (150 80)

(159 342) (161 112) (163 435) (164 199) (165 64)

(175 25) (177 1000) (178 148) (179 87) (187 281)

(188 56) (191 91) (192 210) (205 385) (220 429)

(221 86) (223 25)

NAME:Chlorobenzaldehyde

CASNO:Chlorobenzaldehyde

RT:26.514

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 50 103) ( 51 54) ( 73 29) ( 74 125) ( 75 178)

( 77 63) (111 434) (112 59) (113 129) (139 1000)

(140 506) (141 359) (142 162)

NAME:Furan, 2-ethyl-5-methyl-

COMMENT: |RI:799.00

RI:799.00

FORM:C7H10O

CASNO:1703-52-2

RT:19.160

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 64) ( 41 46) ( 43 155) ( 50 27) ( 51 41)

( 65 115) ( 67 85) ( 77 29) ( 79 47) ( 94 10)

( 95 1000) ( 96 64) (109 31) (110 330)

NAME:Thiophene, 3-methyl-

COMMENT: |RI:776.00

RI:776.00

FORM:C5H6S

CASNO:616-44-4

RT:13.671

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 2

( 97 1000) ( 98 452)

NAME:2(3H)-Benzofuranone, 3-methyl-

COMMENT: 29.4195 min KOLYMAJUNE-3-2003|RI:1281.80

RI:1281.80

CASNO:32267-71-3

RT:29.419

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 91 1000) ( 92 155) (119 213) (120 592) (148 495)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl-

COMMENT: |RI:1041.00

RI:1041.00

FORM:C6H8O2

CASNO:80-71-7

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 331) ( 41 408) ( 42 79) ( 43 241) ( 50 65)

( 51 61) ( 53 82) ( 55 345) ( 56 199) ( 69 222)

( 70 43) ( 83 254) ( 84 588) ( 85 36) ( 97 65)

(112 1000) (113 69)

NAME:Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: 35.7802 min KOLYMAAUG-27-2003

CASNO:96-76-4

RT:35.780

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 42

( 39 10) ( 41 51) ( 43 5) ( 51 8) ( 55 5)

( 57 160) ( 67 8) ( 69 1) ( 77 24) ( 91 33)

( 93 4) (103 7) (105 24) (107 50) (109 4)

(115 31) (119 26) (121 9) (123 3) (127 8)

(128 20) (130 15) (131 19) (133 25) (135 21)

(141 8) (142 7) (144 4) (147 37) (148 12)

(150 3) (159 8) (161 14) (163 131) (165 4)

(175 78) (176 15) (191 1000) (192 164) (193 17)

(206 229) (207 23)

NAME:2-Butanone

COMMENT: 6.4180 min Y4SEPT-9-03|RI:595.00

RI:595.00

CASNO:78-93-3

RT:6.418

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 39 55) ( 42 45) ( 43 1000) ( 50 18) ( 57 275)

( 72 47)

NAME:Levoglucosan

CASNO:498-07-7

RT:37.430

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 126) ( 41 113) ( 42 636) ( 43 217) ( 44 90)

( 45 142) ( 47 77) ( 55 184) ( 57 154) ( 60 1000)

( 61 77) ( 69 96) ( 70 68) ( 71 130) ( 73 547)

( 89 28) ( 97 192) ( 98 78) (101 23)

NAME:Tridecane

COMMENT: |RI:1300.00

RI:1300.00

FORM:C13H28

CASNO:629-50-5

RT:30.060

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 522) ( 41 1000) ( 42 87) ( 43 627) ( 55 185)

( 56 135) ( 57 862) ( 58 54) ( 69 112) ( 70 148)

( 71 724) ( 83 125) ( 84 70) ( 85 434) ( 98 63)

( 99 103) (184 24)

NAME:Pentadecane

COMMENT: |RI:1500.00

RI:1500.00

FORM:C15H32

CASNO:629-62-9

RT:35.303

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 24

( 39 417) ( 41 899) ( 42 67) ( 43 613) ( 55 205)

( 56 105) ( 57 1000) ( 67 68) ( 69 113) ( 70 147)

( 71 845) ( 82 85) ( 83 141) ( 84 86) ( 85 622)

( 97 145) ( 98 69) ( 99 234) (111 67) (113 104)

(127 57) (154 56) (168 22) (212 37)

NAME:2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: Manual Y3-AUG-12-2003.FIN|RI:1484.00

RI:1484.00

FORM:C14H20O2

CASNO:719-22-2

RT:36.008

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 156

( 38 1) ( 39 50) ( 40 5) ( 41 162) ( 42 9)

( 43 140) ( 44 4) ( 49 1) ( 50 3) ( 51 13)

( 52 5) ( 53 13) ( 54 1) ( 55 31) ( 56 14)

( 57 183) ( 58 9) ( 59 1) ( 62 1) ( 63 4)

( 64 3) ( 65 32) ( 66 5) ( 67 43) ( 68 10)

( 69 33) ( 70 31) ( 71 129) ( 72 6) ( 73 1)

( 77 31) ( 78 11) ( 79 48) ( 80 6) ( 81 22)

( 82 17) ( 83 37) ( 84 27) ( 85 88) ( 86 5)

( 87 1) ( 89 1) ( 90 1) ( 91 101) ( 92 22)

( 93 69) ( 94 18) ( 95 69) ( 96 5) ( 97 22)

( 98 7) ( 99 53) (100 4) (101 1) (102 4)

(103 13) (104 6) (105 78) (106 14) (107 180)

(108 29) (109 51) (110 29) (111 9) (112 9)

(113 39) (114 1) (115 27) (116 9) (117 57)

(118 35) (119 90) (120 19) (121 209) (122 41)

(123 29) (124 9) (125 2) (126 5) (127 29)

(128 18) (129 28) (130 9) (131 94) (132 23)

(133 58) (134 33) (135 473) (136 235) (137 48)

(138 13) (139 6) (140 5) (141 11) (142 2)

(143 14) (144 72) (145 75) (146 45) (147 77)

(148 17) (149 433) (150 109) (151 16) (152 2)

(154 2) (155 18) (157 20) (158 5) (159 315)

(160 56) (161 45) (162 56) (163 412) (164 216)

(165 43) (166 7) (167 1) (169 4) (171 1)

(172 9) (173 15) (174 3) (175 23) (176 12)

(177 1000) (178 163) (179 31) (180 6) (182 2)

(183 3) (187 282) (188 40) (189 3) (190 15)

(191 52) (192 165) (193 30) (194 2) (196 1)

(197 2) (198 1) (201 10) (202 22) (203 20)

(204 2) (205 436) (206 69) (207 39) (208 5)

(211 3) (219 14) (220 612) (221 114) (222 23)

(223 6)

NAME:2,6-Di-tert-butyl-4-sec-butylphenol

COMMENT: RI=1631.6, 38.6268 min Y3-AUG-12-2003|RI:1631.60

RI:1631.60

CASNO:17540-75-9

RT:38.627

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 41 15) ( 57 102) (131 24) (133 26) (145 13)

(147 14) (161 28) (163 24) (187 12) (217 145)

(219 49) (220 8) (231 16) (233 1000) (234 165)

(247 229) (248 40) (262 243) (263 53)

NAME:Benzonitrile

COMMENT: |RI:1002.00

RI:1002.00

FORM:C7H5N

CASNO:100-47-0

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 5

( 50 122) ( 51 66) ( 76 402) (103 1000) (104 76)

NAME:Acetophenone

COMMENT: RI=982.7, 20.0289 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1084.00

RI:1084.00

FORM:C8H8O

CASNO:98-86-2

RT:22.2177

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 51 71) ( 74 21) ( 77 375) (105 1000) (106 75)

(120 147)

NAME:Cinnamic acid, p-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1447.2, 40.2893 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1710.00

RI:1710.00

FORM:C11H12O3

CASNO:832-01-9

RT:40.289

RSN:192

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 22

( 63 46) ( 77 76) ( 79 111) ( 89 132) ( 90 96)

( 91 50) ( 92 33) (102 36) (103 114) (105 46)

(117 42) (118 185) (119 48) (121 40) (132 107)

(133 513) (134 249) (146 27) (147 31) (161 1000)

(192 650) (193 87)

NAME:Benzoic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1394.7, 38.0640 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1394.70

RI:1394.70

FORM:C10H12O4

CASNO:2150-38-1

RT:38.064

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 41

( 43 14) ( 59 42) ( 66 24) ( 67 13) ( 68 3)

( 69 29) ( 75 29) ( 76 18) ( 77 112) ( 79 170)

( 80 30) ( 81 35) ( 82 5) ( 91 70) ( 92 34)

( 93 60) ( 94 108) (107 82) (108 43) (109 52)

(110 19) (115 33) (118 14) (119 51) (121 122)

(123 34) (124 22) (129 23) (133 4) (135 52)

(136 38) (137 275) (138 32) (139 49) (149 116)

(153 42) (160 12) (165 1000) (166 109) (196 747)

(197 90)

NAME:Methyl p-methoxycinnamate, cis

COMMENT: RI=1397.4, 38.1768 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1397.40

RI:1397.40

FORM:C11H12O3

CASNO:19310-29-3

RT:38.177

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 51

( 39 55) ( 43 3) ( 53 3) ( 63 115) ( 68 75)

( 75 68) ( 77 219) ( 78 64) ( 80 75) ( 82 41)

( 83 33) ( 89 262) ( 90 246) ( 93 126) ( 95 54)

( 96 19) ( 98 26) (102 26) (103 125) (105 110)

(109 116) (111 37) (113 32) (117 39) (118 298)

(121 73) (123 5) (127 99) (131 18) (133 320)

(134 405) (135 71) (137 100) (138 61) (146 45)

(147 36) (148 20) (149 145) (151 225) (152 18)

(159 36) (160 57) (161 1000) (162 143) (163 70)

(178 51) (179 6) (192 930) (193 83) (194 63)

(206 30)

NAME:Acetic acid, methyl ester

COMMENT: RI=574.1, 5.7401 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:574.10

RI:574.10

CASNO:79-20-9

RT:5.740

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 3

( 42 90) ( 43 1000) ( 74 115)

NAME:1-Pentene, 2-methyl-

COMMENT: RI=594.5, 6.2990 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:594.50

RI:594.50

CASNO:763-29-1

RT:6.299

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 42) ( 39 604) ( 40 96) ( 41 1000) ( 42 159)

( 50 34) ( 53 76) ( 55 331) ( 56 603) ( 69 347)

NAME:Acetamide, N-hydroxy

COMMENT: RI=675.6, 8.5069 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:675.60

RI:675.60

CASNO:546-88-3

RT:8.507

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 7) ( 42 53) ( 43 1000) ( 44 17) ( 45 130)

( 46 5) ( 53 6) ( 57 20) ( 74 13) ( 75 110)

NAME:2-Pentanone

COMMENT: RI=694.2, 9.0130 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:694.20

RI:694.20

FORM:C5H10O

CASNO:107-87-9

RT:9.013

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 6

( 39 189) ( 41 322) ( 43 1000) ( 58 200) ( 71 212)

( 86 275)

NAME:4-Penten-2-one, 4-methyl-

COMMENT: RI=798.6, 12.9245 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:798.60

RI:798.60

CASNO:3744-02-3

RT:12.925

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 19

( 38 10) ( 39 33) ( 40 7) ( 42 89) ( 43 1000)

( 44 8) ( 53 7) ( 55 52) ( 56 17) ( 59 10)

( 67 10) ( 69 16) ( 74 2) ( 75 2) ( 80 5)

( 81 10) ( 83 8) ( 84 19) ( 85 13)

NAME:3-Thujene

COMMENT: RI=934.9, 18.2426 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:934.90

RI:934.90

FORM:C10H16

CASNO:2867-05-2

RT:18.243

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 23

( 38 14) ( 39 84) ( 44 2) ( 45 3) ( 53 19)

( 58 27) ( 63 21) ( 65 66) ( 68 51) ( 70 38)

( 77 341) ( 78 72) ( 79 190) ( 91 936) ( 92 631)

( 93 1000) ( 94 168) ( 97 47) ( 98 117) (105 170)

(107 52) (109 79) (136 102)

NAME:B-Pinene

COMMENT: RI=982.7, 20.0289 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:982.70

RI:982.70

FORM:C10H16

CASNO:127-91-3

RT:20.029

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 9

( 77 233) ( 79 254) ( 80 203) ( 91 573) ( 92 168)

( 93 1000) (107 106) (121 231) (136 97)

NAME:Bezoic acid, methyl ester

COMMENT: RI=1108.9, 24.3630 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1108.90

RI:1108.90

CASNO:93-58-3

RT:24.363

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 12

( 50 34) ( 51 112) ( 74 27) ( 76 18) ( 77 434)

( 91 51) ( 92 201) (105 1000) (106 90) (135 67)

(136 315) (137 48)

NAME:Benzene, 1-ethenyl-4-methoxy-

COMMENT: RI=1168.7, 26.2455 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1168.70

RI:1168.70

CASNO:637-69-4

RT:26.246

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 17

( 39 36) ( 51 15) ( 63 42) ( 65 151) ( 74 10)

( 77 28) ( 89 43) ( 90 16) ( 91 482) ( 92 43)

(102 22) (103 27) (104 46) (119 612) (120 57)

(134 1000) (135 101)

NAME:Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethoxy-

COMMENT: RI=1244.6, 28.4958 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1244.60

RI:1244.60

CASNO:6380-23-0

RT:28.496

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 9

( 41 210) ( 55 200) ( 71 167) ( 83 267) (113 425)

(125 329) (141 397) (142 1000) (156 528)

NAME:Cinnamic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1908.0, 44.5640 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1910.00

RI:1910.00

FORM:C12H14O4

CASNO:5396-64-5

RT:44.564

RSN:222

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 15

( 63 32) ( 77 81) ( 89 79) ( 91 202) (103 155)

(119 157) (133 95) (147 280) (163 130) (164 184)

(179 61) (191 619) (207 193) (222 1000) (223 147)

NAME:Benzaldehyde, 4-methoxy-

COMMENT: RI=1222.2, 27.8604 min KOHALA-CHEIRO-LIVE-TMAH|RI:1222.20

RI:1222.20

CASNO:123-11-5

RT:27.860

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH Spectra Feb 17 2006.MSL

NUM PEAKS: 30

( 38 20) ( 39 117) ( 42 11) ( 43 67) ( 51 32)

( 55 83) ( 63 50) ( 64 28) ( 66 18) ( 67 44)

( 68 53) ( 69 35) ( 70 17) ( 77 473) ( 79 64)

( 80 23) ( 86 13) ( 91 66) ( 92 174) (105 21)

(107 442) (109 122) (111 79) (112 27) (120 100)

(125 105) (135 977) (136 1000) (137 86) (140 26)

NAME:Toluene

COMMENT: |RI:770.00

RI:770.00

FORM:C7H8

CASNO:108-88-3

RT:13.252

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 38 10) ( 39 61) ( 41 2) ( 43 6) ( 50 24)

( 51 25) ( 52 5) ( 62 21) ( 63 60) ( 65 120)

( 66 11) ( 74 8) ( 77 3) ( 79 3) ( 85 4)

( 91 1000) ( 92 526) ( 93 39)

NAME:Benzene, 1,3,5-tri-tert-butyl-

COMMENT: RI=1406.4, 33.0703 min ISTD-03-14-2006\_060314142928|RI:1406.40

RI:1406.40

FORM:C18H30

CASNO:1460-02-2

RT:33.070

RF:1

RSN:231

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Feb 20 2006.MSL

NUM PEAKS: 49

( 39 10) ( 41 59) ( 42 2) ( 55 3) ( 57 418)

( 58 18) ( 67 1) ( 78 1) ( 79 4) ( 91 16)

(105 11) (115 9) (116 3) (117 13) (119 21)

(127 2) (128 15) (129 14) (130 3) (131 19)

(133 8) (141 7) (142 6) (143 7) (144 5)

(145 7) (147 15) (152 2) (155 2) (157 4)

(159 18) (160 4) (161 5) (173 9) (174 2)

(175 95) (176 14) (189 4) (201 4) (203 26)

(204 4) (215 9) (216 3) (231 1000) (232 186)

(233 17) (246 190) (247 37) (248 4)

NAME:Ethyl Vanillin

COMMENT: RI=1486.5, 35.0789 min ISTD-03-14-2006\_060314142928|RI:1486.50

RI:1486.50

FORM:C9H10O3

CASNO:121-32-4

RT:35.079

RSN:166

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Feb 20 2006.MSL

NUM PEAKS: 30

( 38 5) ( 39 22) ( 43 2) ( 50 15) ( 51 23)

( 52 14) ( 53 28) ( 54 5) ( 55 15) ( 62 5)

( 63 19) ( 64 8) ( 65 10) ( 77 6) ( 79 14)

( 81 91) ( 82 22) ( 91 12) (107 11) (108 14)

(109 153) (110 38) (111 4) (121 4) (137 1000)

(138 379) (139 30) (165 9) (166 803) (167 75)

NAME:Furan, 2-ethyl-

COMMENT: |RI:689.00

RI:689.00

CASNO:3208-16-0

RT:16.133

SOURCE:Z:\JonBackup\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 37 25) ( 39 129) ( 50 27) ( 51 67) ( 53 463)

( 54 27) ( 56 52) ( 61 22) ( 63 25) ( 65 79)

( 66 21) ( 67 66) ( 77 35) ( 79 72) ( 81 1000)

( 82 46) ( 95 33) ( 96 312) ( 97 21)

NAME:3-Furaldehyde

COMMENT: |RI:827.00

RI:827.00

FORM:C5H4O2

CASNO:498-60-2

RT:15.440

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 36 11) ( 37 80) ( 38 101) ( 39 335) ( 40 15)

( 41 40) ( 43 76) ( 55 48) ( 57 35) ( 67 158)

( 74 28) ( 82 27) ( 87 25) ( 95 1000) ( 96 431)

( 97 28) ( 99 21)

NAME:Syringic acid

COMMENT: RI=1456.6, 34.3297 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1456.60

RI:1456.60

FORM:C9H10O5

CASNO:530-57-4

RT:34.330

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff March 22 2006.MSL

NUM PEAKS: 90

( 40 5) ( 41 7) ( 44 3) ( 51 23) ( 52 3)

( 53 22) ( 54 6) ( 63 9) ( 65 23) ( 66 7)

( 67 22) ( 68 6) ( 69 71) ( 70 2) ( 73 15)

( 74 5) ( 77 59) ( 78 17) ( 79 15) ( 81 23)

( 82 13) ( 91 42) ( 92 18) ( 93 34) ( 94 27)

( 95 200) ( 97 77) ( 98 13) (107 14) (108 7)

(109 48) (110 14) (111 44) (112 9) (114 4)

(115 12) (119 20) (121 25) (122 12) (123 359)

(124 35) (125 29) (126 14) (128 17) (129 29)

(132 4) (135 8) (137 77) (139 8) (140 189)

(143 2) (148 20) (149 24) (150 24) (153 97)

(154 18) (155 174) (156 38) (157 19) (159 32)

(160 3) (162 5) (164 7) (167 34) (168 167)

(170 12) (172 2) (174 7) (179 7) (180 9)

(182 32) (183 798) (184 92) (185 14) (191 2)

(194 16) (197 18) (198 1000) (199 119) (200 17)

(208 16) (211 4) (221 6) (223 3) (225 3)

(241 2) (249 7) (251 5) (283 9) (295 4)

NAME:Benzoic acid, 3,4,5-trimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1737.9, 40.9977 min KOHALA-OHIA-DEAD+5TMAH+2ISTD2|RI:1736.00

RI:1736.00

CASNO:1916-07-0

RT:40.9635

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 69

( 38 5) ( 39 9) ( 51 7) ( 53 16) ( 59 18)

( 63 6) ( 65 14) ( 66 12) ( 67 6) ( 69 19)

( 75 6) ( 77 37) ( 78 6) ( 79 91) ( 80 9)

( 81 24) ( 92 7) ( 93 11) ( 94 8) ( 95 42)

( 96 12) ( 97 11) (107 102) (108 31) (109 36)

(110 6) (111 9) (112 11) (121 14) (122 13)

(123 71) (124 143) (125 57) (126 5) (134 8)

(135 22) (136 19) (137 33) (138 8) (139 25)

(140 62) (141 7) (149 7) (150 7) (151 205)

(152 50) (153 54) (155 259) (156 25) (165 39)

(166 17) (167 47) (168 66) (169 11) (179 45)

(180 22) (181 15) (183 92) (184 10) (195 196)

(196 36) (208 10) (210 10) (211 599) (212 75)

(213 6) (226 1000) (227 130) (228 18)

NAME:Methylsyringol

COMMENT: RI=1324.3, 30.7612 min KOHALA-OHIA-DEAD+5TMAH+2ISTD2|RI:1324.30

RI:1324.30

FORM:C9H12O3

CASNO:634-36-6

RT:30.761

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 35

( 37 5) ( 38 8) ( 39 76) ( 50 16) ( 51 30)

( 52 9) ( 53 18) ( 63 13) ( 64 8) ( 65 167)

( 66 16) ( 67 26) ( 77 42) ( 79 31) ( 81 16)

( 82 60) ( 93 514) ( 94 34) ( 95 159) ( 96 9)

( 97 13) (107 53) (108 31) (109 10) (110 365)

(111 25) (125 287) (137 23) (138 31) (152 26)

(153 730) (154 69) (168 1000) (169 110) (170 12)

NAME:Trimethyl 1,2,3-propanetricarboxylate

COMMENT: RI=1416.6, 33.3261 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1416.60

RI:1416.60

FORM:C9H14O6

CASNO:6138-26-7

RT:33.326

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 77) ( 40 10) ( 41 74) ( 42 13) ( 43 28)

( 45 37) ( 47 6) ( 53 23) ( 55 58) ( 57 16)

( 58 15) ( 59 32) ( 63 10) ( 68 12) ( 69 94)

( 71 56) ( 72 13) ( 73 27) ( 74 16) ( 75 46)

( 77 13) ( 82 21) ( 83 13) ( 85 71) ( 87 58)

( 92 5) ( 95 250) ( 96 12) ( 97 10) ( 98 91)

( 99 299) (100 47) (101 75) (102 4) (107 10)

(108 14) (111 7) (113 105) (114 8) (123 10)

(126 858) (127 1000) (128 76) (131 34) (134 6)

(136 10) (140 13) (145 32) (147 21) (149 21)

(154 210) (155 54) (156 21) (158 321) (159 415)

(160 48) (167 4) (169 8) (171 25) (172 7)

(175 6) (186 342) (187 812) (188 118) (192 4)

(205 3) (208 9) (221 7) (223 4)

NAME:2,4,6-Trimethoxytoluene

COMMENT: RI=1499.3, 35.3984 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1499.30

RI:1499.30

FORM:C10H14O3

CASNO:14107-97-2

RT:35.398

RF:1

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 37

( 39 27) ( 64 14) ( 65 35) ( 66 21) ( 69 19)

( 77 89) ( 79 112) ( 80 19) ( 89 10) ( 91 143)

( 93 51) ( 94 18) ( 95 33) (107 61) (108 47)

(109 108) (120 38) (121 205) (122 43) (123 107)

(124 68) (135 69) (136 70) (137 82) (138 101)

(139 164) (149 78) (151 479) (152 64) (153 374)

(163 53) (164 122) (167 229) (168 47) (181 172)

(182 1000) (183 138)

NAME:Benzaldehyde, 3,4-dimethoxy-

COMMENT: RI=1507.3, 35.5990 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1507.30

RI:1507.30

FORM:C9H10O3

CASNO:120-14-9

RT:35.599

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 20

( 39 49) ( 50 39) ( 51 67) ( 52 27) ( 63 31)

( 65 100) ( 66 29) ( 67 61) ( 77 222) ( 79 88)

( 80 21) ( 95 223) (105 45) (119 41) (127 55)

(137 102) (151 119) (165 808) (166 1000) (167 96)

NAME:1,4-Benzenedicarboxylic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1525.4, 36.0536 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1525.40

RI:1525.40

FORM:C10H10O4

CASNO:120-61-6

RT:36.054

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 74

( 39 11) ( 40 1) ( 41 3) ( 43 15) ( 44 3)

( 50 30) ( 51 4) ( 52 4) ( 54 3) ( 55 8)

( 57 4) ( 62 4) ( 65 8) ( 69 3) ( 73 5)

( 74 22) ( 75 32) ( 76 37) ( 77 64) ( 81 9)

( 82 7) ( 85 2) ( 87 15) ( 89 2) ( 92 11)

( 94 3) ( 95 8) (101 10) (103 72) (104 36)

(105 12) (106 4) (107 23) (109 7) (112 4)

(119 33) (120 36) (122 3) (124 2) (125 23)

(129 8) (134 3) (135 366) (136 34) (140 10)

(141 4) (142 4) (143 21) (144 5) (146 3)

(148 4) (149 5) (153 25) (163 1000) (164 107)

(165 32) (166 5) (168 37) (169 15) (171 15)

(177 5) (179 230) (180 18) (181 5) (189 5)

(190 4) (192 3) (194 236) (195 30) (198 17)

(207 15) (251 1) (268 2) (282 3)

NAME:Ethanone, 1-(3,4-dimethoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1587.9, 37.6200 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1587.90

RI:1587.90

FORM:C10H12O3

CASNO:1131-62-0

RT:37.620

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 11

( 51 33) ( 65 30) ( 79 133) ( 94 42) (122 86)

(137 248) (165 1000) (166 142) (177 196) (180 596)

(181 86)

NAME:Benzoic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1610.1, 38.1489 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1610.10

RI:1610.10

FORM:C10H12O4

CASNO:2150-38-1

RT:38.149

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 94

( 39 13) ( 41 4) ( 45 2) ( 50 16) ( 51 29)

( 52 5) ( 54 2) ( 56 2) ( 58 6) ( 59 21)

( 61 3) ( 63 16) ( 64 3) ( 65 20) ( 66 9)

( 67 12) ( 68 1) ( 69 10) ( 70 1) ( 71 7)

( 74 6) ( 76 14) ( 77 75) ( 78 6) ( 79 117)

( 80 7) ( 81 40) ( 82 17) ( 83 6) ( 90 2)

( 91 57) ( 92 13) ( 93 44) ( 94 47) ( 97 1)

( 98 5) ( 99 2) (105 18) (106 3) (107 41)

(108 10) (109 48) (110 15) (111 14) (112 3)

(113 18) (115 2) (118 3) (119 21) (120 16)

(121 90) (122 38) (123 23) (124 5) (125 53)

(126 11) (127 14) (130 8) (131 10) (133 3)

(134 1) (135 29) (136 13) (137 142) (138 20)

(139 10) (141 11) (142 17) (143 3) (149 46)

(150 17) (151 22) (152 6) (153 21) (155 5)

(156 7) (157 1) (160 1) (164 3) (165 966)

(166 123) (167 19) (168 4) (169 1) (171 2)

(173 9) (177 3) (178 2) (180 4) (181 92)

(195 14) (196 1000) (197 80) (198 23)

NAME:Cinnamic acid, p-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1710.1, 40.3781 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1710.00

RI:1710.00

FORM:C11H12O3

CASNO:832-01-9

RT:40.289

RSN:192

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 74

( 39 3) ( 41 5) ( 50 6) ( 51 7) ( 53 3)

( 55 14) ( 56 12) ( 57 4) ( 62 7) ( 63 36)

( 64 11) ( 65 5) ( 66 1) ( 69 5) ( 72 3)

( 75 8) ( 76 13) ( 77 49) ( 78 12) ( 79 83)

( 80 12) ( 83 4) ( 89 81) ( 90 68) ( 91 25)

( 92 19) ( 94 4) ( 95 3) (101 2) (102 24)

(103 75) (104 15) (105 26) (107 5) (108 24)

(112 6) (116 11) (117 19) (118 105) (119 33)

(120 8) (121 26) (125 23) (126 8) (130 6)

(132 68) (133 396) (134 204) (135 22) (144 4)

(145 17) (146 9) (147 30) (148 7) (151 16)

(153 32) (154 56) (158 6) (159 14) (160 11)

(161 1000) (162 111) (163 6) (166 38) (174 15)

(177 3) (180 2) (185 5) (190 6) (191 49)

(192 792) (193 68) (194 16) (196 3)

NAME:Cinnamic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1912.4, 44.6546 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1910.00

RI:1910.00

FORM:C12H14O4

CASNO:5396-64-5

RT:44.564

RSN:222

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 32

( 51 22) ( 77 35) ( 89 35) ( 90 11) ( 91 111)

( 92 18) (103 107) (105 44) (117 25) (118 29)

(119 99) (120 30) (132 22) (133 43) (136 32)

(137 60) (138 22) (147 204) (148 85) (149 42)

(162 64) (163 103) (164 156) (175 27) (179 51)

(191 548) (192 74) (207 216) (208 35) (222 1000)

(223 141) (224 30)

NAME:[2-(N,N-Dimethyl)]-1,2-propanediamine

COMMENT: RI=888.0, 16.4616 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:888.00

RI:888.00

FORM:C5H14N2

CASNO:C5H14N2

RT:16.462

RSN:72

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 20

( 40 2) ( 41 6) ( 42 146) ( 43 10) ( 44 236)

( 45 16) ( 54 6) ( 55 8) ( 56 61) ( 57 35)

( 58 7) ( 70 129) ( 71 13) ( 72 1000) ( 73 55)

( 88 9) (102 7) (116 6) (131 3) (132 4)

NAME:Benzene, methoxy-

COMMENT: RI=928.5, 18.0035 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:928.50

RI:928.50

FORM:C7H8O

CASNO:100-66-3

RT:18.003

RSN:108

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 42

( 37 30) ( 38 32) ( 39 182) ( 40 19) ( 45 13)

( 51 114) ( 54 6) ( 57 9) ( 61 8) ( 63 134)

( 64 31) ( 65 415) ( 67 13) ( 68 8) ( 69 8)

( 74 27) ( 75 23) ( 78 911) ( 79 208) ( 83 12)

( 84 9) ( 91 12) ( 92 15) ( 93 25) (100 4)

(105 14) (108 1000) (109 63) (110 32) (117 5)

(126 5) (133 13) (135 29) (137 8) (179 7)

(205 11) (208 23) (209 15) (211 12) (221 30)

(249 12) (284 7)

NAME:1-Propanol, 2-(dimethylamino)-2-methyl-

COMMENT: RI=953.1, 18.9221 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:953.10

RI:953.10

FORM:C6H15NO

CASNO:7005-47-2

RT:18.922

RSN:86

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 29) ( 41 24) ( 42 62) ( 43 24) ( 44 92)

( 54 11) ( 55 28) ( 56 220) ( 57 12) ( 70 150)

( 71 122) ( 84 82) ( 86 1000) ( 87 82)

NAME:Succinic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1039.2, 22.0125 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1039.20

RI:1039.20

FORM:C6H10O4

CASNO:106-65-0

RT:22.012

RSN:115

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 11

( 41 77) ( 55 437) ( 57 46) ( 59 184) ( 86 26)

( 87 624) ( 88 23) ( 95 107) (114 286) (115 1000)

(116 53)

NAME:Benzaldehyde, 4-methoxy-

COMMENT: RI=1225.8, 27.9630 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1225.80

RI:1225.80

FORM:C8H8O2

CASNO:123-11-5

RT:27.963

RSN:135

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 28

( 50 52) ( 51 55) ( 61 15) ( 62 33) ( 63 165)

( 64 57) ( 65 46) ( 76 11) ( 77 367) ( 78 92)

( 79 54) ( 85 40) ( 92 94) (104 9) (107 524)

(108 91) (109 22) (112 54) (120 11) (135 1000)

(136 933) (137 62) (139 42) (140 67) (145 15)

(146 17) (147 18) (154 57)

NAME:3,4-Dimethoxytoluene

COMMENT: RI=1250.1, 28.6531 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1250.10

RI:1250.10

FORM:C9H12O2

CASNO:494-99-5

RT:28.653

RSN:152

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 50

( 39 46) ( 40 14) ( 43 16) ( 50 13) ( 51 30)

( 52 21) ( 53 28) ( 55 18) ( 61 6) ( 62 11)

( 63 9) ( 64 8) ( 65 96) ( 66 44) ( 74 9)

( 77 149) ( 78 30) ( 79 343) ( 80 12) ( 81 323)

( 82 35) ( 83 29) ( 89 11) ( 91 375) ( 94 43)

( 96 12) ( 97 12) (104 7) (105 14) (107 105)

(109 493) (110 23) (111 30) (114 24) (127 32)

(135 25) (137 424) (138 47) (151 22) (152 1000)

(153 112) (154 11) (155 31) (156 6) (165 12)

(167 22) (170 60) (171 12) (265 9) (281 20)

NAME:Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethoxy-

COMMENT: RI=1380.9, 32.3683 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:1380.90

RI:1380.90

FORM:C10H12O2

CASNO:6380-23-0

RT:32.368

RSN:164

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 15

( 51 40) ( 52 20) ( 65 76) ( 77 181) ( 78 74)

( 91 517) ( 92 43) ( 93 366) ( 94 42) (103 193)

(121 253) (148 30) (149 457) (164 1000) (165 97)

NAME:Acetylfuran

COMMENT: RI=922.7, 17.7857 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:922.70

RI:922.70

CASNO:1192-62-7

RT:17.786

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 32

( 36 2) ( 37 26) ( 38 37) ( 39 206) ( 41 10)

( 43 33) ( 45 9) ( 47 4) ( 48 4) ( 50 21)

( 51 36) ( 53 19) ( 62 5) ( 67 84) ( 72 4)

( 77 13) ( 81 13) ( 82 6) ( 91 7) ( 95 1000)

( 96 56) ( 98 5) (107 35) (108 3) (110 344)

(111 33) (112 2) (122 11) (123 4) (149 6)

(192 3) (195 3)

NAME:Benzene, 1-methoxy-4-methyl-

COMMENT: RI=1032.5, 21.7841 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1032.50

RI:1032.50

CASNO:104-93-8

RT:21.784

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 47

( 41 28) ( 42 8) ( 43 33) ( 50 60) ( 51 37)

( 52 15) ( 53 31) ( 56 9) ( 57 20) ( 60 4)

( 61 18) ( 63 69) ( 64 8) ( 67 25) ( 69 18)

( 75 14) ( 77 392) ( 78 142) ( 79 191) ( 81 46)

( 83 13) ( 84 3) ( 89 45) ( 91 348) ( 92 155)

( 97 4) (103 17) (105 59) (106 15) (107 347)

(108 35) (113 6) (115 8) (116 9) (117 16)

(119 76) (120 62) (121 654) (122 1000) (123 96)

(128 12) (134 19) (136 5) (165 2) (209 4)

(267 12) (281 3)

NAME:3-Ethoxy-4-methoxybenzaldehyde (ISTD+TMAH)

COMMENT: RI=1553.3, 36.7530 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1553.30

RI:1553.30

CASNO:1131-52-8

RT:36.753

RF:1

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 6

( 91 49) (109 104) (123 87) (151 1000) (152 528)

(180 774)

NAME:Asarone

COMMENT: RI=1663.7, 39.3427 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1663.70

RI:1663.70

CASNO:2883-98-9

RT:39.343

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 9

( 91 97) (105 274) (107 78) (133 224) (138 13)

(165 220) (182 18) (193 822) (208 1000)

NAME:Ethanone, 1-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1698.9, 40.1276 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1698.90

RI:1698.90

CASNO:1136-86-3

RT:40.128

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 4

(153 25) (167 120) (195 1000) (210 840)

NAME:1H-Pyrrole-2-carboxaldehyde, 1-methyl-

COMMENT: RI=1021.8, 21.4178 min OLAA-OHIA-2-MINERAL|RI:1021.80

RI:1021.80

CASNO:1192-58-1

RT:21.418

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 4

( 53 445) ( 80 445) (108 1000) (109 678)

NAME:Naphthalene

COMMENT: RI=1214.3, 27.6362 min OLAA-OHIA-2-MINERAL|RI:1214.30

RI:1214.30

CASNO:91-20-3

RT:27.636

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 3

( 39 8) (127 115) (128 1000)

NAME:Benzoic acid, 3,4,5-trimethoxy-, methyl ester

COMMENT: Manual OLAA-OHIA-2-MINERAL.FIN|RI:1736.00

RI:1736.00

CASNO:1916-07-0

RT:40.9635

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 13

( 59 15) ( 79 97) ( 95 47) (107 107) (124 155)

(125 54) (155 243) (183 108) (195 205) (211 588)

(212 82) (226 1000) (227 119)

NAME:Hydrocinnamic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester???

COMMENT: Manual OLAA-OHIA-2-MINERAL.FIN|RI:1737.00

RI:1737.00

CASNO:27798-73-8

RT:0.000

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 71

( 51 5) ( 53 10) ( 54 4) ( 56 3) ( 58 4)

( 65 24) ( 67 19) ( 68 2) ( 71 8) ( 73 13)

( 74 7) ( 77 62) ( 78 15) ( 81 29) ( 83 14)

( 91 87) ( 93 36) ( 96 17) (103 39) (104 4)

(105 11) (106 34) (108 64) (111 9) (115 10)

(116 9) (117 16) (118 9) (119 2) (120 9)

(121 43) (130 6) (131 19) (134 55) (135 34)

(136 14) (137 15) (139 17) (141 18) (145 17)

(146 4) (149 37) (150 12) (151 1000) (152 97)

(161 33) (164 254) (165 37) (166 12) (174 13)

(176 41) (177 13) (179 21) (180 13) (182 4)

(189 7) (193 127) (194 6) (196 3) (197 29)

(198 12) (201 10) (202 1) (204 18) (205 25)

(219 7) (220 7) (224 436) (225 44) (236 9)

(267 14)

NAME:Pyrazolo[5,1-c][1,2,4]benzotriazin-8-ol

COMMENT: RI=1763.2, 41.5627 min OLAA-OHIA-2-MINERAL|RI:1763.20

RI:1763.20

CASNO:14394-47-9

RT:41.563

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 4

( 93 80) (103 114) (186 1000) (187 90)

NAME:cis-Isoeugenol

COMMENT: RI=1425.4, 33.5473 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1425.40

RI:1425.40

CASNO:cis-Isoeugenol

RT:33.547

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 10

( 91 248) ( 93 110) (103 266) (104 178) (121 258)

(131 271) (132 122) (133 180) (149 340) (164 1000)

NAME:cis-Methylisoeugenol

COMMENT: RI=1469.7, 34.6580 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1469.70

RI:1469.70

CASNO:6380-24-1

RT:34.658

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 10

( 77 16) ( 79 89) ( 91 248) (103 129) (105 41)

(107 1000) (108 46) (147 297) (150 44) (163 603)

NAME:Methylisoeugenol

COMMENT: RI=1469.7, 34.6580 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1514.20

RI:1514.20

CASNO:93-16-3

RT:35.772

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 8

( 91 129) (107 621) (108 34) (118 8) (147 200)

(163 427) (178 1000) (179 113)

NAME:3-Acetamidofuran

COMMENT: RI=1243.7, 29.5224 min DM2-HF|RI:1243.70

RI:1243.70

FORM:C6H7NO2

CASNO:59445-85-1

RT:29.522

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 5

( 43 114) ( 54 389) ( 55 215) ( 83 1000) (125 803)

NAME:Benzenepropanenitrile

COMMENT: RI=1268.6, 30.2278 min DM2-HF|RI:1268.60

RI:1268.60

CASNO:645-59-0

RT:30.228

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 38) ( 65 115) ( 78 169) ( 79 26) ( 91 1000)

( 92 76) (103 31) (106 107) (131 272) (134 160)

NAME:1,4:3,6-Dianhydro-a-d-glucopyranose

COMMENT: RI=1228.8, 29.1003 min DM2-HF|RI:1228.80

RI:1228.80

CASNO:DM2-HF-N1004

RT:29.100

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 244) ( 41 186) ( 42 206) ( 57 209) ( 69 1000)

( 70 238) ( 71 39) ( 86 155) ( 95 32) ( 97 58)

( 98 190) ( 99 56) (121 13)

NAME:Acetamide, N-(2,4-dihydroxyphenyl)-

COMMENT: RI=1537.5, 37.3924 min DM2-HF|RI:1537.50

RI:1537.50

CASNO:71516-07-9

RT:37.392

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 5

( 69 182) ( 80 15) (110 26) (125 1000) (167 379)

NAME:Benzene, 1,2-dimethoxy-

COMMENT: RI=1156.7, 25.8673 min 18|RI:1156.70

RI:1156.70

CASNO:91-16-7

RT:25.867

RSN:138

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 29

( 39 93) ( 41 65) ( 50 40) ( 51 61) ( 52 63)

( 53 18) ( 61 5) ( 63 63) ( 65 201) ( 66 13)

( 67 64) ( 74 10) ( 76 5) ( 77 693) ( 78 46)

( 79 15) ( 80 18) ( 92 20) ( 95 579) ( 96 48)

(121 23) (122 18) (123 415) (124 36) (138 1000)

(139 113) (140 11) (184 3) (200 13)

NAME:Benzene, 1,4-dimethoxy-

COMMENT: RI=1179.7, 26.5889 min 18|RI:1179.70

RI:1179.70

CASNO:150-78-7

RT:26.589

RSN:138

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 23

( 39 51) ( 41 68) ( 50 23) ( 51 25) ( 52 34)

( 54 16) ( 62 15) ( 63 72) ( 64 25) ( 65 152)

( 66 15) ( 67 45) ( 75 6) ( 77 23) ( 80 19)

( 92 18) ( 95 509) ( 96 37) (111 24) (123 1000)

(124 82) (138 756) (139 70)

NAME:1,2,4-Trimethoxybenzene

COMMENT: RI=1384.8, 32.4781 min 18|RI:1384.80

RI:1384.80

CASNO:135-77-3

RT:32.478

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 53) ( 41 22) ( 43 11) ( 45 8) ( 50 16)

( 51 35) ( 52 31) ( 53 35) ( 54 5) ( 59 9)

( 62 7) ( 63 21) ( 64 11) ( 65 155) ( 66 12)

( 67 69) ( 69 94) ( 74 4) ( 77 38) ( 78 7)

( 79 58) ( 80 15) ( 81 25) ( 82 41) ( 83 7)

( 92 9) ( 93 281) ( 94 28) ( 95 63) ( 96 7)

( 97 21) ( 98 1) (105 6) (106 2) (107 83)

(108 13) (109 22) (110 234) (111 18) (112 3)

(118 2) (119 9) (121 9) (122 4) (123 9)

(125 885) (126 62) (128 1) (132 6) (133 3)

(134 4) (137 24) (138 3) (140 3) (143 3)

(147 1) (148 4) (149 13) (150 2) (151 10)

(152 27) (153 1000) (154 78) (155 10) (159 2)

(162 18) (168 989) (169 86) (170 17)

NAME:Benzene, 1,4-dimethoxy-2-methyl-

COMMENT: RI=1264.5, 29.0601 min 18|RI:1264.50

RI:1264.50

CASNO:24599-58-4

RT:29.060

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 50

( 38 7) ( 39 46) ( 40 3) ( 41 7) ( 42 2)

( 44 2) ( 50 12) ( 51 21) ( 52 14) ( 53 23)

( 54 5) ( 63 13) ( 65 54) ( 66 52) ( 67 8)

( 68 5) ( 69 3) ( 77 134) ( 78 25) ( 79 275)

( 80 16) ( 81 75) ( 82 9) ( 89 3) ( 91 22)

( 92 5) ( 93 5) ( 94 82) ( 95 9) ( 96 7)

( 98 1) (105 90) (106 8) (107 14) (108 13)

(109 254) (110 11) (121 17) (122 11) (129 3)

(135 3) (137 1000) (138 108) (139 9) (142 1)

(151 4) (152 747) (153 76) (154 5) (166 1)

NAME:Valencene

COMMENT: RI=1536.6, 36.3346 min KOHALA-OHIA-DEAD+5TMAH+2ISTD2|RI:1536.60

RI:1536.60

CASNO:4630-07-3

RT:36.335

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 34

( 39 59) ( 41 48) ( 55 40) ( 67 43) ( 77 70)

( 81 311) ( 91 382) ( 92 84) ( 93 162) ( 95 85)

(105 715) (106 145) (107 82) (115 72) (117 107)

(118 58) (119 752) (120 170) (129 61) (131 84)

(133 361) (134 234) (135 68) (145 62) (146 24)

(147 120) (148 43) (160 100) (161 1000) (162 367)

(175 27) (176 75) (189 168) (204 609)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-

COMMENT: RI=981.8, 19.9979 min KOHALA-OHIA-DEAD+5TMAH+2ISTD2|RI:986.70

RI:986.70

CASNO:2758-18-1

RT:19.998

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 25

( 37 36) ( 38 58) ( 39 673) ( 40 68) ( 41 219)

( 42 26) ( 44 17) ( 45 21) ( 52 8) ( 53 753)

( 54 46) ( 55 18) ( 56 10) ( 57 18) ( 58 18)

( 63 32) ( 65 315) ( 67 908) ( 69 49) ( 71 6)

( 73 3) ( 81 490) ( 95 803) ( 96 1000) ( 97 147)

NAME:Hydrocinnamic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester???

COMMENT: RI=2293.3, 51.2373 min 11|RI:1737.00

RI:1737.00

CASNO:27798-73-8

RT:0.000

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 29

( 55 12) ( 77 57) ( 79 56) ( 89 25) ( 91 77)

( 93 35) (103 53) (104 14) (105 91) (106 20)

(107 59) (108 28) (115 35) (116 21) (118 22)

(121 44) (133 121) (135 45) (143 46) (149 68)

(151 1000) (152 99) (164 244) (189 120) (193 36)

(198 13) (204 224) (224 491) (225 56)

NAME:1-hexadecene, 6-ethyl?

COMMENT: |RI:1988.20

RI:1988.20

CASNO:3452-07-1

RT:47.614

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 28

( 39 78) ( 41 284) ( 42 48) ( 43 176) ( 55 422)

( 56 170) ( 57 440) ( 67 196) ( 68 82) ( 69 544)

( 70 276) ( 71 247) ( 81 198) ( 82 287) ( 83 782)

( 84 195) ( 85 171) ( 95 107) ( 96 279) ( 97 1000)

( 98 149) ( 99 82) (110 141) (111 630) (112 138)

(124 134) (125 353) (139 99)

NAME:1-hexadecene, 6-ethyl?

COMMENT: RI=1988.2, 46.1859 min DATA01|RI:1988.20

RI:1988.20

CASNO:3452-07-1

RT:47.614

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 28

( 39 78) ( 41 284) ( 42 48) ( 43 176) ( 55 422)

( 56 170) ( 57 440) ( 67 196) ( 68 82) ( 69 544)

( 70 276) ( 71 247) ( 81 198) ( 82 287) ( 83 782)

( 84 195) ( 85 171) ( 95 107) ( 96 279) ( 97 1000)

( 98 149) ( 99 82) (110 141) (111 630) (112 138)

(124 134) (125 353) (139 99)

NAME:Pyridine, 3-methyl-

COMMENT: RI=833.0, 14.2840 min DATA01|RI:833.00

RI:833.00

CASNO:108-99-6

RT:14.284

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 32

( 41 26) ( 42 14) ( 43 35) ( 49 13) ( 50 79)

( 51 79) ( 52 22) ( 54 93) ( 55 203) ( 59 14)

( 65 126) ( 66 410) ( 67 210) ( 70 29) ( 74 30)

( 75 8) ( 76 10) ( 78 70) ( 83 32) ( 84 193)

( 85 42) ( 90 3) ( 92 230) ( 93 1000) ( 94 134)

( 95 211) (112 16) (125 1) (127 5) (138 1)

(174 4) (292 1)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-methyl-

COMMENT: RI=922.3, 17.7734 min DATA02|RI:922.30

RI:922.30

CASNO:1120-73-6

RT:17.773

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 26

( 37 7) ( 38 18) ( 39 167) ( 40 60) ( 41 99)

( 50 40) ( 51 59) ( 53 259) ( 54 17) ( 55 22)

( 61 11) ( 62 25) ( 65 98) ( 66 7) ( 67 957)

( 68 178) ( 78 15) ( 81 59) ( 82 9) ( 95 156)

( 96 1000) ( 97 122) (105 12) (106 11) (109 3)

(121 40)

NAME:Pyridine, 3,5-dimethyl-

COMMENT: RI=959.1, 19.1460 min DATA02|RI:959.10

RI:959.10

CASNO:591-22-0

RT:19.146

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 38

( 38 11) ( 39 49) ( 40 10) ( 41 23) ( 42 13)

( 43 36) ( 44 6) ( 50 15) ( 51 20) ( 52 32)

( 53 9) ( 54 8) ( 55 3) ( 57 25) ( 60 3)

( 63 21) ( 65 78) ( 66 58) ( 68 18) ( 70 10)

( 77 134) ( 78 38) ( 79 389) ( 80 36) ( 81 5)

( 84 37) ( 89 2) ( 92 158) ( 93 22) ( 98 21)

(105 8) (106 630) (107 1000) (108 115) (109 25)

(121 28) (122 6) (124 39)

NAME:D-Limonene

COMMENT: RI=1037.9, 21.9674 min DATA02|RI:1037.90

RI:1037.90

CASNO:5989-27-5

RT:21.967

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 35

( 39 142) ( 40 72) ( 41 39) ( 42 28) ( 51 39)

( 52 17) ( 53 100) ( 54 30) ( 60 12) ( 65 100)

( 66 44) ( 67 1000) ( 68 304) ( 77 295) ( 79 473)

( 80 89) ( 81 177) ( 82 198) ( 91 252) ( 92 410)

( 93 948) ( 94 779) ( 95 116) ( 96 102) (103 26)

(104 41) (105 91) (107 360) (108 39) (120 309)

(121 540) (123 14) (124 77) (125 41) (136 173)

NAME:D-Limonene

COMMENT: RI=1038.2, 21.9786 min DATA01|RI:1037.90

RI:1037.90

CASNO:5989-27-5

RT:21.967

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Lauren.MSL

NUM PEAKS: 23

( 39 119) ( 51 46) ( 53 99) ( 65 75) ( 67 834)

( 68 246) ( 77 188) ( 78 50) ( 79 483) ( 80 134)

( 81 118) ( 91 386) ( 92 392) ( 93 1000) ( 94 839)

( 95 164) (103 38) (105 130) (107 378) (108 95)

(121 368) (136 246) (137 67)

NAME:PENTANAL

COMMENT: RI=662.0, 8.1377 min DATAHO2-0-0|RI:662.00

RI:662.00

CASNO:110-62-3

RT:8.138

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Aug1406.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 56) ( 38 61) ( 39 744) ( 40 61) ( 41 1000)

( 42 102) ( 43 926) ( 44 503) ( 45 71) ( 50 29)

( 51 34) ( 53 56) ( 55 67) ( 57 237) ( 58 750)

( 67 63) ( 68 29) ( 71 233)

NAME:Butanal, 2-methyl-

COMMENT: RI=671.9, 8.4065 min DATAHO2-0-0|RI:671.90

RI:671.90

CASNO:96-17-3

RT:8.406

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Aug1406.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 18) ( 38 24) ( 39 466) ( 40 32) ( 41 1000)

( 43 78) ( 53 29) ( 55 36) ( 56 33) ( 57 471)

( 58 731) ( 59 31) ( 71 39)

NAME:2-OCTENE

COMMENT: RI=813.7, 13.5169 min DATAHO2-0-0|RI:813.70

RI:813.70

CASNO:13389-42-9

RT:13.517

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Aug1406.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 487) ( 41 704) ( 55 1000) ( 56 310) ( 70 367)

( 82 272) ( 83 513) ( 91 516) (112 451)

NAME:Benzene, 1-methyl-3-propyl-

COMMENT: RI=1060.1, 22.7218 min DATAHO2-0-0|RI:1060.10

RI:1060.10

CASNO:1074-43-7

RT:22.722

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Aug1406.MSL

NUM PEAKS: 21

( 41 49) ( 43 44) ( 51 25) ( 57 72) ( 71 79)

( 77 94) ( 78 40) ( 79 160) ( 91 130) ( 92 60)

(102 13) (103 120) (104 28) (105 1000) (106 165)

(115 63) (116 18) (117 35) (119 56) (134 418)

(135 50)

NAME:ACETIC ACID

COMMENT: RI=625.1, 7.1303 min DATA2027-0-250|RI:625.10

RI:625.10

CASNO:64-19-7

RT:7.130

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Aug1406.MSL

NUM PEAKS: 14

( 40 7) ( 41 23) ( 42 221) ( 43 1000) ( 44 60)

( 45 733) ( 46 13) ( 47 4) ( 60 381) ( 61 46)

( 62 3) ( 67 14) (200 1) (269 2)

NAME:7-Hexadecenoic acid, methyl ester, (Z)

COMMENT: RI=1908.4, 44.5716 min CRUST-02|RI:1908.40

RI:1908.40

CASNO:56875-67-3

RT:44.572

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 79

( 39 509) ( 41 907) ( 42 96) ( 43 422) ( 45 36)

( 53 96) ( 54 123) ( 55 1000) ( 56 135) ( 57 151)

( 59 108) ( 65 74) ( 66 43) ( 67 745) ( 68 222)

( 69 573) ( 70 87) ( 71 68) ( 73 54) ( 74 236)

( 75 59) ( 77 47) ( 78 35) ( 79 239) ( 80 108)

( 81 629) ( 82 397) ( 83 534) ( 84 352) ( 85 93)

( 87 300) ( 91 89) ( 93 170) ( 94 95) ( 95 423)

( 96 610) ( 97 506) ( 98 562) ( 99 70) (101 73)

(107 100) (108 87) (109 258) (110 298) (111 312)

(112 159) (113 61) (114 28) (115 40) (119 123)

(120 51) (121 148) (122 72) (123 252) (124 187)

(125 117) (129 49) (133 88) (134 120) (135 109)

(137 152) (138 174) (139 67) (141 164) (143 29)

(147 46) (148 104) (149 69) (151 102) (152 185)

(153 37) (154 14) (165 72) (192 42) (193 63)

(194 91) (218 30) (236 80) (269 27)

NAME:1-hexadecene, 6-ethyl?

COMMENT: RI=1731.0, 43.3716 min 100M\_010307|RI:1731.00

RI:1731.00

CASNO:100M\_0~1-N1001

RT:43.372

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 34

( 39 144) ( 41 484) ( 42 48) ( 43 209) ( 53 35)

( 54 18) ( 55 608) ( 56 263) ( 57 504) ( 67 307)

( 68 81) ( 69 641) ( 70 391) ( 71 257) ( 81 266)

( 82 310) ( 83 879) ( 84 198) ( 85 169) ( 95 141)

( 96 264) ( 97 1000) ( 98 153) ( 99 50) (110 135)

(111 600) (112 110) (124 88) (125 258) (126 74)

(127 25) (138 62) (139 98) (140 42)

NAME:pentadecane, 7-methyl

COMMENT: RI=1537.3, 37.6363 min 100M\_010307|RI:1537.30

RI:1537.30

FORM:C16H34

CASNO:6165-40-8

RT:37.636

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 32

( 39 126) ( 41 588) ( 42 50) ( 43 504) ( 44 19)

( 55 225) ( 56 167) ( 57 1000) ( 58 36) ( 67 75)

( 69 119) ( 70 272) ( 71 950) ( 72 51) ( 82 285)

( 83 393) ( 84 205) ( 85 575) ( 86 38) ( 96 117)

( 97 261) ( 98 86) ( 99 203) (100 12) (110 56)

(111 232) (112 239) (113 103) (125 35) (127 42)

(140 181) (141 87)

NAME:1-Hexadecene

COMMENT: RI=1585.2, 38.8323 min 100M\_010307|RI:1585.20

RI:1585.20

FORM:C16H32

CASNO:629-73-2

RT:38.832

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 34

( 39 205) ( 41 662) ( 42 112) ( 43 251) ( 53 44)

( 54 34) ( 55 860) ( 56 406) ( 57 603) ( 66 65)

( 67 363) ( 68 110) ( 69 848) ( 70 547) ( 71 240)

( 72 14) ( 81 278) ( 82 358) ( 83 1000) ( 84 276)

( 85 114) ( 95 108) ( 96 277) ( 97 998) ( 98 182)

( 99 43) (110 106) (111 648) (112 120) (123 30)

(125 261) (138 48) (139 78) (140 33)

NAME:7-tetradecene

COMMENT: RI=1370.6, 33.7671 min 100M\_010307|RI:1370.60

RI:1370.60

CASNO:10374-74-0

RT:33.767

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 32

( 39 293) ( 40 32) ( 41 773) ( 42 129) ( 43 236)

( 53 69) ( 54 40) ( 55 1000) ( 56 512) ( 57 492)

( 66 60) ( 67 381) ( 68 100) ( 69 927) ( 70 556)

( 71 158) ( 81 241) ( 82 289) ( 83 983) ( 84 305)

( 85 84) ( 95 93) ( 96 252) ( 97 864) ( 98 177)

( 99 18) (110 131) (111 458) (112 93) (124 56)

(125 139) (126 55)

NAME:Benzeneacetic acid, 3,4-dimethoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1623.9, 39.9612 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1623.90

RI:1623.90

FORM:C11H1404

CASNO:15964-79-1

RT:39.961

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 48

( 41 12) ( 43 5) ( 45 1) ( 50 14) ( 51 26)

( 55 7) ( 56 12) ( 64 5) ( 65 27) ( 67 17)

( 73 3) ( 74 4) ( 78 18) ( 83 9) ( 89 14)

( 91 134) ( 92 27) ( 98 8) (106 37) (107 135)

(108 47) (117 6) (119 26) (120 12) (121 36)

(123 15) (128 17) (135 40) (136 36) (138 6)

(139 19) (141 2) (143 8) (147 7) (150 10)

(151 1000) (152 92) (153 33) (154 6) (159 8)

(165 28) (166 15) (184 1) (190 18) (196 6)

(207 8) (210 218) (211 50)

NAME:Benzene, 1,4-dimethoxy-2,3,5,6-tetramethyl-

COMMENT: RI=1628.3, 40.1023 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1628.30

RI:1628.30

FORM:C12H1802

CASNO:13199-54-7

RT:40.102

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 26

( 39 43) ( 45 26) ( 55 43) ( 65 102) ( 77 165)

( 78 96) ( 79 97) ( 89 52) ( 90 54) ( 91 1000)

( 92 97) ( 93 69) (103 55) (105 94) (106 43)

(107 170) (108 112) (119 335) (121 143) (133 107)

(136 131) (148 130) (151 539) (179 698) (194 925)

(195 129)

NAME:Propanoic acid, 2-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=789.5, 13.6983 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:789.50

RI:789.50

FORM:C5H10O3

CASNO:17639-76-8

RT:13.698

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 14) ( 41 23) ( 42 12) ( 43 77) ( 47 22)

( 55 33) ( 56 13) ( 57 27) ( 59 1000) ( 60 31)

( 75 48) ( 88 131) ( 89 8)

NAME:2,5-Piperazinedione, 3-ethyl-6-(2-methylpropyl)-

COMMENT: RI=1076.6, 24.5251 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1076.60

RI:1076.60

FORM:C10H18N2O2

CASNO:56771-93-8

RT:24.525

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 15

( 39 201) ( 40 47) ( 55 228) ( 68 520) ( 69 164)

( 71 105) ( 81 56) ( 83 377) ( 99 86) (111 1000)

(112 154) (126 69) (127 272) (141 118) (142 729)

NAME:Dimethyl 3,3'-oxydipropanoate

COMMENT: RI=1389.7, 33.9171 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1389.70

RI:1389.70

FORM:C8H14O5

CASNO:94102-60-0

RT:33.917

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 18

( 43 163) ( 45 717) ( 53 44) ( 57 180) ( 59 123)

( 69 98) ( 71 135) ( 73 585) ( 74 136) ( 81 78)

( 84 126) ( 85 216) ( 87 1000) ( 88 940) (103 255)

(111 125) (112 103) (113 115)

NAME:Methylisoeugenol

COMMENT: RI=1509.4, 36.9398 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1514.20

RI:1514.20

CASNO:93-16-3

RT:35.772

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 23

( 39 45) ( 41 46) ( 51 35) ( 65 74) ( 77 121)

( 78 41) ( 79 182) ( 89 38) ( 91 361) (103 309)

(104 49) (105 115) (107 980) (108 85) (115 124)

(117 119) (131 46) (135 128) (147 248) (163 459)

(164 48) (178 1000) (179 131)

NAME:4-(4-Methoxyphenyl)butyric acid

COMMENT: RI=1546.5, 37.8669 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1546.50

RI:1546.50

FORM:C11H14O3

CASNO:4521-28-2

RT:37.867

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 5

( 77 135) ( 91 169) (121 1000) (134 372) (194 197)

NAME:1H-Indene, 5,6-dimethoxy-

COMMENT: RI=1559.3, 38.1866 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1559.30

RI:1559.30

FORM:C11H12O2

CASNO:40243-67-2

RT:38.187

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 20

( 62 19) ( 63 70) ( 77 167) ( 79 266) ( 89 130)

( 90 120) (102 63) (103 202) (104 33) (105 541)

(106 45) (115 133) (118 85) (131 75) (132 26)

(133 110) (161 359) (162 34) (176 1000) (177 123)

NAME:3,4-Dimethoxyphenylacetone

COMMENT: RI=1589.4, 38.9367 min KOHALA\_OLAPA\_ROOTS1\_A\_JN|RI:1589.40

RI:1589.40

FORM:C11H14O3

CASNO:776-99-8

RT:38.937

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 44

( 39 25) ( 41 15) ( 42 11) ( 44 9) ( 51 16)

( 52 9) ( 55 12) ( 56 10) ( 57 1) ( 59 11)

( 65 23) ( 67 22) ( 70 12) ( 73 2) ( 79 49)

( 81 6) ( 82 8) ( 89 14) ( 90 50) ( 91 102)

( 92 24) ( 94 19) (101 11) (103 3) (105 61)

(106 43) (107 119) (108 110) (117 2) (122 12)

(123 8) (128 2) (129 13) (132 3) (135 43)

(136 77) (137 52) (138 9) (139 10) (151 1000)

(152 76) (166 10) (167 16) (194 178)

NAME:Furan, 2-(methoxymethyl)-

COMMENT: RI=831.0, 15.3739 min KOHALA\_ULUHE\_ROOTS1\_O\_JN|RI:831.00

RI:831.00

FORM:C6H8O2

CASNO:13679-46-4

RT:15.374

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 111) ( 50 63) ( 51 109) ( 52 46) ( 53 626)

( 54 40) ( 55 94) ( 81 1000) ( 82 522) ( 83 55)

( 95 64) ( 97 79) (111 262) (112 347)

NAME:Benzene, 1,3,5-trimethoxy-

COMMENT: RI=1425.1, 34.8362 min KOHALA\_ULUHE\_ROOTS1\_O\_JN|RI:1425.10

RI:1425.10

FORM:C9H12O3

CASNO:621-23-8

RT:34.836

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 28

( 39 32) ( 45 45) ( 51 35) ( 52 44) ( 53 20)

( 65 60) ( 69 85) ( 77 64) ( 78 110) ( 79 123)

( 80 26) ( 93 38) ( 94 58) ( 95 57) (101 98)

(107 69) (108 69) (109 195) (110 35) (124 151)

(125 105) (138 40) (139 1000) (140 89) (141 16)

(167 88) (168 703) (169 81)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: RI=971.5, 20.8401 min KOHALA\_OLAPA\_53\_O\_1\_JN|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 12) ( 38 18) ( 39 62) ( 49 10) ( 50 76)

( 51 94) ( 52 35) ( 53 532) ( 54 30) ( 81 169)

(109 1000) (110 911) (111 116)

NAME:Benzoic acid, 3-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1357.4, 32.9922 min OLAA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1357.40

RI:1357.40

FORM:C9H10O3

CASNO:5368-81-0

RT:32.992

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 41

( 39 14) ( 50 19) ( 51 16) ( 52 4) ( 62 9)

( 63 78) ( 64 66) ( 65 13) ( 74 14) ( 75 10)

( 76 19) ( 77 274) ( 78 32) ( 79 34) ( 91 13)

( 92 109) ( 93 15) ( 95 5) (104 3) (105 9)

(107 349) (108 54) (119 14) (120 27) (121 22)

(135 1000) (136 100) (137 9) (165 10) (166 436)

(167 61) (184 13) (211 13) (214 14) (228 3)

(229 4) (241 24) (242 5) (243 24) (273 59)

(274 10)

NAME:Phenol, 3,4-dimethoxy-

COMMENT: RI=1307.1, 31.5547 min OLAA\_ULUHE2\_LITTER|RI:1307.10

RI:1307.10

FORM:C8H10O3

CASNO:2033-89-8

RT:31.555

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 16

( 39 119) ( 40 54) ( 53 185) ( 65 126) ( 66 147)

( 69 59) ( 83 94) ( 93 86) ( 95 115) (125 187)

(137 225) (139 1000) (140 74) (153 143) (154 871)

(155 102)

NAME:2-Butenoic acid, methyl ester, (E)-

COMMENT: RI=768.6, 12.8380 min KOHALA\_OLAPA\_A53\_1\_JN|RI:768.60

RI:768.60

FORM:C5H8O2

CASNO:623-43-8

RT:12.838

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 41) ( 38 68) ( 39 533) ( 41 562) ( 43 53)

( 45 98) ( 69 1000) ( 85 806) (100 66)

NAME:Furfural, 5-methyl-

COMMENT: RI=971.0, 20.8209 min KOHALA\_OLAPA\_A53\_1\_JN|RI:928.60

RI:928.60

FORM:C6H6O2

CASNO:620-02-0

RT:19.346

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 12

( 37 14) ( 38 14) ( 39 60) ( 49 13) ( 50 77)

( 51 98) ( 52 42) ( 53 562) ( 81 167) (109 1000)

(110 927) (111 90)

NAME:Phenol, 2-methoxy-4-methyl- (Methylguaiacol)

COMMENT: RI=1210.8, 27.5366 min ULUHE\_LITTTER\_REP1|RI:1206.00

RI:1206.00

FORM:C8H10O2

CASNO:93-51-6

RT:28.778

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 28

( 39 154) ( 40 21) ( 41 61) ( 50 40) ( 51 83)

( 52 21) ( 53 33) ( 55 102) ( 63 29) ( 65 197)

( 66 83) ( 67 472) ( 68 31) ( 77 169) ( 78 78)

( 79 61) ( 94 44) ( 95 499) ( 96 32) (106 55)

(107 44) (122 30) (123 766) (124 66) (137 98)

(138 1000) (139 184) (140 23)

NAME:Thiocyanic acid, methyl ester

COMMENT: RI=701.9, 10.0883 min HENDERSON06|RI:701.90

RI:701.90

FORM:C2H3NS

CASNO:556-64-9

RT:10.088

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 41 11) ( 44 38) ( 45 290) ( 46 289) ( 47 62)

( 48 13) ( 58 70) ( 70 30) ( 71 25) ( 72 622)

( 73 1000) ( 74 169) ( 75 47)

NAME:Acetonitrile, amino-

COMMENT: RI=709.8, 10.4129 min HENDERSON06|RI:709.80

RI:709.80

FORM:C2H4N2

CASNO:540-61-4

RT:10.413

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 38 37) ( 39 28) ( 40 50) ( 52 12) ( 53 121)

( 54 17) ( 55 1000) ( 56 121) ( 57 15)

NAME:Methane, isothiocyanato-

COMMENT: RI=727.5, 11.1445 min HENDERSON06|RI:727.50

RI:727.50

FORM:C2H3NS

CASNO:556-61-6

RT:11.145

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 45 122) ( 46 22) ( 58 24) ( 70 76) ( 71 29)

( 72 410) ( 73 1000) ( 74 51) ( 75 39)

NAME:2-Propenoic acid, ethenyl ester

COMMENT: RI=729.4, 11.2219 min HENDERSON06|RI:729.40

RI:729.40

FORM:C5H6O2

CASNO:2177-18-6

RT:11.222

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 3

( 42 122) ( 55 1000) ( 69 58)

NAME:Disulfide, dimethyl

COMMENT: RI=730.9, 11.2848 min HENDERSON06|RI:730.90

RI:730.90

FORM:C2H6S2

CASNO:624-92-0

RT:11.285

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 21

( 45 233) ( 46 103) ( 47 63) ( 48 29) ( 49 16)

( 61 131) ( 63 8) ( 64 49) ( 66 6) ( 68 1)

( 81 37) ( 84 1) ( 85 3) ( 94 1000) ( 95 48)

( 96 100) ( 97 6) ( 98 6) ( 99 1) (109 2)

(209 2)

NAME:1H-1,2,4-Triazole

COMMENT: RI=768.4, 12.8303 min HENDERSON06|RI:768.40

RI:768.40

FORM:C2H3N3

CASNO:288-88-0

RT:12.830

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 6

( 42 459) ( 54 45) ( 58 89) ( 69 1000) ( 83 78)

( 84 70)

NAME:Formamide, N,N-dimethyl-

COMMENT: RI=770.4, 12.9135 min HENDERSON06|RI:770.40

RI:770.40

FORM:C3H7NO

CASNO:68-12-2

RT:12.914

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 6

( 41 35) ( 42 201) ( 44 639) ( 58 76) ( 72 76)

( 73 1000)

NAME:Cyclobut-1-enylmethanol

COMMENT: RI=780.1, 13.3118 min HENDERSON06|RI:780.10

RI:780.10

FORM:C5H8O

CASNO:89182-08-1

RT:13.312

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 30

( 37 74) ( 38 74) ( 39 788) ( 40 78) ( 41 331)

( 43 525) ( 44 187) ( 50 163) ( 51 104) ( 52 48)

( 53 210) ( 54 52) ( 55 1000) ( 56 273) ( 57 79)

( 58 32) ( 61 27) ( 62 48) ( 63 59) ( 65 294)

( 67 59) ( 69 220) ( 77 36) ( 79 60) ( 81 79)

( 83 793) ( 84 296) ( 94 50) ( 95 61) (135 24)

NAME:1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-1,5-dimethyl-

COMMENT: RI=791.7, 13.7926 min HENDERSON06|RI:791.70

RI:791.70

FORM:C5H10N2

CASNO:5775-96-2

RT:13.793

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 11

( 42 168) ( 44 115) ( 52 16) ( 54 26) ( 56 243)

( 67 44) ( 71 26) ( 72 154) ( 83 1000) ( 97 70)

( 98 127)

NAME:Thiophene, 2,3-dihydro-5-methyl-

COMMENT: RI=823.0, 15.0531 min HENDERSON06|RI:823.00

RI:823.00

FORM:C5H8S

CASNO:4610-02-0

RT:15.053

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 14

( 41 44) ( 42 199) ( 45 119) ( 56 60) ( 65 162)

( 66 36) ( 69 414) ( 84 36) ( 85 1000) ( 86 55)

( 97 65) ( 99 162) (100 492) (101 40)

NAME:1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-5-propyl-

COMMENT: RI=857.9, 16.4542 min HENDERSON06|RI:857.90

RI:857.90

FORM:C6H12N2

CASNO:75011-90-4

RT:16.454

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 26

( 37 8) ( 39 20) ( 42 393) ( 52 13) ( 53 25)

( 54 18) ( 55 18) ( 56 22) ( 57 9) ( 58 199)

( 65 14) ( 66 11) ( 67 29) ( 69 1000) ( 70 85)

( 71 14) ( 72 29) ( 73 10) ( 77 17) ( 79 9)

( 83 27) ( 97 37) (105 6) (107 6) (111 54)

(112 55)

NAME:Vinyl crotonate

COMMENT: RI=860.8, 16.5713 min HENDERSON06|RI:860.80

RI:860.80

FORM:C6H8O2

CASNO:14861-06-4

RT:16.571

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 19) ( 38 26) ( 39 381) ( 40 27) ( 41 349)

( 51 12) ( 68 191) ( 69 1000) ( 70 47)

NAME:1-Methyl-1H-1,2,4-triazole

COMMENT: RI=870.7, 16.9662 min HENDERSON06|RI:870.70

RI:870.70

FORM:C3H5N3

CASNO:6086-21-1

RT:16.966

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 42 97) ( 56 165) ( 72 24) ( 83 1000) ( 84 61)

( 86 31) (112 64)

NAME:(E)-1,3-Butadien-1-ol

COMMENT: RI=877.6, 17.2451 min HENDERSON06|RI:877.60

RI:877.60

FORM:C4H6O

CASNO:70411-98-2

RT:17.245

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 39 354) ( 41 316) ( 42 281) ( 43 119) ( 50 47)

( 69 529) ( 70 1000)

NAME:2-Pyrimidinamine

COMMENT: RI=965.4, 20.6092 min HENDERSON06|RI:965.40

RI:965.40

FORM:C4H5N3

CASNO:109-12-6

RT:20.609

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 40 57) ( 41 139) ( 42 83) ( 43 27) ( 51 16)

( 52 35) ( 53 23) ( 67 110) ( 68 522) ( 69 30)

( 94 52) ( 95 1000) ( 96 59)

NAME:Furan, 2-[(methylthio)methyl]-

COMMENT: RI=988.3, 21.4737 min HENDERSON06|RI:988.30

RI:988.30

FORM:C6H8OS

CASNO:1438-91-1

RT:21.474

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 22

( 43 14) ( 45 39) ( 50 35) ( 51 51) ( 52 24)

( 53 385) ( 54 19) ( 59 16) ( 65 15) ( 77 9)

( 80 7) ( 81 1000) ( 82 81) ( 83 16) ( 84 14)

( 95 15) ( 97 9) (105 18) (121 7) (128 565)

(129 42) (130 31)

NAME:2-(Dimethylaminomethyl)-3-hydroxypyridine

COMMENT: RI=991.2, 21.5812 min HENDERSON06|RI:991.20

RI:991.20

FORM:C8H12N2O

CASNO:2168-13-0

RT:21.581

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 29

( 37 45) ( 42 48) ( 45 107) ( 46 6) ( 49 21)

( 51 20) ( 53 9) ( 55 17) ( 58 805) ( 60 44)

( 62 16) ( 64 121) ( 65 35) ( 66 26) ( 69 132)

( 77 7) ( 78 20) ( 79 23) ( 80 30) ( 81 24)

( 84 17) ( 95 21) ( 96 11) (101 22) (102 16)

(106 23) (109 1000) (111 108) (207 31)

NAME:3-Hexanol, 2,4-dimethyl-

COMMENT: RI=995.8, 21.7553 min HENDERSON06|RI:995.80

RI:995.80

FORM:C8H18O

CASNO:13432-25-2

RT:21.755

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 258) ( 41 206) ( 43 389) ( 44 389) ( 45 1000)

( 55 126) ( 57 866) ( 58 99) ( 69 307) ( 73 614)

( 74 90) ( 85 58)

NAME:3-Pyridinecarbonitrile

COMMENT: RI=1002.0, 21.9846 min HENDERSON06|RI:1002.00

RI:1002.00

FORM:C6H4N2

CASNO:100-54-9

RT:21.985

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 6

( 50 123) ( 75 91) ( 76 194) ( 77 765) (104 1000)

(105 86)

NAME:Methanethioamide, N,N-dimethyl-

COMMENT: RI=1018.2, 22.5340 min HENDERSON06|RI:1018.20

RI:1018.20

FORM:C3H7NS

CASNO:758-16-7

RT:22.534

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 42 128) ( 44 279) ( 45 84) ( 72 29) ( 73 38)

( 74 70) ( 89 1000) ( 90 54) ( 91 47)

NAME:2-Pyridinecarbonitrile

COMMENT: RI=1060.2, 23.9670 min HENDERSON06|RI:1060.20

RI:1060.20

FORM:C6H4N2

CASNO:100-70-9

RT:23.967

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 15

( 38 11) ( 49 17) ( 50 113) ( 51 67) ( 52 39)

( 53 11) ( 64 28) ( 75 54) ( 76 120) ( 77 583)

( 78 59) (103 29) (104 1000) (105 75) (119 5)

NAME:5-Dimethylaminopyrimidine

COMMENT: RI=1136.2, 26.4710 min HENDERSON06|RI:1136.20

RI:1136.20

FORM:C6H9N3

CASNO:31401-46-4

RT:26.471

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 24

( 38 4) ( 39 31) ( 41 9) ( 42 19) ( 43 66)

( 44 21) ( 52 16) ( 53 23) ( 55 4) ( 67 53)

( 68 83) ( 69 11) ( 74 5) ( 77 7) ( 78 14)

( 80 51) ( 81 147) ( 91 8) ( 93 3) ( 94 46)

( 95 140) (105 21) (122 1000) (123 469)

NAME:Amylene Hydrate

COMMENT: RI=617.0, 7.5143 min HENDERSON01|RI:617.00

RI:617.00

FORM:C5H12O

CASNO:75-85-4

RT:7.514

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 203) ( 41 260) ( 43 267) ( 45 78) ( 53 81)

( 55 1000) ( 59 852) ( 60 38) ( 73 668)

NAME:Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: RI=1228.7, 29.3127 min HENDERSON01|RI:1228.70

RI:1228.70

FORM:C14H22

CASNO:1014-60-4

RT:29.313

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 40) ( 41 119) ( 57 678) ( 58 31) ( 64 47)

( 65 39) ( 91 131) (103 15) (105 69) (115 70)

(116 23) (117 82) (119 88) (129 33) (131 36)

(147 141) (175 1000) (176 147) (190 190)

NAME:2,4-Pentadienoic acid, 1-cyclopenten-3-

FORM:C10H10O3

CASNO:N/A

RI:1241.0

RW:

RT:29.466

COMMENT: RI=1666.8, 41.3269 min HENDERSON01|RI:1666.80

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 8

( 91 326) (127 81) (128 242) (129 1000) (207 741)

(208 139) (222 336) (223 83)

NAME:1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl-3-phenyl-

COMMENT: RI=1679.3, 41.7242 min HENDERSON01|RI:1679.30

RI:1679.30

FORM:C18H20

CASNO:3910-35-8

RT:41.044

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 36

( 39 19) ( 65 19) ( 77 33) ( 81 22) ( 89 104)

( 91 354) ( 93 14) ( 95 21) ( 97 15) (101 47)

(102 50) (103 87) (105 109) (106 22) (115 106)

(116 15) (117 74) (127 67) (128 280) (129 133)

(130 18) (141 34) (143 1000) (144 97) (178 61)

(179 41) (189 51) (190 53) (191 67) (192 27)

(202 37) (203 48) (206 13) (221 827) (222 150)

(223 22)

NAME:2,4-Pentadienoic acid, 1-cyclopenten-3-

FORM:C10H10O3

CASNO:N/A

RI:1241.0

RW:

RT:29.466

COMMENT: RI=1734.0, 43.4656 min HENDERSON01|RI:1666.80

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 42

( 43 27) ( 44 48) ( 45 8) ( 51 19) ( 57 17)

( 65 31) ( 66 9) ( 69 15) ( 73 37) ( 74 22)

( 75 17) ( 77 91) ( 79 57) ( 81 17) ( 82 22)

( 83 22) ( 85 12) ( 91 648) ( 92 72) (101 14)

(102 20) (103 70) (104 14) (107 10) (109 7)

(110 6) (115 81) (119 1000) (123 8) (125 10)

(128 26) (129 34) (130 10) (134 5) (144 20)

(145 159) (149 7) (158 11) (180 84) (185 10)

(191 12) (207 31)

NAME:Cyanamide, dimethyl-

COMMENT: RI=757.6, 12.3849 min HENDERSON03\_070327095849|RI:757.60

RI:757.60

FORM:C3H6N2

CASNO:1467-79-4

RT:12.385

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 5

( 42 312) ( 53 108) ( 67 25) ( 69 1000) ( 70 527)

NAME:1-Propanone, 1-cyclopropyl-

COMMENT: RI=860.6, 16.5605 min HENDERSON03\_070327095849|RI:860.60

RI:860.60

FORM:C6H10O

CASNO:6704-19-4

RT:16.561

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 23) ( 38 24) ( 39 409) ( 40 17) ( 41 365)

( 43 17) ( 44 18) ( 51 16) ( 53 16) ( 57 11)

( 58 42) ( 68 168) ( 69 1000)

NAME:Thiazole

COMMENT: RI=724.3, 11.0127 min HENDERSON04|RI:724.30

RI:724.30

FORM:C3H3NS

CASNO:288-47-1

RT:11.013

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 5

( 57 183) ( 58 589) ( 80 285) ( 81 523) ( 85 1000)

NAME:1-Butyne, 3,3-dimethyl-

COMMENT: RI=738.4, 11.5927 min HENDERSON04|RI:738.40

RI:738.40

FORM:C6H10

CASNO:917-92-0

RT:11.593

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 39) ( 39 355) ( 40 15) ( 41 220) ( 45 17)

( 51 13) ( 67 1000) ( 68 51) ( 73 8) (234 1)

NAME:Methylaminoacetonitrile

COMMENT: RI=745.0, 11.8661 min HENDERSON04|RI:745.00

RI:745.00

FORM:C3H6N2

CASNO:5616-32-0

RT:11.866

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 13

( 38 39) ( 39 42) ( 40 118) ( 41 99) ( 42 848)

( 43 380) ( 44 442) ( 53 48) ( 55 41) ( 66 11)

( 69 1000) ( 70 291) ( 71 40)

NAME:1-Pentene, 3-ethyl-2-methyl-

COMMENT: RI=780.3, 13.3200 min HENDERSON04|RI:780.30

RI:780.30

FORM:C8H16

CASNO:19780-66-6

RT:13.320

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 20

( 38 95) ( 39 693) ( 41 212) ( 44 49) ( 52 23)

( 53 155) ( 55 1000) ( 56 126) ( 59 34) ( 62 21)

( 63 45) ( 67 69) ( 69 209) ( 72 12) ( 73 27)

( 81 58) ( 83 740) ( 84 280) ( 85 12) (207 19)

NAME:1H-Pyrrole, 3-methyl-

COMMENT: RI=825.8, 15.1682 min HENDERSON04|RI:825.80

RI:825.80

FORM:C5H7N

CASNO:616-43-3

RT:15.168

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 22) ( 40 15) ( 50 37) ( 51 38) ( 52 38)

( 53 302) ( 54 24) ( 75 9) ( 78 76) ( 79 16)

( 80 1000) ( 81 592) ( 82 40) ( 96 11)

NAME:2-Propenoic acid, anhydride

COMMENT: RI=828.4, 15.2717 min HENDERSON04|RI:828.40

RI:828.40

FORM:C6H6O3

CASNO:2051-76-5

RT:15.272

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 30) ( 41 21) ( 42 30) ( 44 35) ( 45 21)

( 52 23) ( 53 27) ( 54 19) ( 55 1000) ( 56 200)

( 72 12) (149 14)

NAME:Cyclopentane, bromo-

COMMENT: RI=860.7, 16.5677 min HENDERSON04|RI:860.70

RI:860.70

FORM:C5H9Br

CASNO:137-43-9

RT:16.568

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 11

( 37 17) ( 38 28) ( 39 369) ( 40 28) ( 41 330)

( 42 28) ( 43 20) ( 53 16) ( 68 191) ( 69 1000)

( 70 51)

NAME:2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-methyl-

COMMENT: RI=870.8, 16.9727 min HENDERSON04|RI:870.80

RI:870.80

FORM:C6H12N2

CASNO:22581-42-6

RT:16.973

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 42 99) ( 56 147) ( 83 1000) ( 84 74) ( 85 23)

( 86 35) (112 68)

NAME:2-Furanmethanethiol

COMMENT: RI=900.6, 18.1633 min HENDERSON04|RI:900.60

RI:900.60

FORM:C5H6OS

CASNO:98-02-2

RT:18.163

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 12) ( 39 28) ( 45 38) ( 50 49) ( 51 74)

( 52 45) ( 53 334) ( 54 18) ( 79 21) ( 81 1000)

( 82 65) ( 85 20) (106 50) (107 85) (114 289)

(115 18)

NAME:1,3-Cyclopentadiene

COMMENT: RI=920.2, 18.9056 min HENDERSON04|RI:920.20

RI:920.20

FORM:C5H6

CASNO:542-92-7

RT:18.906

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 9

( 38 14) ( 39 214) ( 41 168) ( 65 443) ( 66 1000)

( 67 377) ( 97 49) ( 99 162) (114 150)

NAME:4-Pyridinecarboxaldehyde

COMMENT: RI=938.2, 19.5824 min HENDERSON04|RI:938.20

RI:938.20

FORM:C6H5NO

CASNO:872-85-5

RT:19.582

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 12

( 37 39) ( 39 80) ( 50 144) ( 51 231) ( 52 703)

( 53 105) ( 78 257) ( 79 538) ( 80 42) (106 256)

(107 1000) (108 63)

NAME:Dimethyl trisulfide

COMMENT: RI=966.3, 20.6431 min HENDERSON04|RI:966.30

RI:966.30

FORM:C2H6S3

CASNO:3658-80-8

RT:20.643

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 12

( 45 150) ( 46 36) ( 47 88) ( 61 84) ( 64 86)

( 78 79) ( 79 226) ( 80 216) (111 101) (126 1000)

(127 48) (128 142)

NAME:4-Pyridinecarbonitrile

COMMENT: RI=973.1, 20.9011 min HENDERSON04|RI:973.10

RI:973.10

FORM:C6H4N2

CASNO:100-48-1

RT:20.901

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 11

( 49 20) ( 50 123) ( 51 50) ( 52 30) ( 64 88)

( 75 67) ( 76 165) ( 77 635) ( 78 46) (104 1000)

(105 74)

NAME:S-Tetrazine, 3-methyl-6-(2-thienyl)-

COMMENT: RI=991.1, 21.5806 min HENDERSON04|RI:991.10

RI:991.10

FORM:C7H6N4S

CASNO:57537-54-9

RT:21.581

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 37 25) ( 45 110) ( 58 498) ( 65 42) ( 69 93)

( 70 53) (109 1000)

NAME:3-Methylthiophene-2-carbonitrile

COMMENT: RI=1071.9, 24.3650 min HENDERSON04|RI:1071.90

RI:1071.90

FORM:C6H5NS

CASNO:55406-13-8

RT:24.365

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 7

( 45 100) ( 81 153) ( 82 409) ( 85 261) (122 1000)

(123 659) (124 84)

NAME:4-Morpholineacetonitrile

COMMENT: RI=1127.7, 26.2000 min HENDERSON04|RI:1127.70

RI:1127.70

FORM:C6H10N2O

CASNO:5807-02-3

RT:26.200

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 17

( 40 176) ( 41 646) ( 42 731) ( 43 588) ( 54 106)

( 56 282) ( 57 368) ( 58 165) ( 67 292) ( 68 158)

( 71 233) ( 83 486) ( 86 256) ( 98 256) (100 125)

(125 122) (126 1000)

NAME:Cyclohexanol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-

COMMENT: RI=955.9, 20.2498 min HENDERSON05|RI:955.90

RI:955.90

FORM:C10H20O

CASNO:470-65-5

RT:20.250

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 26

( 39 102) ( 41 102) ( 42 59) ( 43 681) ( 55 213)

( 56 34) ( 58 75) ( 59 106) ( 60 11) ( 67 133)

( 69 51) ( 70 94) ( 71 61) ( 73 16) ( 75 16)

( 79 26) ( 93 48) ( 94 10) ( 95 932) ( 96 99)

( 97 49) (111 35) (113 1000) (114 85) (116 21)

(149 8)

NAME:2,5-Hexanediol, 2,5-dimethyl-

COMMENT: RI=1044.0, 23.4162 min HENDERSON05|RI:1044.00

RI:1044.00

FORM:C8H18O2

CASNO:110-03-2

RT:23.416

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 8

( 39 124) ( 43 796) ( 55 588) ( 59 584) ( 69 132)

( 70 422) ( 95 1000) (113 478)

NAME:Phenol, 4,6-di(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-

COMMENT: RI=1434.1, 34.3323 min W22|RI:1434.10

RI:1434.10

FORM:C15H24O

CASNO:Phenol, 4,6-di(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-

RT:34.332

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 82

( 39 33) ( 41 136) ( 43 19) ( 44 3) ( 51 10)

( 53 3) ( 55 26) ( 56 7) ( 57 516) ( 58 34)

( 63 4) ( 66 5) ( 67 5) ( 69 8) ( 77 18)

( 78 4) ( 79 16) ( 81 22) ( 82 13) ( 89 6)

( 90 2) ( 91 95) ( 93 6) ( 94 6) ( 96 6)

( 97 13) (102 4) (103 20) (104 13) (105 57)

(107 12) (108 14) (112 7) (115 96) (116 18)

(117 39) (118 8) (119 33) (121 165) (123 3)

(124 10) (126 5) (128 52) (129 27) (131 30)

(133 36) (135 53) (137 6) (139 4) (140 4)

(142 20) (145 14) (146 5) (148 12) (149 104)

(150 11) (151 3) (152 2) (154 10) (155 7)

(159 9) (160 9) (161 35) (162 17) (163 12)

(164 4) (165 8) (172 4) (174 9) (175 36)

(176 6) (177 126) (178 22) (179 5) (189 21)

(190 12) (194 3) (205 1000) (206 201) (207 18)

(220 246) (221 26)

NAME:1H-Pyrrole, 2,3,4,5-tetramethyl-

COMMENT: RI=1095.9, 23.9523 min AK1|RI:1095.90

RI:1095.90

FORM:C8H13N

CASNO:1H-Pyrrole, 2,3,4,5-tetramethyl-

RT:23.952

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 156) ( 41 270) ( 43 149) ( 56 63) ( 57 250)

( 71 179) ( 79 175) ( 85 64) (106 113) (107 196)

(108 274) (122 1000) (123 633)

NAME:4-Piperidinamine, 2,2,6,6-tetramethyl-

COMMENT: RI=1414.3, 33.2814 min AK1|RI:1414.30

RI:1414.30

FORM:C9H20N2

CASNO:4-Piperidinamine, 2,2,6,6-tetramethyl-

RT:33.281

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 45

( 39 29) ( 42 177) ( 44 130) ( 45 12) ( 46 15)

( 56 26) ( 58 651) ( 59 32) ( 60 34) ( 68 33)

( 70 47) ( 71 15) ( 72 6) ( 79 17) ( 80 18)

( 81 17) ( 82 249) ( 83 23) ( 84 136) ( 89 8)

( 94 65) ( 96 190) ( 97 20) ( 98 584) ( 99 57)

(100 85) (108 14) (109 13) (110 26) (111 55)

(112 120) (124 10) (125 209) (126 28) (127 16)

(137 22) (139 23) (140 95) (141 1000) (142 81)

(143 13) (156 15) (161 10) (172 8) (198 10)

NAME:Cholestane, (5à,14á)-

COMMENT: RI=2888.1, 60.8318 min CURVE-MIX1|RI:2888.10

RI:2888.10

FORM:C27H48

CASNO:40071-70-3

RT:60.832

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 74

( 39 23) ( 42 5) ( 43 23) ( 50 1) ( 55 27)

( 67 160) ( 68 17) ( 71 13) ( 79 80) ( 82 34)

( 83 41) ( 84 10) ( 85 11) ( 86 1) ( 92 14)

( 93 49) ( 95 251) ( 96 44) ( 97 31) ( 98 5)

(105 30) (107 134) (108 57) (109 53) (115 9)

(117 8) (120 25) (122 125) (123 75) (124 15)

(133 91) (134 37) (135 189) (136 30) (139 9)

(143 6) (146 19) (148 535) (150 80) (159 17)

(163 58) (175 141) (177 21) (180 2) (181 6)

(189 70) (192 12) (199 3) (201 26) (203 146)

(210 5) (216 34) (217 1000) (218 616) (219 202)

(220 20) (229 10) (232 37) (233 20) (246 4)

(247 27) (252 6) (256 4) (257 26) (259 21)

(261 15) (262 158) (267 14) (270 3) (276 17)

(282 14) (284 2) (288 5) (290 10)

NAME:(E)-1,3-Butadien-1-ol

COMMENT: RI=1407.6, 33.6682 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:877.60

RI:877.60

FORM:C4H6O

CASNO:70411-98-2

RT:17.245

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 42

( 50 24) ( 51 78) ( 52 5) ( 60 5) ( 62 6)

( 63 12) ( 74 18) ( 75 22) ( 76 40) ( 77 194)

( 78 27) ( 85 5) ( 86 3) ( 88 10) ( 89 6)

( 90 5) ( 91 33) ( 92 21) (101 10) (102 116)

(103 625) (104 73) (105 20) (115 19) (116 45)

(117 68) (118 15) (119 9) (121 13) (129 6)

(130 25) (131 1000) (132 103) (133 19) (134 21)

(144 36) (147 12) (161 340) (162 411) (163 113)

(239 4) (264 11)

NAME:2-Propenoic acid, 3-phenyl-, methyl ester, (E)-

COMMENT: RI=1407.6, 33.6682 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1407.60

RI:1407.60

FORM:C10H10O2

CASNO:1754-62-7

RT:33.668

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 42

( 50 24) ( 51 78) ( 52 5) ( 60 5) ( 62 6)

( 63 12) ( 74 18) ( 75 22) ( 76 40) ( 77 194)

( 78 27) ( 85 5) ( 86 3) ( 88 10) ( 89 6)

( 90 5) ( 91 33) ( 92 21) (101 10) (102 116)

(103 625) (104 73) (105 20) (115 19) (116 45)

(117 68) (118 15) (119 9) (121 13) (129 6)

(130 25) (131 1000) (132 103) (133 19) (134 21)

(144 36) (147 12) (161 340) (162 411) (163 113)

(239 4) (264 11)

NAME:Methyl propionate

COMMENT: RI=645.2, 7.4715 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_LIVE|RI:645.20

RI:645.20

FORM:C4H8O2

CASNO:554-12-1

RT:7.471

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 5) ( 39 29) ( 41 38) ( 42 68) ( 45 27)

( 52 8) ( 54 7) ( 55 79) ( 56 59) ( 57 1000)

( 58 27) ( 59 129) ( 68 40) ( 87 30) ( 88 363)

( 89 19)

NAME:Acetic acid, hydroxy-, methyl ester

COMMENT: RI=718.9, 9.7798 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_LIVE|RI:718.90

RI:718.90

FORM:C3H6O3

CASNO:96-35-5

RT:9.780

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 13

( 42 140) ( 44 28) ( 45 239) ( 46 6) ( 56 10)

( 59 357) ( 60 40) ( 61 1000) ( 62 26) ( 63 54)

( 90 37) ( 91 133) ( 92 4)

NAME:Butanoic acid, 3-methyl-, methyl ester

COMMENT: RI=791.6, 12.6179 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_LIVE|RI:791.60

RI:791.60

FORM:C6H12O2

CASNO:556-24-1

RT:12.618

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 159) ( 41 316) ( 42 107) ( 43 1000) ( 59 125)

( 69 286) ( 73 64) ( 74 430) ( 75 17) ( 77 60)

( 79 97) ( 85 155) (101 210)

NAME:Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-methyl-

COMMENT: RI=1441.2, 33.9565 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_LIVE|RI:1441.20

RI:1441.20

FORM:C10H14O3

CASNO:6443-69-2

RT:33.956

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 64

( 39 12) ( 43 5) ( 44 9) ( 45 7) ( 50 15)

( 51 33) ( 52 14) ( 53 21) ( 55 11) ( 57 11)

( 59 3) ( 62 7) ( 63 19) ( 64 21) ( 65 34)

( 66 22) ( 67 3) ( 69 38) ( 75 17) ( 76 9)

( 77 99) ( 78 14) ( 79 102) ( 80 4) ( 81 18)

( 82 12) ( 87 15) ( 92 6) ( 94 20) ( 95 49)

( 96 28) (101 23) (102 38) (103 56) (104 12)

(105 12) (106 17) (107 179) (108 45) (109 93)

(114 5) (123 18) (124 204) (128 82) (129 24)

(130 1000) (131 495) (132 11) (133 25) (134 17)

(139 577) (140 26) (161 25) (162 9) (166 10)

(167 603) (168 50) (169 7) (176 14) (177 3)

(181 6) (182 385) (183 45) (194 5)

NAME:Nonanedioic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1572.5, 37.2489 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM3\_LIVE|RI:1572.50

RI:1572.50

FORM:C11H20O4

CASNO:1732-10-1

RT:37.249

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 86

( 39 115) ( 41 159) ( 42 27) ( 43 195) ( 45 21)

( 52 6) ( 53 36) ( 55 559) ( 57 19) ( 58 27)

( 59 93) ( 67 117) ( 69 194) ( 70 11) ( 71 16)

( 74 94) ( 76 15) ( 79 71) ( 80 59) ( 81 78)

( 83 765) ( 84 121) ( 85 14) ( 86 11) ( 87 82)

( 88 29) ( 92 17) ( 93 54) ( 94 101) ( 95 80)

( 96 245) ( 97 305) ( 98 101) (101 133) (105 63)

(107 121) (108 35) (109 29) (111 742) (113 51)

(114 39) (117 61) (123 76) (124 619) (125 379)

(128 94) (129 63) (130 75) (132 21) (136 48)

(137 627) (138 110) (143 283) (144 44) (145 81)

(146 26) (147 11) (149 51) (150 8) (152 1000)

(153 312) (154 49) (155 19) (156 71) (157 9)

(160 7) (163 8) (164 23) (168 56) (169 8)

(170 7) (173 9) (174 40) (176 21) (177 62)

(178 10) (180 108) (181 26) (182 15) (184 12)

(185 234) (187 16) (192 126) (193 15) (281 7)

(283 5)

NAME:2-Hexenoic acid, methyl ester

COMMENT: RI=982.7, 20.0363 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM2\_LIVE|RI:982.70

RI:982.70

FORM:C7H12O2

CASNO:2396-77-2

RT:20.036

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 65

( 37 14) ( 39 369) ( 40 71) ( 41 421) ( 42 67)

( 43 200) ( 44 22) ( 51 33) ( 52 13) ( 53 186)

( 55 1000) ( 56 90) ( 58 49) ( 59 58) ( 62 14)

( 63 22) ( 65 142) ( 66 40) ( 67 293) ( 68 815)

( 69 222) ( 71 56) ( 73 137) ( 74 187) ( 78 18)

( 81 433) ( 82 75) ( 83 20) ( 85 119) ( 87 545)

( 88 27) ( 91 46) ( 92 136) ( 93 25) ( 95 90)

( 96 285) ( 97 563) ( 98 42) ( 99 68) (100 34)

(102 11) (103 15) (106 155) (107 114) (108 42)

(111 84) (113 646) (114 50) (119 15) (123 22)

(124 7) (126 40) (128 287) (129 15) (130 7)

(138 13) (163 7) (205 12) (208 15) (209 18)

(250 15) (251 6) (281 63) (282 27) (283 24)

NAME:2-Propanone, 1-(4-methoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1425.2, 33.5565 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM2\_LIVE|RI:1425.20

RI:1425.20

FORM:C10H12O2

CASNO:122-84-9

RT:33.557

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 45

( 38 1) ( 41 1) ( 43 9) ( 50 4) ( 51 8)

( 52 5) ( 53 2) ( 62 2) ( 63 4) ( 64 1)

( 65 8) ( 74 4) ( 75 6) ( 77 122) ( 78 41)

( 85 7) ( 86 5) ( 89 12) ( 90 3) ( 91 80)

( 92 9) ( 93 5) ( 95 3) ( 98 1) (105 2)

(106 7) (111 3) (118 1) (121 1000) (122 92)

(123 3) (141 6) (142 2) (146 1) (151 3)

(153 7) (154 2) (155 1) (164 113) (165 7)

(170 2) (171 2) (179 2) (180 1) (185 1)

NAME:Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-methyl-

COMMENT: RI=1427.7, 33.6195 min JN\_KOHALA\_OAPA3\_OH\_ROOTS|RI:1441.20

RI:1441.20

FORM:C10H14O3

CASNO:6443-69-2

RT:33.956

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\GCMS STUFF\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy.MSL

NUM PEAKS: 24

( 53 110) ( 65 53) ( 66 21) ( 77 73) ( 78 25)

( 79 322) ( 80 27) ( 81 136) ( 94 26) ( 95 48)

( 96 50) (107 636) (108 68) (109 234) (111 66)

(122 42) (124 279) (139 567) (140 60) (166 29)

(167 1000) (168 98) (182 815) (183 109)

NAME:2-Propenenitrile, 2-methyl- (Bacteroidetes)

COMMENT: R.I.= 655.9 7.969 min BACTERIODETES|RI:655.90

RI:655.90

FORM:C4H5N

CASNO:126-98-7

RT:7.969

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 144) ( 38 143) ( 39 398) ( 40 113) ( 41 1000)

( 52 79) ( 64 92) ( 67 122)

NAME:Propanenitrile (Bacteriodetes)

COMMENT: R.I.= 595.7 6.331 min BACTERIODETES|RI:595.70

RI:595.70

FORM:C3H5N

CASNO:107-12-0

RT:6.331

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 6

( 37 38) ( 38 73) ( 51 360) ( 52 283) ( 54 1000)

( 55 41)

NAME:Propane, 2-nitro- (Bacteriodetes)

COMMENT: R.I.= 742.8 10.802 min BACTERIODETES|RI:742.80

RI:742.80

FORM:C3H7NO2

CASNO:79-46-9

RT:10.802

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 50) ( 38 62) ( 39 701) ( 40 66) ( 41 1000)

( 43 102) ( 50 18) ( 52 15) ( 55 43)

NAME:1,3-Butadiene (Bacteriodetes)

COMMENT: R.I.= 783.6 12.353 min BACTERIODETES|RI:783.60

RI:783.60

FORM:C4H6

CASNO:106-99-0

RT:12.353

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 37 153) ( 38 199) ( 39 1000) ( 40 106) ( 41 647)

( 50 194) ( 51 141) ( 52 87) ( 53 157) ( 54 171)

( 66 145) ( 80 511) ( 81 558) ( 82 67)

NAME:3-methylphenol

FORM:C7H8O

CASNO:108-39-4

RI:1111.9

RW:

RT:22.597

COMMENT: R.I.= 835.5 14.383 min BACTERIODETES|RI:1066.00

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 6

( 65 102) ( 77 403) ( 78 42) ( 79 269) (107 847)

(108 1000)

NAME:Hexanedinitrile (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 852.6 15.060 min BACTERIODETES|RI:852.60

RI:852.60

FORM:C6H8N2

CASNO:111-69-3

RT:15.060

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 6

( 39 603) ( 41 1000) ( 54 165) ( 55 110) ( 57 102)

( 68 76)

NAME:(E)-1,3-Butadien-1-ol

COMMENT: R.I.= 855.3 15.166 min BACTERIODETES|RI:877.60

RI:877.60

FORM:C4H6O

CASNO:70411-98-2

RT:17.245

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 26) ( 38 17) ( 39 463) ( 40 30) ( 41 462)

( 42 23) ( 50 34) ( 51 30) ( 53 71) ( 54 1000)

( 55 528) ( 57 34) ( 67 23) ( 68 117) ( 79 23)

( 80 12) ( 98 57) (117 1)

NAME:Hexanedinitrile (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 855.3 15.166 min BACTERIODETES|RI:852.60

RI:852.60

FORM:C6H8N2

CASNO:111-69-3

RT:15.060

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 26) ( 38 17) ( 39 463) ( 40 30) ( 41 462)

( 42 23) ( 50 34) ( 51 30) ( 53 71) ( 54 1000)

( 55 528) ( 57 34) ( 67 23) ( 68 117) ( 79 23)

( 80 12) ( 98 57) (117 1)

NAME:Aniline (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 878.4 16.084 min BACTERIODETES|RI:878.40

RI:878.40

FORM:C6H7N

CASNO:62-53-3

RT:16.084

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 227) ( 43 81) ( 61 30) ( 62 44) ( 63 117)

( 65 447) ( 66 256) ( 67 261) ( 91 384) ( 92 296)

( 93 1000)

NAME:2-Furanmethanol

COMMENT: R.I.= 942.8 18.540 min BACTERIODETES|RI:865.00

RI:865.00

FORM:C5H6O2

CASNO:98-00-0

RT:16.859

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 7

( 37 87) ( 38 104) ( 39 1000) ( 40 287) ( 68 99)

( 69 739) ( 98 943)

NAME:2-Propen-1-ol (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 958.7 19.132 min BACTERIODETES|RI:958.70

RI:958.70

CASNO:107-18-6

RT:19.132

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 4

( 37 82) ( 39 1000) ( 41 948) ( 57 988)

NAME:2-Propenenitrile, 2-methyl- (Bacteroidetes)

COMMENT: R.I.= 971.7 19.618 min BACTERIODETES|RI:655.90

RI:655.90

FORM:C4H5N

CASNO:126-98-7

RT:7.969

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 37 21) ( 38 34) ( 39 99) ( 40 26) ( 41 338)

( 43 44) ( 44 6) ( 51 10) ( 67 1000) ( 68 37)

( 77 7) (109 161) (120 119) (121 35)

NAME:Pentylenetetrazol (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 1067.7 22.983 min BACTERIODETES|RI:1067.70

RI:1067.70

FORM:C6H10N4

CASNO:54-95-5

RT:22.983

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 39 18) ( 40 30) ( 41 19) ( 42 69) ( 54 47)

( 55 228) ( 56 75) ( 67 130) ( 68 33) ( 69 15)

( 79 16) ( 80 31) ( 81 62) ( 82 344) ( 83 10)

( 94 24) ( 96 365) ( 98 61) (109 1000) (110 84)

(123 105) (124 78)

NAME:Propane, 2-nitro- (Bacteriodetes)

COMMENT: R.I.= 1158.9 25.935 min BACTERIODETES|RI:742.80

RI:742.80

FORM:C3H7NO2

CASNO:79-46-9

RT:10.802

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 8

( 39 440) ( 41 1000) ( 43 691) ( 57 853) ( 71 843)

( 85 585) ( 90 453) (117 754)

NAME:Propene (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 913.5 18.192 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:913.50

RI:913.50

FORM:C3H6

CASNO:115-07-1

RT:18.192

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 7

( 38 69) ( 39 937) ( 40 143) ( 41 1000) ( 42 631)

( 85 48) ( 87 90)

NAME:Methanesulfonic acid, methyl ester( BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 914.9 18.339 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:914.90

RI:914.90

FORM:C2H6O3S

CASNO:66-27-3

RT:18.339

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 13) ( 38 12) ( 43 6) ( 51 35) ( 53 301)

( 54 12) ( 55 3) ( 63 20) ( 65 51) ( 67 56)

( 68 9) ( 70 3) ( 77 12) ( 78 113) ( 79 8)

( 80 1000) ( 81 56) ( 93 59) ( 94 126) ( 95 336)

( 96 31) (109 42)

NAME:4-Pyridinamine

COMMENT: R.I.= 918.6 18.719 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:934.00

RI:934.00

FORM:C5H6N2

CASNO:504-24-5

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 8

( 65 134) ( 67 169) ( 77 188) ( 78 282) ( 80 270)

( 93 178) ( 94 1000) ( 95 704)

NAME:p-Aminotoluene (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 922.8 19.145 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:922.80

RI:922.80

FORM:C7H9N

CASNO:106-49-0

RT:19.145

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 8

( 37 71) ( 38 101) ( 39 1000) ( 41 912) ( 57 860)

( 79 200) (106 598) (107 761)

NAME:Benzene, 2-propenyl- (BACTERIODETES)

COMMENT: R.I.= 951.3 22.062 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:951.30

RI:951.30

FORM:C9H10

CASNO:300-57-2

RT:22.062

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 5

(103 46) (115 614) (116 87) (117 1000) (118 565)

NAME:Squalane (ASCOMYCETE)

COMMENT: R.I.= 2118.5 47.873 min ASCOMYCETE|RI:2118.50

RI:2118.50

FORM:C30H62

CASNO:111-01-3

RT:47.873

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 47

( 39 376) ( 41 524) ( 43 329) ( 54 185) ( 55 480)

( 56 92) ( 57 456) ( 58 77) ( 67 371) ( 69 358)

( 70 56) ( 71 246) ( 81 620) ( 82 117) ( 83 631)

( 84 90) ( 85 423) ( 93 175) ( 95 660) ( 97 510)

( 99 197) (100 179) (107 156) (109 566) (111 236)

(113 1000) (114 98) (121 199) (123 363) (127 331)

(137 222) (141 139) (149 221) (151 95) (153 62)

(155 274) (163 178) (169 541) (183 131) (197 226)

(211 283) (219 178) (225 185) (237 141) (239 524)

(253 462) (267 121)

NAME:Pentadecane

COMMENT: R.I.= 2134.9 48.164 min ASCOMYCETE|RI:1500.00

RI:1500.00

FORM:C15H32

CASNO:629-62-9

RT:35.303

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 235) ( 41 481) ( 43 428) ( 57 901) ( 71 1000)

( 82 217) ( 84 94) ( 85 814) ( 99 393) (113 279)

(126 106) (127 181) (140 138) (141 260)

NAME:2-Propen-1-ol (BACTERIODETES)

COMMENT: Scan 562 (8.487 min)|RI:958.70

RI:958.70

CASNO:107-18-6

RT:19.132

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 37) ( 38 41) ( 39 861) ( 40 51) ( 41 1000)

( 42 38) ( 43 49) ( 50 31) ( 51 21) ( 53 21)

( 55 37) ( 57 508) ( 58 607) ( 69 26) ( 71 17)

( 87 23)

NAME:Oleyl Alcohol (Ascomycete)

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:1382.90

RI:1382.90

FORM:C18H36O

CASNO:143-28-2

RT:35.012

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 12

( 39 521) ( 41 708) ( 55 781) ( 67 1000) ( 69 651)

( 70 250) ( 81 631) ( 83 458) (109 193) (111 366)

(124 273) (156 167)

NAME:Butane (Ascomycete)

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:313.70

RI:313.70

FORM:C4H10

CASNO:106-97-8

RT:9.091

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 18

( 39 193) ( 41 270) ( 42 113) ( 43 1000) ( 44 23)

( 47 16) ( 49 94) ( 50 13) ( 51 35) ( 55 79)

( 56 48) ( 57 34) ( 61 5) ( 64 4) ( 70 50)

( 71 24) ( 78 4) (100 2)

NAME:Hydroquinone (Ascomycete)

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:843.50

RI:843.50

FORM:C6H6O2

CASNO:123-31-9

RT:16.065

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 13

( 43 253) ( 49 17) ( 50 110) ( 51 148) ( 52 31)

( 53 471) ( 54 35) ( 81 1000) ( 82 100) ( 88 20)

(110 209) (111 23) (162 1)

NAME:1-Undecanol (Ascomycete)

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:880.00

RI:880.00

FORM:C11H24O

CASNO:112-42-5

RT:16.546

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 24) ( 38 29) ( 39 702) ( 40 69) ( 41 1000)

( 42 146) ( 43 110) ( 53 61) ( 55 821) ( 56 438)

( 57 86) ( 67 284) ( 69 426) ( 70 197) ( 74 49)

( 83 147) ( 84 88) ( 96 40) ( 97 212) ( 98 41)

(111 19) (124 22)

NAME:Furfural

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:845.00

RI:845.00

CASNO:98-01-1

RT:15.994

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 19

( 37 40) ( 38 46) ( 39 420) ( 40 50) ( 41 230)

( 50 54) ( 51 65) ( 53 163) ( 62 33) ( 63 30)

( 65 292) ( 66 42) ( 67 1000) ( 68 302) ( 95 244)

( 96 542) ( 97 55) ( 98 15) (121 39)

NAME:1-Propanone, 1-phenyl-

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:962.90

RI:962.90

FORM:C9H10O

CASNO:93-55-0

RT:23.253

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 62

( 37 3) ( 39 18) ( 41 26) ( 43 63) ( 44 20)

( 47 3) ( 50 7) ( 52 11) ( 54 6) ( 55 38)

( 58 6) ( 59 5) ( 60 7) ( 61 41) ( 63 25)

( 65 47) ( 67 40) ( 68 11) ( 69 13) ( 70 37)

( 73 7) ( 74 3) ( 77 133) ( 78 19) ( 79 229)

( 84 12) ( 86 4) ( 87 3) ( 89 21) ( 92 18)

( 94 36) ( 95 15) ( 97 16) ( 99 7) (102 8)

(103 132) (104 25) (105 1000) (106 95) (107 12)

(108 19) (111 35) (112 31) (114 8) (115 38)

(118 3) (119 23) (120 5) (124 32) (125 24)

(128 4) (130 1) (133 5) (134 304) (135 56)

(136 18) (137 5) (143 5) (149 4) (209 3)

(249 2) (281 3)

NAME:2-Naphthalenol

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:993.60

RI:993.60

FORM:C10H8O

CASNO:135-19-3

RT:26.400

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 39 100) ( 43 722) ( 44 141) ( 45 161) ( 55 365)

( 67 86) ( 71 30) ( 72 32) ( 73 147) ( 74 193)

( 79 82) ( 81 138) ( 82 29) ( 85 74) ( 97 24)

(101 410) (109 80) (111 43) (115 565) (116 119)

(144 1000) (145 64)

NAME:Acetaminophen

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:1272.10

RI:1272.10

FORM:C8H9NO2

CASNO:103-90-2

RT:33.624

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 33) ( 40 16) ( 43 102) ( 50 36) ( 51 27)

( 53 74) ( 54 42) ( 66 18) ( 80 1000) ( 81 275)

( 93 32) (108 108) (109 971) (110 63) (138 24)

(141 65) (151 147) (152 33) (337 1)

NAME:Octadecanoic acid (ascomycete)

COMMENT: Scan 7847 (40.674 min)|RI:2028.00

RI:2028.00

FORM:C18H36O2

CASNO:57-11-4

RT:46.268

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 26

( 41 265) ( 42 178) ( 55 417) ( 57 202) ( 61 249)

( 67 140) ( 69 164) ( 73 401) ( 95 173) (101 217)

(109 131) (115 355) (143 392) (144 142) (157 1000)

(171 554) (185 667) (199 729) (213 763) (227 489)

(239 139) (241 644) (242 153) (255 308) (284 329)

(285 94)

NAME:Pyridine, 2-methyl- (BACTERIODETES)

COMMENT: RI=697.8, 14.1469 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:697.80

RI:697.80

FORM:C6H7N

CASNO:109-06-8

RT:14.147

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 32) ( 38 28) ( 39 143) ( 40 58) ( 41 42)

( 49 11) ( 50 87) ( 51 135) ( 52 24) ( 61 22)

( 62 27) ( 63 70) ( 64 29) ( 65 373) ( 66 478)

( 67 241) ( 76 9) ( 78 104) ( 92 218) ( 93 1000)

( 94 98) ( 96 6)

NAME:Oleyl Alcohol (Ascomycete)

COMMENT: RI=1700.0, 39.9797 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:1382.90

RI:1382.90

FORM:C18H36O

CASNO:143-28-2

RT:35.012

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 49

( 39 263) ( 40 16) ( 41 293) ( 43 40) ( 53 41)

( 54 46) ( 55 190) ( 56 23) ( 57 46) ( 65 96)

( 66 68) ( 67 1000) ( 68 153) ( 69 125) ( 70 27)

( 77 46) ( 79 159) ( 80 59) ( 81 763) ( 82 412)

( 83 96) ( 84 22) ( 93 38) ( 94 27) ( 95 402)

( 96 374) ( 97 130) (109 222) (110 181) (111 64)

(121 23) (122 29) (123 132) (124 195) (135 23)

(136 22) (137 82) (138 124) (139 18) (151 40)

(152 90) (166 27) (180 122) (193 31) (194 21)

(207 20) (236 388) (237 56) (317 11)

NAME:Oleyl Alcohol (Ascomycete)

COMMENT: RI=1733.5, 40.7331 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:1382.90

RI:1382.90

FORM:C18H36O

CASNO:143-28-2

RT:35.012

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 31

( 39 93) ( 41 123) ( 43 12) ( 53 76) ( 55 65)

( 57 16) ( 65 60) ( 66 57) ( 67 1000) ( 68 217)

( 69 63) ( 77 91) ( 79 272) ( 80 54) ( 81 449)

( 82 281) ( 83 51) ( 91 20) ( 95 225) ( 96 212)

( 97 66) (109 96) (110 132) (123 72) (124 113)

(137 39) (138 70) (152 46) (180 74) (236 330)

(237 77)

NAME:Oleyl Alcohol (Ascomycete)

COMMENT: RI=1779.8, 41.7723 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:1382.90

RI:1382.90

FORM:C18H36O

CASNO:143-28-2

RT:35.012

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 50

( 39 312) ( 41 538) ( 42 120) ( 43 138) ( 44 42)

( 54 78) ( 55 240) ( 56 142) ( 57 283) ( 58 176)

( 67 237) ( 69 225) ( 70 536) ( 71 106) ( 72 54)

( 77 44) ( 79 373) ( 80 66) ( 81 288) ( 82 735)

( 83 376) ( 84 282) ( 85 401) ( 91 109) ( 93 391)

( 95 246) ( 96 946) ( 97 480) ( 98 135) (107 318)

(109 118) (110 1000) (111 172) (112 108) (121 140)

(122 76) (124 593) (126 67) (136 56) (138 363)

(139 70) (140 97) (152 288) (166 305) (180 560)

(181 75) (182 88) (208 809) (209 125) (222 34)

NAME:Testosterone Propionate (Bacteroides)

COMMENT: RI=1898.9, 43.9793 min BACTERIODETES\_FOR\_NEWLIB|RI:1898.90

RI:1898.90

FORM:C22H32O3

CASNO:57-85-2

RT:43.979

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 29

( 39 219) ( 41 363) ( 53 66) ( 55 516) ( 67 355)

( 69 186) ( 79 277) ( 81 250) ( 83 166) ( 91 487)

( 92 117) ( 93 423) ( 95 224) (105 531) (106 180)

(107 230) (109 151) (119 564) (120 1000) (121 155)

(123 124) (133 905) (134 284) (147 198) (148 143)

(154 187) (161 662) (162 206) (274 50)

NAME:Indole

COMMENT: RI=1331.9, 30.9761 min BACTERIODETES|RI:1328.00

RI:1328.00

FORM:C8H7N

CASNO:120-72-9

RT:32.226

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 26

( 39 15) ( 50 28) ( 51 16) ( 61 16) ( 62 45)

( 63 115) ( 64 17) ( 74 12) ( 76 16) ( 78 21)

( 85 10) ( 86 12) ( 87 14) ( 88 15) ( 89 433)

( 90 445) ( 91 45) (101 10) (102 68) (103 16)

(116 60) (117 1000) (118 92) (128 31) (129 101)

(130 14)

NAME:1,3-Butadiene (Bacteriodetes)

COMMENT: RI=505.1, 11.6102 min ASCOMYCETE|RI:783.60

RI:783.60

FORM:C4H6

CASNO:106-99-0

RT:12.353

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 10

( 39 520) ( 49 72) ( 50 336) ( 51 240) ( 53 485)

( 54 589) ( 61 27) ( 62 20) ( 81 1000) ( 82 92)

NAME:2-Furanmethanol

COMMENT: RI=906.8, 17.5006 min ASCOMYCETE|RI:865.00

RI:865.00

FORM:C5H6O2

CASNO:98-00-0

RT:16.859

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 17

( 37 45) ( 41 71) ( 50 187) ( 51 203) ( 52 298)

( 53 704) ( 54 67) ( 70 83) ( 80 81) ( 81 1000)

( 82 105) ( 83 35) ( 93 59) ( 97 144) ( 98 325)

(126 744) (127 65)

NAME:Maleic hydrazide (ASCOMYCETE)

COMMENT: RI=952.9, 22.2302 min ASCOMYCETE|RI:952.90

RI:952.90

FORM:C4H4N2O2

CASNO:123-33-1

RT:22.230

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 25

( 38 71) ( 39 1000) ( 40 118) ( 41 702) ( 50 99)

( 52 36) ( 53 198) ( 54 388) ( 55 406) ( 56 112)

( 66 92) ( 68 674) ( 69 849) ( 77 203) ( 79 201)

( 80 83) ( 81 141) ( 82 478) ( 83 221) ( 84 577)

( 91 193) ( 93 107) (110 388) (111 126) (112 629)

NAME:Histamine Dihydrochloride (ASCOMYCETE)

COMMENT: RI=1188.9, 32.4061 min ASCOMYCETE|RI:1188.90

RI:1188.90

FORM:C5H9N3

CASNO:51-45-6

RT:32.406

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 29

( 39 65) ( 40 19) ( 41 62) ( 42 33) ( 43 104)

( 54 63) ( 55 86) ( 56 26) ( 64 9) ( 65 37)

( 66 59) ( 68 133) ( 69 49) ( 75 9) ( 80 51)

( 81 27) ( 82 550) ( 83 170) ( 96 71) (110 78)

(111 1000) (112 55) (117 25) (138 15) (139 9)

(153 158) (154 25) (167 14) (213 3)

NAME:2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: RI=2294.1, 50.9867 min BASIDIOMYCETE|RI:1484.00

RI:1484.00

FORM:C14H20O2

CASNO:719-22-2

RT:36.008

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 39

( 41 180) ( 65 76) ( 67 813) ( 69 105) ( 77 93)

( 79 332) ( 80 96) ( 81 1000) ( 83 181) ( 91 183)

( 93 329) ( 94 166) ( 95 963) (105 103) (107 284)

(109 547) (117 91) (119 127) (121 318) (122 128)

(123 435) (131 100) (133 149) (135 378) (137 248)

(145 94) (149 357) (151 151) (159 194) (161 133)

(163 224) (164 74) (173 194) (177 199) (181 94)

(188 34) (243 146) (261 107) (279 273)

NAME:p-Aminotoluene (BACTERIODETES)

COMMENT: RI=906.9, 17.5138 min BASIDIOMYCETE|RI:922.80

RI:922.80

FORM:C7H9N

CASNO:106-49-0

RT:19.145

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 9

( 50 49) ( 51 79) ( 52 58) ( 63 17) ( 77 72)

( 78 196) ( 79 145) (106 1000) (107 256)

NAME:Phenol

COMMENT: RI=966.4, 23.6141 min BASIDIOMYCETE|RI:991.00

RI:991.00

FORM:C6H6O

CASNO:108-95-2

RT:21.618

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 14

( 37 36) ( 38 47) ( 39 204) ( 52 21) ( 62 11)

( 64 20) ( 66 475) ( 94 1000) ( 95 57) (106 38)

(107 88) (108 244) (109 587) (123 87)

NAME:1,2-Benzenediamine, 4-chloro-

COMMENT: RI=997.5, 26.7928 min BASIDIOMYCETE|RI:997.50

RI:997.50

FORM:C6H7ClN2

CASNO:95-83-0

RT:26.793

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 36

( 45 61) ( 47 47) ( 59 131) ( 61 45) ( 63 37)

( 65 51) ( 75 248) ( 76 25) ( 77 409) ( 85 66)

( 86 31) ( 89 57) ( 99 142) (100 114) (101 339)

(102 27) (103 94) (105 53) (111 115) (112 184)

(113 67) (115 67) (116 111) (117 81) (118 29)

(120 41) (124 28) (127 168) (129 580) (130 89)

(138 20) (142 1000) (143 293) (144 81) (145 63)

(153 9)

NAME:Methylindole

COMMENT: RI=1079.4, 29.3032 min BASIDIOMYCETE|RI:1422.00

RI:1422.00

FORM:C9H9N

CASNO:83-34-1

RT:34.690

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 18

( 51 104) ( 63 49) ( 65 189) ( 77 243) ( 78 127)

( 79 151) ( 83 116) ( 91 1000) ( 92 747) (102 70)

(103 187) (105 245) (128 107) (130 892) (131 540)

(150 50) (162 394) (163 70)

NAME:Acetovanillone

COMMENT: RI=1309.1, 34.0872 min BASIDIOMYCETE|RI:1518.00

RI:1518.00

FORM:C9H10O3

CASNO:498-02-2

RT:37.208

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 39 151) ( 41 155) ( 43 158) ( 54 130) ( 55 99)

( 67 212) ( 68 164) ( 80 213) ( 94 459) ( 95 190)

( 96 97) (108 320) (120 46) (122 507) (123 386)

(150 420) (151 1000) (152 153)

NAME:Oleyl Alcohol (Ascomycete)

COMMENT: RI=1677.6, 39.4749 min BASIDIOMYCETE|RI:1382.90

RI:1382.90

FORM:C18H36O

CASNO:143-28-2

RT:35.012

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 23

( 39 199) ( 41 194) ( 55 144) ( 56 26) ( 65 94)

( 66 135) ( 67 1000) ( 68 184) ( 69 81) ( 77 115)

( 79 222) ( 80 66) ( 81 901) ( 82 430) ( 83 92)

( 95 435) ( 96 460) (109 181) (110 239) (123 101)

(124 199) (138 170) (236 114)

NAME:Aminothiazole (BASIDIOMYCETE)

COMMENT: RI=1923.9, 44.4225 min BASIDIOMYCETE|RI:1923.90

RI:1923.90

FORM:C3H4N2S

CASNO:96-50-4

RT:44.422

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 68

( 37 106) ( 42 158) ( 43 57) ( 47 56) ( 50 133)

( 55 75) ( 57 156) ( 64 127) ( 68 144) ( 69 278)

( 70 176) ( 76 31) ( 77 48) ( 78 56) ( 82 417)

( 85 47) ( 87 519) ( 88 312) ( 92 1000) ( 93 102)

( 94 169) ( 95 222) ( 96 272) ( 99 70) (105 70)

(111 68) (114 68) (119 46) (122 148) (126 257)

(130 55) (131 86) (132 47) (133 143) (137 241)

(140 379) (141 261) (142 89) (145 460) (148 108)

(154 140) (171 265) (177 338) (179 298) (196 270)

(209 103) (210 198) (212 116) (213 192) (214 42)

(229 89) (231 24) (237 65) (238 96) (239 154)

(241 245) (244 98) (250 28) (255 198) (261 108)

(263 106) (265 39) (281 65) (284 71) (310 35)

(323 16) (325 195) (327 178)

NAME:2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-

COMMENT: RI=2294.1, 50.9867 min BASIDIOMYCETE|RI:1484.00

RI:1484.00

FORM:C14H20O2

CASNO:719-22-2

RT:36.008

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS263\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 39

( 41 180) ( 65 76) ( 67 813) ( 69 105) ( 77 93)

( 79 332) ( 80 96) ( 81 1000) ( 83 181) ( 91 183)

( 93 329) ( 94 166) ( 95 963) (105 103) (107 284)

(109 547) (117 91) (119 127) (121 318) (122 128)

(123 435) (131 100) (133 149) (135 378) (137 248)

(145 94) (149 357) (151 151) (159 194) (161 133)

(163 224) (164 74) (173 194) (177 199) (181 94)

(188 34) (243 146) (261 107) (279 273)

NAME:Squalane (ASCOMYCETE)

COMMENT: RI=2317.3, 51.3983 min BASIDIOMYCETE|RI:2118.50

RI:2118.50

FORM:C30H62

CASNO:111-01-3

RT:47.873

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 117

( 39 200) ( 41 333) ( 42 32) ( 43 267) ( 54 119)

( 55 322) ( 56 38) ( 57 364) ( 58 32) ( 67 427)

( 68 45) ( 70 69) ( 71 237) ( 73 28) ( 77 27)

( 79 69) ( 81 402) ( 82 168) ( 83 294) ( 84 80)

( 87 43) ( 91 57) ( 95 558) ( 96 70) ( 97 458)

( 98 98) ( 99 131) (100 167) (101 62) (103 17)

(105 18) (106 13) (108 58) (109 269) (110 39)

(111 295) (112 39) (113 1000) (115 20) (120 10)

(121 115) (123 363) (125 161) (127 235) (129 68)

(131 28) (133 88) (138 66) (143 70) (146 14)

(149 148) (151 104) (152 66) (153 110) (155 153)

(156 56) (161 38) (164 22) (165 52) (166 60)

(167 134) (169 386) (170 131) (171 7) (172 6)

(173 6) (175 28) (176 47) (177 101) (179 18)

(181 18) (182 39) (183 152) (184 64) (185 15)

(187 1) (189 54) (190 37) (191 193) (193 50)

(194 6) (196 42) (200 40) (201 29) (202 3)

(203 5) (206 5) (208 23) (209 80) (211 201)

(212 56) (215 31) (221 59) (222 5) (225 384)

(229 34) (231 14) (245 15) (247 193) (249 80)

(250 19) (253 148) (256 52) (259 14) (263 7)

(264 33) (267 256) (268 80) (269 43) (280 18)

(281 505) (284 8) (285 4) (295 83) (309 105)

(313 12) (327 12)

NAME:17à-Methyltestosterone (BASIDIOMYCETE)

COMMENT: RI=2297.6, 51.0488 min BASIDIOMYCETE|RI:2297.60

RI:2297.60

FORM:C20H30O2

CASNO:58-18-4

RT:51.049

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 45

( 39 389) ( 40 63) ( 41 552) ( 43 183) ( 55 710)

( 57 416) ( 67 605) ( 69 811) ( 71 208) ( 79 424)

( 81 1000) ( 82 169) ( 83 770) ( 85 171) ( 93 387)

( 95 965) ( 97 726) ( 98 364) ( 99 120) (105 340)

(107 296) (108 144) (109 719) (111 397) (119 362)

(121 637) (123 387) (133 603) (134 151) (135 623)

(137 328) (139 137) (147 571) (149 349) (151 381)

(153 152) (161 568) (162 146) (163 412) (167 266)

(175 401) (189 328) (245 772) (246 126) (263 498)

NAME:2-Propenenitrile, 2-methyl- (Bacteroidetes)

COMMENT: RI=231.1, 8.0045 min BETA-PROTEOBACTERIA\_060808153812|RI:655.90

RI:655.90

FORM:C4H5N

CASNO:126-98-7

RT:7.969

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 37 145) ( 38 167) ( 39 384) ( 40 134) ( 41 1000)

( 49 12) ( 51 63) ( 52 83) ( 63 64) ( 64 96)

( 65 17) ( 66 111) ( 67 117) ( 68 18)

NAME:Folic Acid

COMMENT: RI=2210.1, 49.4970 min BETA-PROTEOBACTERIA\_060808153812|RI:2210.10

RI:2210.10

FORM:C19H19N7O6

CASNO:59-30-3

RT:49.497

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 148

( 37 13) ( 44 94) ( 46 10) ( 51 21) ( 52 3)

( 55 249) ( 56 81) ( 57 156) ( 58 28) ( 59 26)

( 63 28) ( 64 4) ( 65 126) ( 66 58) ( 67 48)

( 69 1000) ( 71 126) ( 72 59) ( 73 340) ( 74 41)

( 76 6) ( 77 126) ( 78 87) ( 79 307) ( 81 670)

( 85 108) ( 87 251) ( 89 19) ( 91 222) ( 92 120)

( 97 252) ( 98 129) (100 48) (101 68) (105 173)

(107 237) (109 267) (110 246) (111 172) (114 43)

(115 26) (117 151) (121 126) (124 74) (126 72)

(127 111) (128 51) (130 52) (131 36) (132 70)

(134 113) (135 469) (137 244) (139 188) (141 94)

(144 61) (145 253) (146 67) (147 190) (148 178)

(150 241) (152 82) (153 177) (154 126) (156 47)

(157 142) (163 211) (165 249) (167 168) (170 70)

(172 12) (173 24) (177 23) (178 248) (181 127)

(184 100) (187 138) (189 96) (191 207) (194 226)

(197 77) (199 71) (200 141) (201 91) (203 90)

(204 19) (205 247) (207 544) (209 246) (210 155)

(212 66) (213 144) (219 96) (221 254) (224 123)

(225 74) (227 128) (230 29) (231 105) (232 99)

(233 64) (234 102) (235 210) (238 25) (241 64)

(245 45) (251 22) (252 24) (253 41) (255 46)

(256 85) (257 32) (260 34) (261 41) (262 173)

(264 55) (265 100) (266 95) (268 40) (270 26)

(272 3) (274 42) (275 31) (276 21) (277 27)

(278 13) (280 8) (281 357) (282 141) (283 9)

(289 12) (291 28) (292 10) (293 29) (294 25)

(303 3) (309 4) (310 2) (311 3) (312 15)

(314 5) (317 8) (321 2) (332 7) (333 2)

(341 190) (342 29) (343 24)

NAME:Propane, 2-nitro- (Bacteriodetes)

COMMENT: RI=743.7, 10.8329 min STREPTOMYCETACEAE|RI:742.80

RI:742.80

FORM:C3H7NO2

CASNO:79-46-9

RT:10.802

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 36) ( 38 48) ( 39 715) ( 40 51) ( 41 1000)

( 42 39) ( 43 157) ( 52 11) ( 55 23)

NAME:Methanesulfonic acid, methyl ester( BACTERIODETES)

COMMENT: RI=821.3, 13.8191 min STREPTOMYCETACEAE|RI:914.90

RI:914.90

FORM:C2H6O3S

CASNO:66-27-3

RT:18.339

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 11

( 39 143) ( 41 176) ( 51 49) ( 53 247) ( 67 106)

( 78 377) ( 80 856) ( 81 65) ( 94 52) ( 95 1000)

( 96 67)

NAME:1,4-Benzenediamine

COMMENT: RI=835.9, 14.3988 min STREPTOMYCETACEAE|RI:835.90

RI:835.90

FORM:C6H8N2

CASNO:106-50-3

RT:14.399

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 20

( 41 256) ( 42 159) ( 43 117) ( 51 45) ( 56 203)

( 57 90) ( 65 57) ( 66 48) ( 67 122) ( 68 31)

( 79 227) ( 81 40) ( 82 100) ( 84 444) ( 91 69)

(107 568) (108 1000) (109 54) (112 51) (208 62)

NAME:Cyclohexanone

COMMENT: RI=844.4, 14.7358 min STREPTOMYCETACEAE|RI:844.40

RI:844.40

FORM:C6H10O

CASNO:108-94-1

RT:14.736

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 21

( 37 14) ( 38 14) ( 39 78) ( 40 9) ( 41 84)

( 42 125) ( 43 435) ( 50 13) ( 53 49) ( 54 318)

( 55 266) ( 56 17) ( 57 7) ( 69 381) ( 70 68)

( 71 108) ( 83 37) ( 95 12) ( 97 102) ( 98 1000)

( 99 137)

NAME:Hexanedinitrile (BACTERIODETES)

COMMENT: RI=855.4, 15.1713 min STREPTOMYCETACEAE|RI:852.60

RI:852.60

FORM:C6H8N2

CASNO:111-69-3

RT:15.060

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 66) ( 39 741) ( 41 793) ( 54 1000) ( 55 648)

( 57 83) ( 65 34) ( 68 83) ( 79 59) ( 94 40)

NAME:1-Undecanol (Ascomycete)

COMMENT: RI=890.6, 16.5631 min STREPTOMYCETACEAE|RI:880.00

RI:880.00

FORM:C11H24O

CASNO:112-42-5

RT:16.546

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 843) ( 41 1000) ( 42 162) ( 43 152) ( 55 522)

( 56 307) ( 67 137) ( 69 278) ( 70 173) ( 82 162)

( 83 116) ( 84 72) ( 97 179)

NAME:2-Propenoic acid, butyl ester

COMMENT: RI=900.7, 16.9657 min STREPTOMYCETACEAE|RI:900.70

RI:900.70

FORM:C7H12O2

CASNO:141-32-2

RT:16.966

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 485) ( 40 70) ( 41 518) ( 42 128) ( 54 21)

( 55 1000) ( 56 239) ( 68 202) ( 69 31) ( 73 349)

( 74 23) ( 96 147) ( 99 16)

NAME:p-Aminotoluene (BACTERIODETES)

COMMENT: RI=916.1, 17.5418 min STREPTOMYCETACEAE|RI:922.80

RI:922.80

FORM:C7H9N

CASNO:106-49-0

RT:19.145

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 8

( 50 39) ( 51 77) ( 52 104) ( 77 54) ( 78 144)

( 79 168) (106 1000) (107 332)

NAME:Pyrazine, 2,6-dimethyl-

COMMENT: RI=926.5, 17.9274 min STREPTOMYCETACEAE|RI:926.50

RI:926.50

FORM:C6H8N2

CASNO:108-50-9

RT:17.927

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 9

( 38 38) ( 39 160) ( 40 68) ( 42 445) ( 52 14)

( 80 67) (107 96) (108 1000) (109 92)

NAME:4-Pyridinamine

COMMENT: RI=934.0, 18.2108 min STREPTOMYCETACEAE|RI:934.00

RI:934.00

FORM:C5H6N2

CASNO:504-24-5

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 18

( 39 304) ( 41 329) ( 42 251) ( 50 40) ( 51 60)

( 52 38) ( 53 136) ( 57 65) ( 67 134) ( 69 74)

( 70 208) ( 77 71) ( 78 165) ( 80 116) ( 93 160)

( 94 1000) ( 95 732) (113 60)

NAME:Propiolactone

COMMENT: RI=1023.2, 21.4689 min STREPTOMYCETACEAE|RI:1023.20

RI:1023.20

FORM:C3H4O2

CASNO:57-57-8

RT:21.469

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 10

( 40 89) ( 41 117) ( 42 1000) ( 43 367) ( 55 31)

( 58 61) ( 68 97) ( 69 138) ( 85 76) (113 200)

NAME:Azelaic Acid

COMMENT: RI=1548.1, 37.9054 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:1548.10

RI:1548.10

FORM:C9H16O4

CASNO:123-99-9

RT:37.905

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 24

( 41 248) ( 43 340) ( 45 60) ( 55 901) ( 59 159)

( 67 190) ( 68 107) ( 69 279) ( 74 224) ( 81 116)

( 82 145) ( 83 945) ( 84 185) ( 96 295) ( 97 371)

(101 101) (107 187) (111 855) (124 537) (125 390)

(135 220) (152 1000) (153 206) (185 240)

NAME:Ethyl ether

COMMENT: RI=765.2, 12.6974 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:765.20

RI:765.20

FORM:C4H10O

CASNO:60-29-7

RT:12.697

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 11

( 42 115) ( 43 585) ( 44 26) ( 45 1000) ( 46 31)

( 47 47) ( 59 22) ( 74 804) ( 75 319) ( 76 9)

(105 68)

NAME:Ethyl ether

COMMENT: RI=765.4, 12.7073 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:765.20

RI:765.20

FORM:C4H10O

CASNO:60-29-7

RT:12.697

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 11

( 42 115) ( 43 586) ( 44 26) ( 45 1000) ( 46 30)

( 47 46) ( 59 22) ( 74 807) ( 75 319) ( 76 9)

(105 71)

NAME:Nicotinyl Alcohol

COMMENT: RI=904.8, 18.3247 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:904.80

RI:904.80

FORM:C6H7NO

CASNO:100-55-0

RT:18.325

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 25

( 37 13) ( 38 30) ( 39 133) ( 40 31) ( 42 71)

( 43 22) ( 45 32) ( 49 8) ( 50 54) ( 51 79)

( 52 50) ( 53 206) ( 54 32) ( 64 20) ( 65 19)

( 66 18) ( 75 21) ( 78 37) ( 80 162) ( 81 1000)

( 82 68) ( 91 22) (106 17) (108 520) (109 686)

NAME:Pyridine

COMMENT: RI=643.6, 8.3155 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:643.60

RI:643.60

FORM:C5H5N

CASNO:110-86-1

RT:8.316

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 69

( 37 11) ( 42 28) ( 45 38) ( 50 76) ( 52 61)

( 56 24) ( 57 28) ( 59 9) ( 61 9) ( 63 25)

( 64 9) ( 68 45) ( 70 16) ( 73 17) ( 74 14)

( 76 9) ( 77 429) ( 78 48) ( 79 1000) ( 80 187)

( 81 40) ( 84 7) ( 85 10) ( 88 10) ( 89 3)

( 91 23) ( 97 14) (119 9) (124 5) (125 5)

(131 9) (138 6) (139 4) (143 8) (146 3)

(152 7) (153 9) (158 4) (160 4) (170 2)

(172 2) (175 4) (181 3) (189 5) (192 3)

(203 3) (209 12) (213 2) (214 1) (216 2)

(218 2) (220 2) (230 1) (235 2) (240 2)

(241 2) (246 2) (248 1) (263 1) (265 3)

(267 8) (269 4) (272 2) (276 1) (281 15)

(282 2) (283 5) (287 1) (291 1)

NAME:Pyridine

COMMENT: RI=650.2, 8.5129 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:643.60

RI:643.60

FORM:C5H5N

CASNO:110-86-1

RT:8.316

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 20

( 37 21) ( 38 18) ( 39 100) ( 49 6) ( 50 90)

( 51 104) ( 52 54) ( 53 31) ( 61 7) ( 62 12)

( 63 33) ( 65 34) ( 74 34) ( 76 12) ( 77 614)

( 78 56) ( 79 1000) ( 80 531) ( 81 42) (229 2)

NAME:Cyclohexene

COMMENT: RI=655.6, 8.6757 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:655.60

RI:655.60

FORM:C6H10

CASNO:Cyclohexene

RT:8.676

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 134) ( 41 73) ( 50 35) ( 51 39) ( 53 53)

( 65 223) ( 66 29) ( 67 1000) ( 68 49) ( 77 72)

( 78 23) ( 79 162) ( 81 108) ( 82 238)

NAME:2-Heptanone

COMMENT: RI=892.3, 17.8327 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:892.30

RI:892.30

FORM:C7H14O

CASNO:110-43-0

RT:17.833

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 25

( 38 42) ( 39 284) ( 40 51) ( 41 271) ( 43 1000)

( 44 28) ( 51 27) ( 55 176) ( 56 67) ( 58 452)

( 59 140) ( 65 260) ( 66 286) ( 67 118) ( 69 64)

( 70 31) ( 71 195) ( 72 175) ( 82 81) ( 85 148)

( 94 248) ( 99 67) (113 22) (114 33) (126 39)

NAME:Cyclohexanone

COMMENT: RI=906.7, 18.3970 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:844.40

RI:844.40

FORM:C6H10O

CASNO:108-94-1

RT:14.736

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 21

( 37 38) ( 38 56) ( 39 624) ( 40 91) ( 41 670)

( 42 574) ( 53 114) ( 54 60) ( 55 1000) ( 56 128)

( 69 432) ( 70 178) ( 79 98) ( 80 438) ( 83 254)

( 93 281) ( 97 82) ( 98 638) ( 99 52) (108 338)

(112 36)

NAME:Cyclohexene

COMMENT: RI=945.0, 19.8393 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:655.60

RI:655.60

FORM:C6H10

CASNO:Cyclohexene

RT:8.676

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 22

( 39 209) ( 41 183) ( 42 40) ( 45 102) ( 50 20)

( 51 38) ( 53 69) ( 54 28) ( 65 225) ( 66 30)

( 67 1000) ( 77 45) ( 79 78) ( 81 75) ( 82 705)

( 83 42) ( 92 39) ( 95 425) (108 293) (109 252)

(110 288) (111 30)

NAME:Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-

COMMENT: RI=1065.9, 24.1621 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1065.90

RI:1065.90

FORM:C10H14

CASNO:527-53-7

RT:24.162

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 44

( 37 21) ( 39 58) ( 41 99) ( 42 124) ( 50 59)

( 51 48) ( 52 40) ( 53 14) ( 54 170) ( 55 419)

( 56 200) ( 58 23) ( 63 23) ( 67 21) ( 68 163)

( 70 11) ( 77 103) ( 80 115) ( 82 466) ( 83 183)

( 87 10) ( 91 209) ( 92 29) ( 94 62) (103 19)

(105 167) (106 58) (107 41) (111 1000) (112 64)

(116 38) (117 135) (118 41) (119 176) (120 80)

(121 41) (122 23) (128 22) (131 20) (134 224)

(135 20) (136 42) (137 30) (142 7)

NAME:Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-

COMMENT: RI=1165.1, 27.3867 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1165.10

RI:1165.10

FORM:C10H14

CASNO:488-23-3

RT:27.387

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 23

( 51 50) ( 64 36) ( 74 15) ( 75 20) ( 77 90)

( 78 51) ( 91 1000) ( 92 482) (102 30) (103 41)

(115 310) (116 82) (117 801) (118 67) (119 580)

(127 33) (128 55) (131 169) (132 467) (133 121)

(135 46) (148 337) (149 42)

NAME:1,2-Benzenediamine, 4-chloro-

COMMENT: RI=1235.5, 29.5052 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:997.50

RI:997.50

FORM:C6H7ClN2

CASNO:95-83-0

RT:26.793

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 67

( 37 13) ( 38 16) ( 39 95) ( 40 37) ( 41 84)

( 50 15) ( 51 18) ( 52 9) ( 53 58) ( 54 61)

( 56 14) ( 57 96) ( 62 5) ( 63 18) ( 65 19)

( 66 31) ( 68 20) ( 71 69) ( 72 18) ( 74 6)

( 75 5) ( 76 8) ( 77 57) ( 78 26) ( 81 84)

( 82 46) ( 83 39) ( 85 14) ( 91 102) ( 92 19)

( 95 96) ( 96 35) ( 97 48) ( 98 1) ( 99 25)

(100 19) (102 7) (103 21) (112 30) (113 160)

(114 71) (115 96) (116 25) (117 38) (119 13)

(121 260) (122 21) (123 30) (124 133) (125 33)

(127 404) (130 13) (131 43) (133 24) (135 22)

(136 142) (137 12) (139 70) (140 8) (142 1000)

(143 114) (145 276) (146 131) (148 12) (149 7)

(151 9) (152 1)

NAME:Monobenzone

COMMENT: RI=1261.4, 30.2472 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1261.40

RI:1261.40

FORM:C13H12O2

CASNO:103-16-2

RT:30.247

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 19

( 39 44) ( 43 21) ( 50 25) ( 51 52) ( 52 13)

( 63 35) ( 65 155) ( 76 17) ( 77 43) ( 84 33)

( 89 26) ( 90 7) ( 91 1000) ( 92 74) (103 34)

(116 53) (131 386) (132 52) (148 60)

NAME:Nanofin (Piperidine, 2,6-dimethyl-)

COMMENT: RI=1352.0, 32.8376 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1352.00

RI:1352.00

FORM:C7H15N

CASNO:504-03-0

RT:32.838

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 67

( 37 3) ( 38 6) ( 39 29) ( 41 243) ( 42 129)

( 51 7) ( 53 7) ( 54 6) ( 57 4) ( 58 5)

( 62 1) ( 63 3) ( 64 1) ( 66 4) ( 68 87)

( 70 106) ( 71 10) ( 72 3) ( 74 3) ( 75 12)

( 77 14) ( 79 3) ( 80 17) ( 88 1) ( 93 6)

( 98 1000) ( 99 46) (100 3) (101 33) (104 2)

(107 2) (108 4) (109 19) (110 2) (111 34)

(112 3) (115 9) (116 11) (118 7) (119 6)

(122 12) (123 10) (125 30) (127 2) (128 6)

(129 104) (130 7) (139 70) (140 13) (143 12)

(144 6) (145 6) (147 3) (149 3) (154 104)

(155 7) (156 19) (157 14) (158 14) (159 13)

(161 13) (162 13) (167 4) (173 3) (175 2)

(178 2) (199 1)

NAME:Undecylenic Acid

COMMENT: RI=1395.4, 34.0792 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1395.40

RI:1395.40

FORM:C11H20O2

CASNO:112-38-9

RT:34.079

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 37

( 39 69) ( 41 237) ( 42 74) ( 45 672) ( 46 19)

( 47 46) ( 53 70) ( 55 129) ( 57 113) ( 59 79)

( 67 52) ( 69 174) ( 70 67) ( 71 357) ( 73 96)

( 74 66) ( 75 211) ( 81 161) ( 83 72) ( 84 183)

( 85 128) ( 87 83) ( 88 114) ( 99 432) (100 76)

(101 1000) (111 58) (113 102) (114 111) (115 112)

(127 436) (128 89) (130 71) (144 81) (195 8)

(251 4) (261 1)

NAME:Methylparaben (Benzoic acid, 4-hydroxy-, methyl ester)

COMMENT: RI=1438.4, 35.1690 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1438.40

RI:1438.40

FORM:C8H8O3

CASNO:99-76-3

RT:35.169

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 25

( 38 15) ( 39 102) ( 50 8) ( 53 16) ( 61 8)

( 62 15) ( 63 68) ( 64 27) ( 65 226) ( 66 23)

( 70 14) ( 74 17) ( 75 10) ( 92 30) ( 93 432)

( 94 40) (106 17) (119 13) (121 1000) (122 81)

(134 32) (135 13) (152 545) (153 46) (176 6)

NAME:17à-Methyltestosterone (BASIDIOMYCETE)

COMMENT: RI=2067.3, 51.9999 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:2297.60

RI:2297.60

FORM:C20H30O2

CASNO:58-18-4

RT:51.049

SOURCE:Z:\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 49

( 39 187) ( 41 448) ( 43 272) ( 55 400) ( 57 181)

( 65 79) ( 67 642) ( 69 386) ( 70 259) ( 79 429)

( 81 572) ( 83 273) ( 91 499) ( 93 587) ( 94 164)

( 95 937) (105 565) (106 206) (107 883) (108 282)

(109 633) (110 292) (111 239) (118 77) (119 781)

(120 272) (121 865) (122 162) (123 311) (132 1000)

(133 657) (134 213) (135 502) (136 278) (137 273)

(145 357) (147 264) (148 123) (149 263) (152 138)

(159 501) (160 105) (161 186) (162 132) (187 367)

(202 133) (222 88) (247 106) (272 87)

NAME:1H-Pyrrole, 1-methyl-

COMMENT: 12.122 min SF1-LF.FIN|RI:742.00

RI:742.00

FORM:C5H7N

CASNO:96-54-8

RT:12.122

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 50 109) ( 51 114) ( 53 177) ( 54 57) ( 55 51)

( 78 319) ( 80 605) ( 81 1000) ( 82 67)

NAME:1H-Pyrrole, 3-methyl-

COMMENT: 16.078 min A1-PRE\_041129203956.FIN|RI:851.00

RI:851.00

FORM:C5H7N

CASNO:616-43-3

RT:15.168

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 50 64) ( 51 108) ( 52 58) ( 53 531) ( 78 116)

( 80 1000) ( 81 783)

NAME:2(5H)-Furanone

COMMENT: 2(5H)-Furanone|RI:819.00

RI:819.00

FORM:C4H4O2

CASNO:SF1-LF-N1017

RT:14.843

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 42 51) ( 53 106) ( 54 283) ( 55 1000) ( 56 32)

( 84 656) ( 85 36)

NAME:Benzene

COMMENT: 9.099 min SF1-LF.FIN|RI:658.00

RI:658.00

FORM:C6H6

CASNO:SF1-LF-N1008

RT:9.099

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 7

( 50 288) ( 51 232) ( 52 160) ( 76 67) ( 77 398)

( 78 1000) ( 79 89)

NAME:Benzene

COMMENT: Benzene|RI:658.00

RI:658.00

FORM:C6H6

CASNO:SF1-LF-N1008

RT:9.099

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 50 209) ( 51 195) ( 52 128) ( 63 54) ( 77 257)

( 78 1000)

NAME:Benzene

COMMENT: Benzene|RI:658.00

RI:658.00

FORM:C6H6

CASNO:SF1-LF-N1008

RT:9.099

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 49 15) ( 50 148) ( 51 121) ( 52 66) ( 74 48)

( 76 59) ( 77 302) ( 78 1000) ( 79 57)

NAME:Benzene

COMMENT: Benzene|RI:658.00

RI:658.00

FORM:C6H6

CASNO:SF1-LF-N1008

RT:9.099

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 10

( 50 211) ( 51 194) ( 52 124) ( 63 48) ( 73 22)

( 74 88) ( 76 51) ( 77 302) ( 78 1000) ( 79 77)

NAME:Benzene

COMMENT: |RI:658.00

RI:658.00

FORM:C6H6

CASNO:71-43-2

RT:9.099

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 6

( 50 157) ( 51 179) ( 52 113) ( 77 298) ( 78 1000)

( 79 83)

NAME:Acetic acid, methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=768.4, 11.7722 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:768.40

RI:768.40

FORM:C4H8O3

CASNO:6290-49-9

RT:11.772

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 10

( 42 70) ( 43 697) ( 44 29) ( 45 1000) ( 46 27)

( 47 51) ( 59 12) ( 74 425) ( 75 197) (105 12)

NAME:2,3-Dihydrofuran

COMMENT: RI=803.2, 13.1031 min POLYPOD-HEMICELLULOSE+5TMAH+4ISTD2|RI:803.20

RI:803.20

FORM:C4H6O

CASNO:1191-99-7

RT:13.103

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\TMAH + ISTD Spectra.MSL

NUM PEAKS: 16

( 37 43) ( 38 67) ( 39 458) ( 40 40) ( 41 484)

( 42 459) ( 43 77) ( 53 57) ( 55 63) ( 56 58)

( 57 31) ( 69 757) ( 70 1000) ( 71 71) (100 419)

(101 84)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-methyl-

COMMENT: 19.029 min SF1-LF.FIN|RI:918.90

RI:918.90

CASNO:1120-73-6

RT:17.773

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 13

( 37 42) ( 38 44) ( 39 334) ( 40 51) ( 41 108)

( 50 60) ( 51 83) ( 53 186) ( 65 282) ( 67 1000)

( 68 291) ( 95 149) ( 96 300)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 3-ethyl-2-hydroxy-

COMMENT: RI=1087.6, 23.6594 min OLAA-OHIA-2-MIN-ROOT|RI:1087.60

RI:1087.60

FORM:C7H10O2

CASNO:21835-01-8

RT:23.659

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\May 2 2006.MSL

NUM PEAKS: 43

( 37 32) ( 38 28) ( 40 35) ( 41 106) ( 42 48)

( 43 200) ( 50 25) ( 51 30) ( 53 88) ( 54 21)

( 55 405) ( 56 53) ( 58 16) ( 65 59) ( 66 28)

( 67 279) ( 68 58) ( 69 42) ( 70 38) ( 71 13)

( 79 68) ( 83 557) ( 84 159) ( 95 33) ( 97 160)

( 98 297) ( 99 13) (101 3) (105 7) (109 32)

(111 131) (112 15) (120 14) (123 12) (124 10)

(125 96) (126 1000) (128 22) (133 13) (193 4)

(207 17) (209 12) (225 2)

NAME:2,5-Piperazinedione, 3-ethyl-6-(2-methylpropyl)-

COMMENT: |RI:1076.60

RI:1076.60

FORM:C10H18N2O2

CASNO:56771-93-8

RT:24.525

SOURCE:Z:\Project Folders\Pyrolysis\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial.MSL

NUM PEAKS: 23

( 39 236) ( 41 229) ( 43 98) ( 53 123) ( 54 143)

( 55 119) ( 57 170) ( 68 38) ( 71 137) ( 81 149)

( 82 163) ( 83 258) ( 84 39) ( 97 100) ( 99 80)

(100 33) (113 225) (114 80) (125 158) (127 357)

(139 101) (142 1000) (143 91)

NAME:2-Cyclopenten-1-one, 2-methyl-

COMMENT: |RI:918.90

RI:918.90

CASNO:1120-73-6

RT:17.773

SOURCE:C:\Program Files\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 26) ( 38 38) ( 39 236) ( 40 42) ( 41 120)

( 42 35) ( 50 35) ( 51 57) ( 53 240) ( 62 16)

( 65 150) ( 66 35) ( 67 1000) ( 68 169) ( 81 54)

( 95 135) ( 96 704) ( 97 61)

NAME:Hydrazine, propyl-

COMMENT: RI=765.3, 12.0559 min JN\_KOHALA\_ULUHE3\_LIVE|RI:765.30

RI:765.30

FORM:C3H10N2

CASNO:5039-61-2

RT:12.056

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 11

( 42 132) ( 43 630) ( 44 29) ( 45 1000) ( 46 38)

( 47 62) ( 59 23) ( 74 864) ( 75 345) ( 76 21)

(105 30)

NAME:Pyridine

COMMENT: 12.672 min SF1-LF.FIN|RI:757.00

RI:757.00

FORM:C5H5N

CASNO:SF1-LF-N1013

RT:12.672

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 8

( 50 635) ( 51 656) ( 52 832) ( 53 30) ( 75 30)

( 78 68) ( 79 1000) ( 80 79)

NAME:Benzoic acid, 3-hydroxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1447.0, 34.6565 min JN\_KOHALA\_ULUHE3\_LIVE|RI:1447.00

RI:1447.00

FORM:C8H8O3

CASNO:19438-10-9

RT:34.657

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Neff Lab + Microbial + troy-post-08-24-07.MSL

NUM PEAKS: 14

( 39 40) ( 63 27) ( 64 17) ( 65 133) ( 66 14)

( 92 20) ( 93 314) ( 94 30) (106 12) (121 1000)

(122 89) (134 25) (152 484) (153 50)

NAME:Cyclopropanecarboxaldehyde, methylene-

COMMENT: Cyclopropanecarboxaldehyde, methylene-|RI:12.86

RI:12.86

FORM:C5H6O

CASNO:142423-24-3

RT:12.856

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 37 54) ( 39 584) ( 50 291) ( 51 305) ( 53 592)

( 54 439) ( 62 20) ( 81 1000) ( 82 86)

NAME:Vinylfuran

COMMENT: 11.244 min C6-PRE.FIN|RI:725.00

RI:725.00

FORM:C6H6O

CASNO:1487-18-9

RT:11.390

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 11

( 37 68) ( 38 59) ( 39 542) ( 40 100) ( 61 51)

( 62 108) ( 63 139) ( 65 608) ( 66 563) ( 67 178)

( 94 1000)

NAME:Pyridine, methyl- (3/2/4)

COMMENT: Pyridine, methyl- (3/2/4)|RI:15.56

RI:15.56

FORM:C6H7N

CASNO:SF1-LF-N1019

RT:15.556

SOURCE:C:\PROGRA~1\NISTMS\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 9

( 39 336) ( 50 95) ( 51 156) ( 65 270) ( 66 447)

( 67 229) ( 92 273) ( 93 1000) ( 94 117)

NAME: Methylglyoxal

FORM: C3H4O2

CASNO: 78-98-8

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Methylglyoxal.MSP

NUM PEAKS: 29

( 13 61) ( 14 137) ( 15 432) ( 24 7) ( 25 20)

( 26 38) ( 27 49) ( 29 278) ( 30 33) ( 31 44)

( 32 37) ( 36 10) ( 37 11) ( 38 11) ( 39 12)

( 40 11) ( 41 36) ( 42 98) ( 43 1000) ( 44 36)

( 45 213) ( 46 4) ( 47 2) ( 53 5) ( 55 5)

( 56 7) ( 57 6) ( 72 16) ( 73 4)

NAME: 2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-1340

FORM: C6H6O2

CASNO: 620-02-0

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-.MSP

NUM PEAKS: 58

( 12 1) ( 13 2) ( 14 7) ( 15 32) ( 17 1)

( 18 8) ( 25 6) ( 26 38) ( 27 225) ( 28 28)

( 29 58) ( 30 1) ( 31 3) ( 32 4) ( 36 4)

( 37 26) ( 38 41) ( 39 115) ( 40 7) ( 41 9)

( 42 18) ( 43 97) ( 44 4) ( 48 2) ( 49 17)

( 50 77) ( 51 104) ( 52 59) ( 53 516) ( 54 48)

( 55 12) ( 56 2) ( 58 1) ( 60 1) ( 61 4)

( 62 3) ( 63 4) ( 64 2) ( 65 2) ( 66 4)

( 67 5) ( 68 2) ( 69 6) ( 77 1) ( 79 17)

( 80 14) ( 81 102) ( 82 8) ( 83 1) ( 84 1)

( 94 1) ( 95 19) ( 96 7) (108 3) (109 789)

(110 1000) (111 69) (112 6)

NAME:Vanillic Acid, methyl ester

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-9697|RI:1544.00

RI:1544.00

FORM:C9H10O4

CASNO:3943-74-6

RT:37.872

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Benzoic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester.MSP

NUM PEAKS: 81

( 14 1) ( 15 21) ( 26 3) ( 27 3) ( 28 7)

( 29 8) ( 30 1) ( 31 7) ( 37 3) ( 38 6)

( 39 14) ( 40 2) ( 41 13) ( 42 1) ( 43 3)

( 45 1) ( 49 2) ( 50 15) ( 51 38) ( 52 50)

( 53 23) ( 54 3) ( 55 18) ( 59 9) ( 61 3)

( 62 9) ( 63 16) ( 64 7) ( 65 35) ( 66 5)

( 67 18) ( 68 3) ( 69 5) ( 74 2) ( 75 3)

( 76 1) ( 77 27) ( 78 3) ( 79 24) ( 80 24)

( 81 7) ( 82 1) ( 85 6) ( 91 14) ( 92 10)

( 93 20) ( 94 5) ( 95 8) ( 96 3) (106 1)

(107 9) (108 50) (109 10) (110 2) (111 24)

(112 1) (119 4) (120 8) (121 9) (122 9)

(123 170) (124 14) (125 4) (135 4) (136 22)

(137 14) (138 2) (139 26) (140 2) (149 9)

(150 2) (151 1000) (152 95) (153 10) (166 1)

(167 53) (168 5) (181 14) (182 738) (183 82)

(184 9)

NAME: Resorcinol

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW- 285

FORM: C6H6O2

CASNO: 108-46-3

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Resorcinol.MSP

NUM PEAKS: 60

( 14 2) ( 15 2) ( 17 1) ( 18 2) ( 25 2)

( 26 9) ( 27 49) ( 28 9) ( 29 3) ( 31 5)

( 36 2) ( 37 14) ( 38 26) ( 39 80) ( 40 13)

( 41 19) ( 42 21) ( 43 21) ( 44 3) ( 45 1)

( 46 3) ( 49 5) ( 50 17) ( 51 24) ( 52 14)

( 53 71) ( 54 38) ( 55 74) ( 56 4) ( 57 2)

( 60 2) ( 61 9) ( 62 13) ( 63 39) ( 64 46)

( 65 12) ( 66 7) ( 67 3) ( 68 20) ( 69 53)

( 70 4) ( 71 16) ( 73 2) ( 74 2) ( 75 1)

( 77 2) ( 79 4) ( 80 2) ( 81 118) ( 82 121)

( 83 7) ( 84 3) ( 92 9) ( 93 2) ( 95 15)

( 96 1) (109 18) (110 1000) (111 68) (112 6)

NAME: 1,2-Benzenediol

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-1681

FORM: C6H6O2

CASNO: 120-80-9

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\1,2-Benzenediol.MSP

NUM PEAKS: 57

( 13 1) ( 14 4) ( 15 3) ( 17 1) ( 18 35)

( 25 6) ( 26 32) ( 27 97) ( 28 9) ( 29 29)

( 30 2) ( 31 8) ( 32 10) ( 36 3) ( 37 20)

( 38 43) ( 39 71) ( 40 6) ( 41 4) ( 42 9)

( 43 7) ( 46 10) ( 48 2) ( 49 10) ( 50 36)

( 51 43) ( 52 32) ( 53 70) ( 54 49) ( 55 54)

( 56 3) ( 60 2) ( 61 8) ( 62 17) ( 63 130)

( 64 326) ( 65 21) ( 66 6) ( 67 2) ( 68 3)

( 69 3) ( 71 1) ( 74 2) ( 77 3) ( 79 5)

( 80 4) ( 81 106) ( 82 67) ( 83 4) ( 91 1)

( 92 97) ( 93 7) ( 94 1) (109 23) (110 1000)

(111 65) (112 7)

NAME:Eugenol

COMMENT: K. VLADIMIR INSTITUTE OF CHEMISTRY BRATISLAVA CZECHOSLOVAKIA|RI:1374.00

RI:1374.00

FORM:C10H12O2

CASNO:97-53-0

RT:33.511

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Eugenol.MSP

NUM PEAKS: 38

( 27 131) ( 29 49) ( 31 22) ( 39 172) ( 41 74)

( 43 39) ( 50 58) ( 51 158) ( 52 58) ( 53 77)

( 55 220) ( 63 68) ( 65 116) ( 66 55) ( 77 294)

( 78 79) ( 79 64) ( 81 26) ( 91 214) ( 92 26)

( 93 52) ( 94 64) (103 252) (104 112) (105 77)

(107 32) (115 21) (121 155) (122 65) (131 216)

(132 79) (133 157) (137 188) (147 45) (149 324)

(150 39) (164 1000) (165 111)

NAME: Phenol, 3,4-dimethoxy-

FORM: C8H10O3

CASNO: 2033-89-8

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Phenol, 3,4-dimethoxy-.MSP

NUM PEAKS: 39

( 38 30) ( 39 110) ( 41 30) ( 42 50) ( 43 40)

( 50 40) ( 51 70) ( 52 80) ( 53 80) ( 54 30)

( 55 100) ( 62 20) ( 63 30) ( 64 10) ( 65 110)

( 69 120) ( 77 20) ( 79 30) ( 80 20) ( 81 50)

( 82 10) ( 93 100) ( 94 20) ( 95 40) ( 96 60)

(108 30) (109 30) (110 30) (111 310) (112 20)

(124 10) (125 40) (137 10) (138 40) (139 690)

(140 70) (153 40) (154 1000) (155 90)

NAME: 2-Propyn-1-amine

COMMENT: A.A.Kutin, Moscow, Russia

FORM: C3H5N

CASNO: 2450-71-7

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\2-Propyn-1-amine.MSP

NUM PEAKS: 20

( 33 1) ( 39 286) ( 40 26) ( 41 11) ( 42 3)

( 43 5) ( 44 5) ( 45 1) ( 46 1) ( 50 16)

( 51 79) ( 52 150) ( 53 33) ( 54 1000) ( 55 150)

( 56 10) ( 57 2) ( 58 1) ( 59 1) ( 60 1)

NAME: 2-Cyclohexen-1-one

COMMENT: TNO Volatile Compounds in Food - Chemical Concepts

FORM: C6H8O

CASNO: 930-68-7

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\2-Cyclohexen-1-one.MSP

NUM PEAKS: 48

( 25 2) ( 26 37) ( 27 136) ( 28 26) ( 29 5)

( 31 7) ( 33 7) ( 34 2) ( 36 1) ( 37 22)

( 38 59) ( 39 320) ( 40 239) ( 41 86) ( 42 124)

( 43 6) ( 44 1) ( 46 1) ( 47 2) ( 49 3)

( 50 22) ( 51 27) ( 52 11) ( 53 52) ( 54 16)

( 55 70) ( 56 2) ( 60 1) ( 61 4) ( 62 9)

( 63 12) ( 64 2) ( 65 21) ( 66 13) ( 67 30)

( 68 1000) ( 69 48) ( 70 2) ( 73 1) ( 74 1)

( 77 2) ( 78 1) ( 79 1) ( 81 5) ( 94 5)

( 95 1) ( 96 344) ( 97 23)

NAME: 2H-Pyran-2-one

FORM: C5H4O2

CASNO: 504-31-4

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\2H-Pyran-2-one.MSP

NUM PEAKS: 13

( 26 74) ( 28 78) ( 29 129) ( 37 126) ( 38 239)

( 39 1000) ( 40 321) ( 41 173) ( 68 884) ( 69 37)

( 95 181) ( 96 726) ( 97 37)

NAME: Vinylfuran

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-9878

FORM: C6H6O

CASNO: 1487-18-9

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Vinylfuran.MSP

NUM PEAKS: 54

( 14 2) ( 15 1) ( 25 2) ( 26 11) ( 27 42)

( 28 2) ( 29 18) ( 31 9) ( 32 3) ( 33 2)

( 36 3) ( 37 26) ( 38 54) ( 39 281) ( 40 166)

( 41 8) ( 42 6) ( 43 5) ( 46 1) ( 47 19)

( 48 1) ( 49 5) ( 50 20) ( 51 29) ( 52 8)

( 53 7) ( 54 2) ( 55 24) ( 56 1) ( 58 2)

( 59 1) ( 60 3) ( 61 15) ( 62 31) ( 63 62)

( 64 18) ( 65 451) ( 66 254) ( 67 14) ( 68 11)

( 73 1) ( 74 3) ( 75 1) ( 76 1) ( 77 5)

( 78 13) ( 79 8) ( 80 1) ( 91 1) ( 92 3)

( 93 17) ( 94 1000) ( 95 71) ( 96 11)

NAME:Phenol, 4-methyl-

COMMENT: Chemical Concepts|RI:1087.00

RI:1087.00

FORM:C7H8O

CASNO:106-44-5

RT:23.817

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Phenol, 4-methyl-.MSP

NUM PEAKS: 60

( 25 1) ( 26 10) ( 27 47) ( 29 5) ( 31 1)

( 36 1) ( 37 10) ( 38 19) ( 39 71) ( 40 10)

( 41 4) ( 42 3) ( 43 8) ( 44 1) ( 45 1)

( 48 1) ( 49 8) ( 50 45) ( 51 77) ( 52 37)

( 53 82) ( 54 34) ( 55 20) ( 56 1) ( 60 1)

( 61 8) ( 62 15) ( 63 30) ( 64 7) ( 65 19)

( 66 9) ( 67 4) ( 68 4) ( 69 1) ( 73 3)

( 74 9) ( 75 4) ( 76 3) ( 77 210) ( 78 44)

( 79 178) ( 80 82) ( 81 15) ( 82 3) ( 84 1)

( 85 2) ( 86 3) ( 87 2) ( 89 22) ( 90 85)

( 91 41) ( 92 3) ( 93 1) ( 94 1) (105 8)

(106 5) (107 1000) (108 885) (109 69) (110 4)

NAME:1,2-Cyclohexanedione

COMMENT: RI=1013.9, 21.6823 min JN\_KOHALA\_ULUHE3\_LIVE|RI:1013.90

RI:1013.90

FORM:C6H8O2

CASNO:765-87-7

RT:21.682

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Cathy.MSL

NUM PEAKS: 13

( 39 166) ( 41 135) ( 42 113) ( 43 133) ( 53 54)

( 55 445) ( 56 178) ( 69 109) ( 70 853) ( 83 620)

( 84 277) (112 1000) (113 119)

NAME:2-Pentenedioic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1113.6, 25.0527 min JN\_KOHALA\_ULUHE3\_LIVE|RI:1113.60

RI:1113.60

FORM:C7H10O4

CASNO:5164-76-1

RT:25.053

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Cathy.MSL

NUM PEAKS: 28

( 37 20) ( 39 148) ( 40 119) ( 50 20) ( 53 36)

( 54 12) ( 59 44) ( 61 7) ( 63 8) ( 67 214)

( 68 299) ( 69 241) ( 71 19) ( 75 13) ( 82 391)

( 83 36) ( 96 191) ( 98 429) ( 99 255) (100 14)

(103 25) (110 35) (124 490) (125 56) (126 1000)

(127 376) (128 15) (131 128)

NAME:Benzene, 1-ethyl-4-methoxy-

COMMENT: RI=1124.9, 25.4101 min JN\_KOHALA\_ULUHE3\_LIVE|RI:1124.90

RI:1124.90

FORM:C9H12O

CASNO:1515-95-3

RT:25.410

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\Cathy.MSL

NUM PEAKS: 26

( 38 5) ( 40 5) ( 41 17) ( 53 8) ( 56 2)

( 57 12) ( 59 6) ( 73 7) ( 79 26) ( 81 15)

( 94 18) ( 95 26) ( 97 5) (101 1) (103 37)

(104 7) (105 24) (106 9) (121 1000) (122 38)

(124 20) (125 3) (133 29) (135 32) (136 256)

(137 19)

NAME: Pyrrolidine, 1-nitroso-

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-7781

FORM: C4H8N2O

CASNO: 930-55-2

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Pyrrolidine, 1-nitroso-.MSP

NUM PEAKS: 48

( 12 1) ( 13 2) ( 14 12) ( 15 119) ( 16 1)

( 18 2) ( 25 3) ( 26 43) ( 27 251) ( 28 51)

( 29 21) ( 30 109) ( 31 2) ( 37 11) ( 38 23)

( 39 162) ( 40 51) ( 41 690) ( 42 449) ( 43 288)

( 44 38) ( 45 1) ( 49 2) ( 50 4) ( 51 6)

( 52 6) ( 53 43) ( 54 16) ( 55 20) ( 56 5)

( 57 1) ( 58 1) ( 63 1) ( 64 2) ( 66 2)

( 67 9) ( 68 131) ( 69 80) ( 70 49) ( 71 10)

( 72 1) ( 82 1) ( 83 1) ( 84 1) ( 99 17)

(100 1000) (101 57) (102 3)

NAME: 1,3,5-Cycloheptatriene

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW- 968

FORM: C7H8

CASNO: 544-25-2

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\1,3,5-Cycloheptatriene.MSP

NUM PEAKS: 45

( 15 1) ( 26 9) ( 27 34) ( 36 1) ( 37 17)

( 38 39) ( 39 170) ( 40 26) ( 41 17) ( 42 1)

( 43 12) ( 44 4) ( 45 28) ( 46 14) ( 49 6)

( 50 39) ( 51 65) ( 52 22) ( 53 16) ( 54 1)

( 60 3) ( 61 18) ( 62 36) ( 63 82) ( 64 18)

( 65 196) ( 66 32) ( 67 2) ( 73 1) ( 74 5)

( 75 3) ( 76 3) ( 77 18) ( 78 3) ( 79 4)

( 84 2) ( 85 5) ( 86 7) ( 87 4) ( 89 35)

( 90 10) ( 91 1000) ( 92 474) ( 93 34) ( 94 5)

NAME: Glycine, N,N-dimethyl-, methyl ester

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-1113

FORM: C5H11NO2

CASNO: 7148-06-3

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\Glycine, N,N-dimethyl-, methyl ester.MSP

NUM PEAKS: 33

( 14 4) ( 15 58) ( 17 1) ( 18 3) ( 26 2)

( 27 7) ( 28 23) ( 29 19) ( 30 72) ( 31 4)

( 32 3) ( 39 1) ( 40 6) ( 41 16) ( 42 123)

( 43 28) ( 44 22) ( 45 33) ( 54 2) ( 55 1)

( 56 12) ( 57 34) ( 58 1000) ( 59 36) ( 69 3)

( 72 8) ( 73 1) ( 74 2) ( 88 5) (100 4)

(116 2) (117 102) (118 6)

NAME: 1-Piperidineethanamine

COMMENT: J.E. WILKINSON S-CUBED, SAN DIEGO, CA.

FORM: C7H16N2

CASNO: 27578-60-5

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\1-Piperidineethanamine.MSP

NUM PEAKS: 24

( 41 176) ( 42 195) ( 44 154) ( 49 1) ( 51 1)

( 53 6) ( 55 157) ( 56 29) ( 57 2) ( 65 1)

( 67 8) ( 69 55) ( 70 91) ( 71 1) ( 80 1)

( 82 8) ( 84 65) ( 96 18) ( 98 1000) ( 99 57)

(110 2) (111 1) (128 24) (129 1)

NAME: 1,2-Benzenediol, mono(methylcarbamate)

FORM: C8H9NO3

CASNO: 10309-97-4

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\1,2-Benzenediol, mono(methylcarbamate).MSP

NUM PEAKS: 6

( 15 150) ( 27 60) ( 63 50) ( 64 100) (110 1000)

(167 90)

NAME: 4-Amino-2(1H)-pyridinone

COMMENT: Div. of Experiment Therapeutics WRAIR, WRAMC, Washington DC 20307

FORM: C5H6N2O

CASNO: 38767-72-5

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\4-Amino-2(1H)-pyridinone.MSP

NUM PEAKS: 36

( 41 95) ( 42 63) ( 43 17) ( 44 11) ( 49 4)

( 50 7) ( 51 21) ( 52 75) ( 53 31) ( 54 159)

( 55 144) ( 56 12) ( 63 5) ( 64 12) ( 65 26)

( 66 35) ( 67 24) ( 68 55) ( 69 84) ( 70 19)

( 75 1) ( 77 3) ( 78 1) ( 79 1) ( 80 3)

( 81 88) ( 82 363) ( 83 39) ( 84 3) ( 92 9)

( 93 3) ( 94 2) (109 28) (110 1000) (111 62)

(112 1)

NAME:N,N-Dimethyl-2-ethoxyethylamine

COMMENT: RI=834.2, 15.5047 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:834.20

RI:834.20

FORM:C6H15NO

CASNO:26311-17-1

RT:15.505

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 14

( 40 5) ( 42 133) ( 43 35) ( 44 13) ( 45 14)

( 56 28) ( 57 18) ( 58 1000) ( 59 27) ( 72 9)

( 73 6) ( 88 5) (117 54) (118 5)

NAME:[2-(N,N-Dimethyl)]-1,2-propanediamine

COMMENT: RI=883.4, 17.4774 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:883.40

RI:883.40

FORM:C5H14N2

CASNO:EPA-133387

RT: 17.477

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 35

( 14 2) ( 15 25) ( 17 1) ( 18 9) ( 26 3)

( 27 20) ( 28 61) ( 29 25) ( 30 84) ( 31 2)

( 38 1) ( 39 12) ( 40 5) ( 41 35) ( 42 131)

( 43 28) ( 44 166) ( 45 5) ( 46 2) ( 52 2)

( 54 12) ( 55 10) ( 56 76) ( 57 52) ( 58 37)

( 59 2) ( 68 2) ( 70 84) ( 72 1000) ( 73 46)

( 74 1) ( 84 2) ( 86 1) ( 87 1) (102 13)

NAME:2-Pyrrolidinone, 1-methyl-

COMMENT: RI=1051.8, 23.6816 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1051.80

RI:1051.80

FORM:C5H9NO

CASNO:872504

RT: 23.682

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 22

( 26 43) ( 27 97) ( 28 219) ( 39 169) ( 40 71)

( 41 289) ( 42 593) ( 43 224) ( 44 564) ( 53 13)

( 54 38) ( 55 38) ( 56 75) ( 57 16) ( 58 44)

( 68 43) ( 69 39) ( 70 142) ( 71 110) ( 98 705)

( 99 1000) (100 70)

NAME:4-Pyridinamine, N-methyl-

COMMENT: RI=1096.4, 25.2008 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1096.40

RI:1096.40

FORM:C6H8N2

CASNO:1121580

RT: 25.201

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 22

( 33 6) ( 40 29) ( 41 178) ( 42 168) ( 44 9)

( 51 222) ( 52 118) ( 53 39) ( 54 74) ( 55 106)

( 56 131) ( 57 133) ( 64 27) ( 66 101) ( 68 123)

( 78 202) ( 79 32) ( 81 49) (106 66) (107 943)

(108 1000) (109 17)

NAME:Isophosphinoline

COMMENT: RI=1101.8, 25.3825 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1101.80

RI:1101.80

FORM:C9H7P

CASNO:253372

RT: 25.383

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 12

(102 140) (103 10) (107 20) (115 260) (116 30)

(119 20) (120 130) (121 10) (144 90) (145 80)

(146 1000) (147 100)

NAME:Phenol, 4-methoxy-3-methyl-

COMMENT: RI=1197.4, 28.4088 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1197.40

RI:1197.40

FORM:C8H10O2

CASNO:14786824

RT: 28.409

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 51

( 26 15) ( 27 37) ( 28 26) ( 29 12) ( 37 6)

( 38 20) ( 39 99) ( 40 27) ( 41 72) ( 42 4)

( 43 11) ( 50 23) ( 51 51) ( 52 20) ( 53 34)

( 54 20) ( 55 91) ( 62 11) ( 63 22) ( 64 6)

( 65 70) ( 66 59) ( 67 278) ( 68 20) ( 69 10)

( 74 10) ( 75 7) ( 76 5) ( 77 130) ( 78 22)

( 79 28) ( 80 4) ( 81 8) ( 82 8) ( 91 5)

( 93 7) ( 94 37) ( 95 184) ( 96 13) (105 8)

(107 30) (108 6) (109 20) (122 5) (123 1000)

(124 93) (125 8) (137 25) (138 868) (139 89)

(140 6)

NAME:2-Methoxy-5-methylphenol

COMMENT: RI=1201.0, 28.5194 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1201.00

RI:1201.00

FORM:C8H10O2

CASNO:1195091

RT: 28.519

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 27

( 37 6) ( 39 73) ( 40 11) ( 41 53) ( 50 18)

( 51 57) ( 52 16) ( 53 20) ( 55 62) ( 62 8)

( 65 156) ( 66 63) ( 67 433) ( 68 27) ( 77 158)

( 78 79) ( 79 48) ( 94 47) ( 95 553) ( 96 41)

(106 79) (109 17) (123 907) (124 80) (137 57)

(138 1000) (139 85)

NAME:Benzene, 1-methoxy-4-(1-propenyl)-

COMMENT: RI=1304.0, 31.4654 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1304.00

RI:1304.00

FORM:C10H12O

CASNO:104461

RT: 31.465

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 81

( 14 16) ( 15 105) ( 16 3) ( 18 5) ( 26 11)

( 27 70) ( 28 1) ( 29 21) ( 30 5) ( 31 9)

( 37 5) ( 38 22) ( 39 107) ( 40 10) ( 41 22)

( 42 1) ( 43 4) ( 44 1) ( 45 1) ( 50 64)

( 51 116) ( 52 41) ( 53 40) ( 54 4) ( 55 51)

( 56 1) ( 61 6) ( 62 29) ( 63 82) ( 64 24)

( 65 64) ( 66 8) ( 67 1) ( 69 1) ( 74 37)

( 75 28) ( 77 246) ( 78 112) ( 79 159) ( 80 11)

( 81 1) ( 85 1) ( 86 5) ( 87 9) ( 89 51)

( 90 18) ( 91 160) ( 92 23) ( 93 16) ( 94 1)

( 98 3) (101 4) (102 40) (103 159) (104 51)

(105 223) (106 24) (107 19) (108 6) (109 1)

(113 3) (115 181) (116 72) (117 287) (118 37)

(119 25) (121 171) (122 17) (127 2) (128 2)

(129 4) (131 49) (132 44) (133 240) (134 22)

(135 1) (145 4) (147 553) (148 1000) (149 101)

(150 8)

NAME:Ethanone, 1-(3-methoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1322.6, 31.9966 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1322.60

RI:1322.60

FORM:C9H10O2

CASNO:586378

RT: 31.997

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 52

( 14 7) ( 15 33) ( 16 4) ( 27 9) ( 28 5)

( 29 8) ( 37 10) ( 38 36) ( 39 40) ( 41 5)

( 42 17) ( 43 150) ( 44 10) ( 49 5) ( 50 73)

( 51 51) ( 52 16) ( 53 20) ( 61 12) ( 62 31)

( 63 137) ( 64 137) ( 65 40) ( 66 8) ( 67 3)

( 73 5) ( 74 35) ( 75 25) ( 76 47) ( 77 357)

( 78 48) ( 79 32) ( 80 4) ( 89 8) ( 90 6)

( 91 32) ( 92 200) ( 93 20) (104 4) (105 4)

(107 464) (108 45) (119 8) (120 9) (121 7)

(133 9) (135 1000) (136 77) (137 6) (150 589)

(151 61) (152 6)

NAME:Phenol, 2,6-dimethoxy-

COMMENT: RI=1363.0, 33.1519 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1363.00

RI:1363.00

FORM:C8H10O3

CASNO:91101

RT: 33.152

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 100

( 13 1) ( 14 5) ( 15 33) ( 18 2) ( 25 1)

( 26 11) ( 27 18) ( 28 5) ( 29 19) ( 30 3)

( 31 7) ( 32 1) ( 34 1) ( 36 1) ( 37 12)

( 38 26) ( 39 114) ( 40 18) ( 41 11) ( 42 15)

( 43 12) ( 44 3) ( 45 1) ( 47 1) ( 48 1)

( 49 7) ( 50 33) ( 51 90) ( 52 50) ( 53 52)

( 54 10) ( 55 48) ( 56 3) ( 57 1) ( 59 1)

( 60 1) ( 61 4) ( 62 9) ( 63 17) ( 64 7)

( 65 132) ( 66 15) ( 67 11) ( 68 75) ( 69 10)

( 70 2) ( 71 13) ( 73 1) ( 74 2) ( 75 2)

( 76 5) ( 77 18) ( 78 5) ( 79 64) ( 80 20)

( 81 61) ( 82 9) ( 83 9) ( 84 1) ( 90 1)

( 91 5) ( 92 8) ( 93 176) ( 94 15) ( 95 41)

( 96 168) ( 97 13) ( 98 1) (105 2) (106 4)

(107 58) (108 39) (109 43) (110 25) (111 204)

(112 14) (113 1) (120 2) (121 3) (122 2)

(123 5) (124 11) (125 19) (126 2) (134 1)

(135 1) (136 1) (137 9) (138 9) (139 448)

(140 38) (141 5) (142 1) (151 2) (152 1)

(153 14) (154 1000) (155 90) (156 9) (157 1)

NAME:Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethoxy-

COMMENT: RI=1374.8, 33.4916 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1374.80

RI:1374.80

FORM:C10H12O2

CASNO:6380230

RT: 33.492

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 77

( 15 19) ( 26 3) ( 27 7) ( 29 8) ( 30 2)

( 31 2) ( 37 3) ( 38 10) ( 39 37) ( 40 4)

( 41 8) ( 43 5) ( 45 1) ( 49 3) ( 50 52)

( 51 93) ( 52 80) ( 53 37) ( 54 2) ( 55 25)

( 56 1) ( 61 8) ( 62 30) ( 63 76) ( 64 22)

( 65 87) ( 66 10) ( 67 4) ( 69 3) ( 73 2)

( 74 20) ( 75 18) ( 76 31) ( 77 307) ( 78 199)

( 79 36) ( 80 2) ( 81 4) ( 82 6) ( 85 2)

( 86 5) ( 87 5) ( 88 2) ( 89 81) ( 90 23)

( 91 355) ( 92 34) ( 93 66) ( 94 6) ( 95 4)

( 98 3) (101 5) (102 31) (103 201) (104 20)

(105 16) (106 30) (107 7) (117 5) (118 25)

(119 15) (120 4) (121 170) (122 16) (123 1)

(131 5) (132 3) (133 5) (134 2) (147 15)

(148 21) (149 373) (150 36) (163 2) (164 1000)

(165 111) (166 4)

NAME:Phenol, 2-methoxy-4-propyl-

COMMENT: RI=1375.9, 33.5229 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1375.90

RI:1375.90

FORM:C10H14O2

CASNO:2785877

RT: 33.523

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 58

( 27 247) ( 28 129) ( 29 245) ( 30 8) ( 31 29)

( 39 131) ( 40 17) ( 41 49) ( 42 12) ( 43 17)

( 44 17) ( 51 107) ( 52 47) ( 53 71) ( 54 10)

( 55 39) ( 62 13) ( 63 35) ( 64 10) ( 65 69)

( 66 59) ( 67 17) ( 77 97) ( 78 31) ( 79 41)

( 80 8) ( 81 79) ( 82 12) ( 89 12) ( 90 12)

( 91 39) ( 92 10) ( 93 12) ( 94 93) ( 95 49)

(105 15) (107 31) (108 12) (109 111) (110 12)

(121 12) (122 79) (123 63) (124 91) (125 12)

(127 17) (131 12) (133 12) (135 12) (137 1000)

(138 143) (139 12) (151 67) (152 13) (165 15)

(166 290) (167 33) (168 12)

NAME:Methyl 3-methoxy-4-methylbenzoate

COMMENT: RI=1442.6, 35.2734 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1442.60

RI:1442.60

FORM:C10H12O3

CASNO:3556830

RT: 35.273

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 76

( 12 3) ( 13 4) ( 14 19) ( 15 369) ( 16 2)

( 18 2) ( 26 1) ( 27 19) ( 29 27) ( 30 21)

( 37 14) ( 38 45) ( 39 149) ( 40 13) ( 41 10)

( 43 4) ( 50 105) ( 51 221) ( 52 149) ( 53 56)

( 54 5) ( 55 10) ( 59 9) ( 60 2) ( 61 10)

( 62 44) ( 63 124) ( 64 27) ( 65 98) ( 66 26)

( 67 8) ( 68 1) ( 69 5) ( 73 2) ( 75 21)

( 76 36) ( 77 289) ( 78 196) ( 79 31) ( 80 2)

( 81 3) ( 85 3) ( 86 9) ( 87 8) ( 89 84)

( 90 59) ( 91 418) ( 92 36) ( 93 29) ( 94 9)

(103 5) (105 77) (106 110) (107 28) (108 3)

(109 15) (117 14) (118 8) (119 17) (121 310)

(122 40) (123 4) (133 9) (134 20) (135 19)

(136 4) (137 27) (147 6) (149 1000) (150 100)

(151 14) (165 51) (166 6) (180 483) (181 54)

(182 6)

NAME:1,2,3,4-Tetramethoxybenzene

COMMENT: RI=1450.5, 35.4721 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1450.50

RI:1450.50

FORM:C10H14O4

CASNO:21450566

RT: 35.472

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 94

( 41 12) ( 42 4) ( 43 24) ( 44 2) ( 45 8)

( 49 6) ( 50 27) ( 51 27) ( 52 16) ( 53 67)

( 54 65) ( 55 18) ( 56 3) ( 57 3) ( 59 10)

( 61 5) ( 62 7) ( 63 11) ( 64 7) ( 65 33)

( 66 53) ( 67 16) ( 68 13) ( 69 22) ( 70 10)

( 71 3) ( 74 3) ( 75 3) ( 76 6) ( 77 54)

( 78 21) ( 79 34) ( 80 10) ( 81 18) ( 82 47)

( 83 12) ( 84 1) ( 85 3) ( 91 2) ( 92 17)

( 93 24) ( 94 41) ( 95 98) ( 96 12) ( 97 112)

( 98 6) ( 99 8) (105 2) (106 4) (107 23)

(108 25) (109 36) (110 10) (111 14) (112 7)

(120 1) (121 6) (122 17) (123 99) (124 41)

(125 60) (126 5) (127 6) (135 2) (136 3)

(137 51) (138 32) (139 12) (140 382) (141 29)

(142 4) (149 1) (150 2) (151 7) (152 12)

(153 57) (154 6) (155 137) (156 11) (157 1)

(165 2) (166 1) (167 16) (168 119) (169 11)

(170 2) (181 5) (182 29) (183 505) (184 49)

(185 7) (198 1000) (199 105) (200 14)

NAME:Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(1-propenyl)-

COMMENT: RI=1464.2, 35.8120 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1464.20

RI:1464.20

FORM:C11H14O2

CASNO:93163

RT: 35.812

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 66

( 39 60) ( 40 11) ( 41 90) ( 42 4) ( 43 20)

( 44 6) ( 45 11) ( 46 9) ( 50 25) ( 51 65)

( 52 20) ( 53 30) ( 55 50) ( 62 13) ( 63 45)

( 64 18) ( 65 78) ( 66 19) ( 67 9) ( 68 2)

( 74 8) ( 75 10) ( 76 20) ( 77 100) ( 78 35)

( 79 102) ( 89 43) ( 90 19) ( 91 230) ( 92 42)

( 93 10) ( 94 5) ( 95 22) (102 16) (103 190)

(104 33) (105 80) (106 8) (107 306) (108 24)

(115 87) (116 19) (117 55) (118 14) (119 28)

(120 28) (121 11) (122 1) (126 1) (132 37)

(133 15) (134 28) (135 6) (136 100) (137 9)

(146 26) (147 100) (148 13) (149 13) (151 12)

(162 18) (163 450) (164 60) (177 16) (178 1000)

(179 120)

NAME:Phenol, 3,5-dimethoxy-

COMMENT: RI=1486.5, 36.3692 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1486.50

RI:1486.50

FORM:C8H10O3

CASNO:500992

RT: 36.369

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 45

( 38 40) ( 39 80) ( 41 20) ( 42 30) ( 43 30)

( 50 30) ( 51 70) ( 52 70) ( 53 40) ( 54 10)

( 55 60) ( 59 20) ( 62 20) ( 63 40) ( 64 10)

( 65 50) ( 66 40) ( 68 60) ( 69 210) ( 77 30)

( 79 40) ( 80 20) ( 81 60) ( 82 10) ( 93 40)

( 94 170) ( 95 90) ( 96 40) (107 10) (108 40)

(109 20) (110 40) (111 140) (112 10) (123 40)

(124 90) (125 470) (126 40) (138 10) (139 40)

(140 10) (153 80) (154 1000) (155 90) (156 10)

NAME:Benzaldehyde, 3,4-dimethoxy-

COMMENT: RI=1498.9, 36.6786 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1498.90

RI:1498.90

FORM:C9H10O3

CASNO:120149

RT: 36.679

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 86

( 14 1) ( 15 37) ( 25 1) ( 26 9) ( 27 9)

( 28 5) ( 29 30) ( 30 1) ( 31 16) ( 37 11)

( 38 21) ( 39 47) ( 40 4) ( 41 81) ( 42 3)

( 43 8) ( 45 4) ( 49 7) ( 50 56) ( 51 133)

( 52 77) ( 53 28) ( 54 4) ( 55 19) ( 57 1)

( 59 3) ( 60 1) ( 61 9) ( 62 25) ( 63 59)

( 64 21) ( 65 91) ( 66 18) ( 67 65) ( 68 4)

( 69 7) ( 73 2) ( 74 12) ( 75 14) ( 76 26)

( 77 193) ( 78 21) ( 79 128) ( 80 60) ( 81 7)

( 82 1) ( 83 3) ( 90 1) ( 91 15) ( 92 31)

( 93 17) ( 94 25) ( 95 329) ( 96 21) ( 97 1)

(103 3) (104 9) (105 42) (106 9) (107 30)

(108 22) (109 26) (110 2) (119 37) (120 12)

(121 30) (122 34) (123 27) (124 2) (133 3)

(135 7) (136 9) (137 41) (138 9) (139 1)

(143 1) (149 9) (150 8) (151 155) (152 14)

(153 2) (164 5) (165 493) (166 1000) (167 100)

(168 10)

NAME:1H-Indole, 1,2,3-trimethyl-

COMMENT: RI=1561.8, 38.2482 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1561.80

RI:1561.80

FORM:C11H13N

CASNO:1971466

RT: 38.248

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 49

( 26 12) ( 27 35) ( 39 51) ( 41 27) ( 42 22)

( 43 11) ( 50 17) ( 51 57) ( 52 17) ( 53 15)

( 55 14) ( 63 35) ( 64 15) ( 65 32) ( 72 23)

( 75 32) ( 76 42) ( 77 118) ( 78 23) ( 79 24)

( 80 12) ( 89 40) ( 90 17) ( 91 57) (101 26)

(102 69) (103 44) (104 12) (115 175) (116 71)

(117 61) (118 16) (127 28) (128 90) (129 53)

(130 41) (131 15) (140 16) (141 14) (142 76)

(143 205) (144 569) (145 73) (154 15) (156 56)

(157 71) (158 1000) (159 876) (160 108)

NAME:Ethanone, 1-(3,4-dimethoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1580.3, 38.7083 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1580.30

RI:1580.30

FORM:C10H12O3

CASNO:1131620

RT: 38.708

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 87

( 14 3) ( 15 16) ( 17 1) ( 18 5) ( 26 1)

( 27 3) ( 28 26) ( 29 4) ( 34 3) ( 36 5)

( 37 3) ( 38 6) ( 39 15) ( 40 3) ( 41 8)

( 42 3) ( 43 96) ( 44 4) ( 45 3) ( 49 2)

( 50 21) ( 51 51) ( 52 9) ( 53 18) ( 54 1)

( 55 6) ( 57 1) ( 59 3) ( 61 4) ( 62 11)

( 63 26) ( 64 15) ( 65 18) ( 66 17) ( 67 3)

( 68 1) ( 69 5) ( 74 8) ( 75 9) ( 76 22)

( 77 98) ( 78 16) ( 79 80) ( 80 7) ( 81 5)

( 83 1) ( 89 3) ( 90 2) ( 91 24) ( 92 36)

( 93 7) ( 94 39) ( 95 8) (103 2) (104 5)

(105 16) (106 6) (107 36) (108 5) (109 24)

(110 2) (115 4) (119 24) (120 13) (121 15)

(122 61) (123 8) (133 2) (135 6) (136 1)

(137 110) (138 10) (139 3) (141 5) (149 9)

(150 2) (151 7) (152 2) (163 2) (164 2)

(165 1000) (166 104) (167 11) (179 1) (180 507)

(181 56) (182 6)

NAME:2-Hexenedioic acid, 2-methoxy-, dimethyl ester

COMMENT: RI=1591.7, 38.9940 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1591.70

RI:1591.70

FORM:C9H14O5

CASNO:56114717

RT: 38.994

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 61

( 27 320) ( 29 240) ( 31 100) ( 39 250) ( 40 60)

( 41 440) ( 42 320) ( 43 360) ( 45 801) ( 53 240)

( 54 100) ( 55 1000) ( 56 110) ( 57 90) ( 59 921)

( 67 130) ( 68 90) ( 69 230) ( 70 70) ( 71 280)

( 73 60) ( 74 90) ( 81 210) ( 82 120) ( 83 521)

( 84 80) ( 85 120) ( 87 140) ( 93 90) ( 95 60)

( 96 80) ( 97 240) ( 99 80) (100 80) (101 380)

(108 130) (109 100) (110 100) (111 340) (112 160)

(113 160) (114 130) (115 521) (116 50) (124 170)

(125 130) (127 190) (128 360) (129 360) (139 140)

(140 50) (141 100) (142 400) (143 581) (144 50)

(152 230) (153 110) (155 150) (171 80) (172 80)

(202 20)

NAME:2-Propenoic acid, 3-(2,3-dimethoxyphenyl)-, (E)-

COMMENT: RI=1708.8, 42.6641 min KOHALA\_ULUHE\_L1\_JN|RI:1708.80

RI:1708.80

FORM:C11H12O4

CASNO:7345826

RT: 42.664

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 133

( 15 9) ( 17 1) ( 18 3) ( 26 2) ( 27 6)

( 28 3) ( 29 4) ( 30 1) ( 31 2) ( 32 2)

( 37 1) ( 38 10) ( 39 24) ( 40 5) ( 41 6)

( 42 1) ( 43 6) ( 44 4) ( 45 10) ( 46 1)

( 47 4) ( 49 1) ( 50 19) ( 51 60) ( 52 13)

( 53 12) ( 54 3) ( 55 16) ( 56 1) ( 57 2)

( 59 10) ( 60 3) ( 61 5) ( 62 11) ( 63 28)

( 64 7) ( 65 35) ( 66 27) ( 67 5) ( 68 4)

( 69 5) ( 71 1) ( 73 2) ( 74 10) ( 75 14)

( 76 17) ( 77 104) ( 78 32) ( 79 16) ( 80 3)

( 81 3) ( 82 2) ( 83 1) ( 85 2) ( 86 2)

( 87 6) ( 88 22) ( 89 33) ( 90 12) ( 91 121)

( 92 15) ( 93 8) ( 94 15) ( 95 8) ( 96 4)

( 97 1) (101 3) (102 10) (103 44) (104 14)

(105 69) (106 19) (107 10) (108 3) (109 14)

(110 2) (111 1) (115 2) (116 5) (117 9)

(118 25) (119 26) (120 30) (121 178) (122 20)

(123 11) (124 7) (125 1) (129 1) (130 6)

(131 25) (132 9) (133 104) (134 169) (135 24)

(136 5) (137 11) (138 1) (144 1) (145 3)

(146 8) (147 57) (148 116) (149 77) (150 15)

(151 6) (152 1) (153 1) (158 2) (159 4)

(160 3) (161 59) (162 46) (163 14) (164 4)

(165 8) (166 1) (175 46) (176 417) (177 903)

(178 101) (179 10) (189 2) (190 7) (191 43)

(192 7) (193 9) (194 1) (207 4) (208 1000)

(209 124) (210 14) (211 1)

NAME:Isobutyronitrile (Propanenitrile, 2-methyl-)

COMMENT: RI=636.1, 8.0881 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:636.10

RI:636.10

FORM:C4H7N

CASNO:78-82-0

RT:8.088

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 34

( 36 4) ( 37 49) ( 38 56) ( 39 273) ( 40 88)

( 41 513) ( 42 1000) ( 43 40) ( 51 57) ( 52 178)

( 53 23) ( 54 99) ( 55 20) ( 57 421) ( 58 12)

( 59 18) ( 63 11) ( 64 21) ( 68 670) ( 70 40)

( 71 23) ( 72 7) ( 85 11) ( 87 19) ( 88 102)

( 89 8) ( 97 11) (107 8) (120 5) (130 5)

(145 6) (151 5) (163 9) (267 7)

NAME:Isobutyronitrile

COMMENT: RI=636.1, 8.0881 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:636.10

RI:636.10

FORM:C4H7N

CASNO:78820

RT: 8.088

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 36

( 13 1) ( 14 5) ( 15 28) ( 24 1) ( 25 6)

( 26 79) ( 27 139) ( 28 225) ( 29 11) ( 30 1)

( 32 2) ( 36 5) ( 37 38) ( 38 44) ( 39 123)

( 40 54) ( 41 252) ( 42 1000) ( 43 34) ( 49 1)

( 50 7) ( 51 54) ( 52 112) ( 53 111) ( 54 286)

( 55 10) ( 58 1) ( 62 2) ( 63 6) ( 64 14)

( 65 2) ( 66 11) ( 67 9) ( 68 602) ( 69 26)

( 70 1)

NAME:1-Propene, 3-propoxy-

COMMENT: RI=674.2, 9.2344 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:674.20

RI:674.20

FORM:C6H12O

CASNO:1471030

RT: 9.234

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 15

( 41 1000) ( 42 140) ( 43 380) ( 44 20) ( 55 30)

( 56 10) ( 57 230) ( 58 721) ( 59 100) ( 60 10)

( 71 120) ( 72 10) ( 85 2) ( 99 2) (100 3)

NAME:Hexane, 3-methyl-

COMMENT: RI=702.6, 10.1158 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:702.60

RI:702.60

FORM:C7H16

CASNO:589344

RT: 10.116

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 61

( 1 4) ( 2 1) ( 12 1) ( 13 1) ( 14 2)

( 15 29) ( 16 1) ( 25 1) ( 26 16) ( 27 275)

( 28 44) ( 29 408) ( 30 9) ( 31 1) ( 33 1)

( 34 1) ( 37 2) ( 38 5) ( 39 141) ( 40 22)

( 41 442) ( 42 109) ( 43 1000) ( 44 33) ( 45 1)

( 50 3) ( 51 7) ( 52 3) ( 53 22) ( 54 7)

( 55 135) ( 56 329) ( 57 472) ( 58 20) ( 59 1)

( 61 1) ( 62 1) ( 63 1) ( 64 1) ( 65 2)

( 66 1) ( 67 4) ( 68 1) ( 69 11) ( 70 378)

( 71 467) ( 72 25) ( 73 1) ( 77 1) ( 78 1)

( 79 1) ( 80 1) ( 81 1) ( 82 1) ( 83 1)

( 84 9) ( 85 42) ( 86 3) ( 99 1) (100 35)

(101 3)

NAME:Bi-2-cyclohexen-1-yl

COMMENT: RI=746.2, 11.9130 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:746.20

RI:746.20

FORM:C12H18

CASNO:1541204

RT: 11.913

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 50

( 26 7) ( 27 115) ( 28 6) ( 29 45) ( 35 2)

( 38 6) ( 39 129) ( 40 16) ( 41 224) ( 42 8)

( 43 1) ( 49 1) ( 50 12) ( 51 38) ( 52 26)

( 53 153) ( 54 18) ( 55 32) ( 56 1) ( 58 5)

( 62 1) ( 63 6) ( 64 3) ( 65 34) ( 66 20)

( 67 25) ( 68 1) ( 73 1) ( 74 4) ( 75 8)

( 76 4) ( 77 80) ( 78 40) ( 79 223) ( 80 562)

( 81 1000) ( 82 58) ( 83 1) ( 91 19) ( 92 4)

( 93 3) ( 94 2) (103 1) (104 3) (105 3)

(107 1) (115 2) (117 2) (129 1) (154 1)

NAME:1H-Pyrrole, 1-methyl-

COMMENT: RI=746.3, 11.9179 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:746.30

RI:746.30

FORM:C5H7N

CASNO:96548

RT: 11.918

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 48

( 13 17) ( 14 110) ( 15 200) ( 16 2) ( 24 3)

( 25 17) ( 26 100) ( 27 165) ( 28 168) ( 29 10)

( 30 5) ( 36 10) ( 37 78) ( 38 130) ( 39 410)

( 40 107) ( 41 74) ( 42 350) ( 43 11) ( 44 2)

( 48 4) ( 49 30) ( 50 99) ( 51 109) ( 52 82)

( 53 332) ( 54 151) ( 55 190) ( 56 8) ( 57 1)

( 62 3) ( 63 7) ( 64 17) ( 65 5) ( 66 42)

( 67 6) ( 68 4) ( 69 1) ( 74 1) ( 75 4)

( 76 12) ( 77 31) ( 78 63) ( 79 29) ( 80 821)

( 81 1000) ( 82 57) ( 83 1)

NAME:Acetamide, N-methyl-

COMMENT: RI=836.4, 15.5915 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:836.40

RI:836.40

FORM:C3H7NO

CASNO:79163

RT: 15.592

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 27

( 13 17) ( 15 134) ( 16 1) ( 25 7) ( 26 28)

( 27 62) ( 28 31) ( 29 90) ( 30 654) ( 31 143)

( 38 5) ( 40 29) ( 41 37) ( 42 194) ( 43 921)

( 44 51) ( 45 78) ( 51 7) ( 52 8) ( 54 21)

( 55 12) ( 56 15) ( 58 561) ( 59 17) ( 73 1000)

( 74 38) ( 75 7)

NAME:Pyridine, 2-ethyl-

COMMENT: RI=910.0, 18.5180 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:910.00

RI:910.00

FORM:C7H9N

CASNO:100710

RT: 18.518

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 43

( 29 11) ( 30 1) ( 31 1) ( 36 1) ( 37 22)

( 38 45) ( 39 140) ( 40 16) ( 41 14) ( 42 3)

( 49 11) ( 50 90) ( 51 170) ( 52 160) ( 53 67)

( 54 17) ( 55 2) ( 61 5) ( 62 9) ( 63 29)

( 64 18) ( 65 76) ( 66 11) ( 67 4) ( 73 2)

( 74 7) ( 75 10) ( 76 11) ( 77 47) ( 78 150)

( 79 260) ( 80 62) ( 81 2) ( 90 1) ( 91 4)

( 92 30) ( 93 2) (104 16) (105 16) (106 1000)

(107 430) (108 40) (109 1)

NAME:1H-Pyrrole, 2-ethyl-4-methyl-

COMMENT: RI=933.6, 19.4099 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:933.60

RI:933.60

FORM:C7H11N

CASNO:69687770

RT: 19.410

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 25

( 41 32) ( 42 22) ( 47 31) ( 50 17) ( 51 39)

( 52 35) ( 53 63) ( 54 26) ( 65 35) ( 66 27)

( 67 90) ( 68 16) ( 77 65) ( 78 45) ( 79 28)

( 80 40) ( 92 27) ( 93 168) ( 94 1000) ( 95 70)

(106 45) (107 21) (108 71) (109 461) (110 41)

NAME:1H-Pyrrole, 2,3,5-trimethyl-

COMMENT: RI=962.1, 20.4865 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:962.10

RI:962.10

FORM:C7H11N

CASNO:2199419

RT: 20.486

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 36

( 41 46) ( 42 127) ( 47 12) ( 50 15) ( 51 25)

( 52 23) ( 53 64) ( 54 52) ( 55 13) ( 57 15)

( 62 6) ( 63 17) ( 64 11) ( 65 72) ( 66 39)

( 67 111) ( 68 14) ( 69 8) ( 70 9) ( 71 27)

( 77 3) ( 79 23) ( 80 18) ( 81 15) ( 83 4)

( 85 6) ( 91 12) ( 92 32) ( 93 128) ( 94 260)

( 95 25) (106 35) (107 86) (108 1000) (109 635)

(110 48)

NAME:2,3,4-Trimethylpyrrole

COMMENT: RI=993.4, 21.6677 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:993.40

RI:993.40

FORM:C7H11N

CASNO:3855785

RT: 21.668

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 36

( 36 5) ( 38 6) ( 39 47) ( 40 15) ( 41 52)

( 42 32) ( 47 22) ( 50 8) ( 51 21) ( 52 25)

( 53 49) ( 54 39) ( 55 6) ( 62 2) ( 63 7)

( 64 2) ( 65 36) ( 66 18) ( 67 82) ( 68 7)

( 77 30) ( 78 10) ( 79 33) ( 80 10) ( 81 22)

( 82 2) ( 91 8) ( 92 22) ( 93 77) ( 94 254)

( 95 16) (106 49) (107 49) (108 1000) (109 639)

(110 50)

NAME:Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-

COMMENT: RI=1098.2, 25.2614 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1098.20

RI:1098.20

FORM:C10H12

CASNO:27831136

RT: 25.261

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 19

( 78 31) ( 91 183) ( 92 19) (103 33) (104 16)

(105 71) (106 9) (115 285) (116 122) (117 935)

(118 93) (127 28) (128 62) (129 53) (130 16)

(131 269) (132 1000) (133 109) (134 6)

NAME:1H-Pyrrole, 3-ethyl-2,5-dimethyl-

COMMENT: RI=1099.7, 25.3135 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1099.70

RI:1099.70

FORM:C8H13N

CASNO:69687781

RT: 25.314

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 21

( 41 23) ( 42 104) ( 51 28) ( 53 22) ( 65 35)

( 66 21) ( 67 65) ( 77 35) ( 79 30) ( 81 20)

( 92 22) ( 93 85) ( 94 52) (106 37) (107 125)

(108 1000) (109 78) (120 44) (122 98) (123 407)

(124 19)

NAME:Phenol, 2-ethyl-

COMMENT: RI=1144.6, 26.7355 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1144.60

RI:1144.60

FORM:C8H10O

CASNO:90006

RT: 26.735

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 66

( 14 2) ( 15 10) ( 19 1) ( 26 12) ( 27 47)

( 28 5) ( 29 10) ( 31 2) ( 32 1) ( 37 9)

( 38 27) ( 39 105) ( 40 15) ( 41 17) ( 42 4)

( 43 7) ( 44 2) ( 45 5) ( 46 4) ( 49 4)

( 50 39) ( 51 89) ( 52 32) ( 53 48) ( 55 11)

( 59 4) ( 60 13) ( 61 9) ( 62 22) ( 63 44)

( 64 13) ( 65 48) ( 66 18) ( 67 4) ( 73 3)

( 74 12) ( 75 12) ( 77 287) ( 78 67) ( 79 158)

( 80 12) ( 81 3) ( 85 1) ( 86 2) ( 87 3)

( 89 10) ( 91 64) ( 92 11) ( 93 10) ( 94 17)

( 95 4) ( 98 1) (101 3) (102 9) (103 45)

(104 14) (105 13) (107 1000) (108 77) (109 4)

(118 1) (119 4) (120 6) (122 377) (123 33)

(124 2)

NAME:2(1H)-Pyridinone, 1-methyl-

COMMENT: RI=1206.7, 28.6833 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1206.70

RI:1206.70

FORM:C6H7NO

CASNO:694859

RT: 28.683

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 48

( 25 5) ( 26 50) ( 27 92) ( 28 29) ( 29 5)

( 30 4) ( 36 2) ( 37 28) ( 38 61) ( 39 270)

( 40 49) ( 41 36) ( 42 203) ( 43 5) ( 48 2)

( 49 16) ( 50 58) ( 51 75) ( 52 49) ( 53 99)

( 54 72) ( 55 104) ( 56 5) ( 61 1) ( 62 2)

( 63 4) ( 64 15) ( 65 11) ( 66 30) ( 67 4)

( 68 33) ( 69 1) ( 75 2) ( 76 2) ( 77 1)

( 78 26) ( 79 13) ( 80 333) ( 81 503) ( 82 27)

( 91 2) ( 92 1) ( 93 6) ( 94 8) (108 32)

(109 1000) (110 64) (111 3)

NAME:Glycyl-L-tryptophylglycine

COMMENT: RI=1323.8, 32.0304 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1323.80

RI:1323.80

FORM:C15H18N4O4

CASNO:23067325

RT: 32.030

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 56

( 41 56) ( 42 62) ( 43 69) ( 44 125) ( 45 105)

( 46 103) ( 50 61) ( 51 59) ( 52 46) ( 55 32)

( 56 9) ( 57 10) ( 58 63) ( 59 32) ( 61 10)

( 62 53) ( 63 113) ( 64 47) ( 65 23) ( 74 40)

( 75 33) ( 76 43) ( 77 49) ( 78 10) ( 79 10)

( 87 18) ( 89 280) ( 90 353) ( 91 39) ( 98 19)

(101 11) (102 86) (104 24) (105 9) (111 14)

(114 24) (115 9) (116 130) (117 1000) (118 115)

(128 47) (129 188) (130 212) (131 69) (133 35)

(135 13) (142 9) (143 19) (152 9) (158 20)

(159 11) (216 10) (217 8) (273 20) (274 18)

(318 9)

NAME:1,2,3,4-Tetrahydroisoquinoline, 6,7,8-trimethoxy-1-methyl-

COMMENT: RI=1810.2, 45.8125 min KOHALA\_ULUHE\_A590\_850\_1\_JN|RI:1810.20

RI:1810.20

FORM:C13H19NO3

CASNO:EPA-127935

RT: 45.813

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 134

( 41 27) ( 42 46) ( 43 35) ( 44 27) ( 45 163)

( 46 23) ( 50 13) ( 51 35) ( 52 28) ( 53 102)

( 54 47) ( 55 43) ( 56 30) ( 57 9) ( 59 14)

( 60 6) ( 61 2) ( 62 7) ( 63 24) ( 64 15)

( 65 46) ( 66 18) ( 67 18) ( 68 6) ( 69 16)

( 70 19) ( 71 38) ( 72 32) ( 73 4) ( 74 1)

( 75 18) ( 76 11) ( 77 62) ( 78 35) ( 79 41)

( 80 17) ( 81 35) ( 82 12) ( 83 3) ( 84 1)

( 85 1) ( 86 1) ( 88 57) ( 89 22) ( 90 14)

( 91 44) ( 92 23) ( 93 31) ( 94 9) ( 96 38)

( 98 130) ( 99 56) (100 3) (101 1) (102 13)

(103 53) (104 37) (105 20) (106 25) (107 20)

(108 8) (109 3) (110 1) (111 36) (115 10)

(116 39) (117 15) (118 21) (119 16) (120 15)

(121 47) (122 5) (123 2) (124 2) (128 1)

(129 1) (130 10) (131 15) (132 17) (133 21)

(134 12) (135 24) (136 14) (137 3) (144 2)

(145 4) (146 13) (147 20) (148 27) (149 14)

(150 11) (151 6) (158 1) (159 3) (160 16)

(161 73) (162 27) (163 15) (164 58) (165 13)

(166 1) (173 2) (174 6) (175 11) (176 24)

(177 11) (178 56) (179 9) (180 1) (181 2)

(188 8) (189 22) (190 27) (191 7) (192 160)

(193 29) (194 5) (195 1) (202 1) (203 1)

(204 7) (205 2) (206 66) (207 14) (208 4)

(220 11) (221 8) (222 1000) (223 136) (224 13)

(235 1) (236 17) (237 23) (238 5)

NAME:2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-

COMMENT: RI=938.8, 20.7793 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:938.80

RI:938.80

FORM:C7H10O

CASNO:1193186

RT: 20.779

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 40

( 26 13) ( 27 92) ( 29 20) ( 37 10) ( 38 27)

( 39 291) ( 40 38) ( 41 88) ( 42 37) ( 43 21)

( 44 37) ( 50 24) ( 51 37) ( 52 21) ( 53 79)

( 54 307) ( 55 41) ( 56 7) ( 57 13) ( 60 7)

( 62 6) ( 63 11) ( 65 22) ( 66 11) ( 67 71)

( 68 11) ( 69 10) ( 71 8) ( 77 22) ( 79 27)

( 81 16) ( 82 1000) ( 83 60) ( 84 8) ( 93 7)

( 94 6) ( 95 15) (110 376) (111 33) (112 2)

NAME:4H-Pyran-4-one, 3,5-dihydroxy-2-methyl-

COMMENT: RI=1024.7, 27.7501 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:1024.70

RI:1024.70

FORM:C6H6O4

CASNO:1073967

RT: 27.750

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 16

( 39 190) ( 40 210) ( 41 140) ( 42 130) ( 43 440)

( 53 110) ( 55 210) ( 57 120) ( 67 120) ( 68 320)

( 69 90) ( 71 170) ( 87 70) ( 96 80) (113 95)

(142 1000)

NAME:2-Pyridinemethanol, acetate (ester)

COMMENT: RI=1034.2, 28.0193 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:1034.20

RI:1034.20

FORM:C8H9NO2

CASNO:1007494

RT: 28.019

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 55

( 26 11) ( 27 26) ( 28 15) ( 29 8) ( 31 2)

( 37 6) ( 38 17) ( 39 106) ( 40 8) ( 41 9)

( 42 11) ( 43 377) ( 44 8) ( 46 3) ( 49 3)

( 50 30) ( 51 81) ( 52 82) ( 53 44) ( 54 3)

( 55 2) ( 57 2) ( 61 2) ( 62 8) ( 63 24)

( 64 27) ( 65 174) ( 66 16) ( 75 2) ( 76 5)

( 77 3) ( 78 226) ( 79 196) ( 80 194) ( 81 14)

( 90 2) ( 91 14) ( 92 183) ( 93 35) ( 94 3)

(104 2) (106 69) (107 7) (108 1000) (109 719)

(110 69) (111 3) (119 1) (120 1) (122 3)

(123 1) (136 17) (137 1) (151 4) (152 8)

NAME:2(1H)-Pyridinone, 5-methyl-

COMMENT: RI=1272.1, 33.6240 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:1272.10

RI:1272.10

FORM:C6H7NO

CASNO:1003685

RT: 33.624

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 41

( 41 70) ( 42 29) ( 43 10) ( 44 11) ( 48 3)

( 49 23) ( 50 107) ( 51 151) ( 52 133) ( 53 373)

( 54 132) ( 55 62) ( 56 7) ( 57 2) ( 60 2)

( 61 9) ( 62 14) ( 63 25) ( 64 18) ( 65 23)

( 66 13) ( 67 4) ( 68 9) ( 69 5) ( 75 4)

( 76 4) ( 77 4) ( 78 11) ( 79 19) ( 80 1000)

( 81 288) ( 82 30) ( 83 2) ( 91 8) ( 92 8)

( 93 1) (107 3) (108 60) (109 970) (110 136)

(111 8)

NAME:Benzene, (1-methyldecyl)-

COMMENT: RI=1717.0, 40.3607 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:1717.00

RI:1717.00

FORM:C17H28

CASNO:4536883

RT: 40.361

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 60

( 27 23) ( 28 5) ( 29 30) ( 39 13) ( 40 1)

( 41 49) ( 42 5) ( 43 34) ( 50 1) ( 51 7)

( 52 1) ( 53 3) ( 54 1) ( 55 18) ( 56 5)

( 57 12) ( 58 1) ( 63 2) ( 65 6) ( 67 2)

( 69 4) ( 70 1) ( 71 4) ( 75 1) ( 76 1)

( 77 33) ( 78 13) ( 79 38) ( 80 2) ( 82 3)

( 83 1) ( 84 1) ( 85 1) ( 89 1) ( 90 1)

( 91 96) ( 92 9) (101 2) (102 2) (103 23)

(104 39) (105 1000) (106 114) (107 6) (115 5)

(116 2) (117 7) (118 7) (119 8) (120 5)

(128 1) (129 1) (131 2) (133 3) (147 3)

(161 1) (175 1) (217 2) (232 34) (233 5)

NAME:6,9-Heptadecadiene

COMMENT: RI=1766.0, 41.4614 min ASCOMYCETE\_NEW|RI:1766.00

RI:1766.00

FORM:C17H32

CASNO:81265034

RT: 41.461

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 47

( 43 109) ( 50 3) ( 51 9) ( 52 6) ( 53 51)

( 54 497) ( 55 295) ( 58 7) ( 59 3) ( 63 3)

( 65 34) ( 66 60) ( 67 1000) ( 68 415) ( 69 151)

( 73 11) ( 74 1) ( 77 70) ( 78 14) ( 79 126)

( 80 86) ( 81 410) ( 82 514) ( 83 45) ( 87 2)

( 92 4) ( 93 14) ( 95 254) ( 96 497) (105 5)

(109 260) (110 331) (123 90) (124 203) (137 50)

(138 157) (139 4) (151 35) (152 37) (165 9)

(166 18) (171 6) (179 2) (180 5) (208 6)

(236 262) (237 56)

NAME:Spiro[2.4]hepta-4,6-diene

COMMENT: RI=748.0, 11.9870 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:748.00

RI:748.00

FORM:C7H8

CASNO:765468

RT: 11.987

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 45

( 24 1) ( 26 9) ( 27 20) ( 28 1) ( 29 2)

( 31 4) ( 37 8) ( 38 16) ( 39 58) ( 40 10)

( 41 6) ( 43 3) ( 44 1) ( 45 9) ( 46 1)

( 49 3) ( 50 24) ( 51 37) ( 52 15) ( 53 9)

( 59 3) ( 60 1) ( 61 12) ( 62 23) ( 63 54)

( 64 11) ( 65 141) ( 66 40) ( 67 2) ( 73 1)

( 74 7) ( 75 3) ( 76 2) ( 77 11) ( 78 4)

( 79 1) ( 84 1) ( 85 2) ( 86 3) ( 87 2)

( 89 30) ( 90 8) ( 91 1000) ( 92 387) ( 93 26)

NAME:1H-Tetrazole, 1-methyl-

COMMENT: RI=786.2, 13.5654 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:786.20

RI:786.20

FORM:C2H4N4

CASNO:16681779

RT: 13.565

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 17

( 26 50) ( 27 200) ( 28 871) ( 29 300) ( 38 10)

( 39 10) ( 40 20) ( 41 80) ( 42 170) ( 43 180)

( 53 40) ( 54 20) ( 55 1000) ( 56 90) ( 57 10)

( 84 320) ( 85 50)

NAME:1-Propene, 3-azido-

COMMENT: RI=823.1, 15.0577 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:823.10

RI:823.10

FORM:C3H5N3

CASNO:821136

RT: 15.058

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 36

( 26 284) ( 27 498) ( 28 1000) ( 29 40) ( 30 1)

( 31 4) ( 32 6) ( 37 8) ( 38 27) ( 39 270)

( 40 40) ( 41 233) ( 42 13) ( 43 4) ( 44 1)

( 45 1) ( 50 1) ( 51 14) ( 52 30) ( 53 9)

( 54 283) ( 55 25) ( 56 3) ( 57 1) ( 59 1)

( 65 1) ( 66 1) ( 67 4) ( 68 19) ( 69 2)

( 74 1) ( 79 2) ( 80 2) ( 81 1) ( 83 24)

( 84 1)

NAME:Hex-2-yn-4-one, 2-methyl-

COMMENT: RI=939.1, 19.6177 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:939.10

RI:939.10

FORM:C7H10O

CASNO:52066338

RT: 19.618

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 20

( 27 70) ( 28 30) ( 37 20) ( 38 30) ( 39 150)

( 40 30) ( 41 110) ( 42 20) ( 43 70) ( 44 2)

( 66 20) ( 67 1000) ( 68 50) ( 69 2) ( 82 60)

( 83 5) ( 95 60) ( 96 5) (110 20) (111 1)

NAME:Butanenitrile, 4-(methylthio)-

COMMENT: RI=1068.8, 24.2617 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1068.80

RI:1068.80

FORM:C5H9NS

CASNO:59121243

RT: 24.262

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 49

( 33 10) ( 34 18) ( 35 105) ( 36 7) ( 37 33)

( 38 37) ( 39 140) ( 40 90) ( 41 340) ( 42 33)

( 43 13) ( 44 450) ( 45 245) ( 46 130) ( 47 200)

( 48 160) ( 49 41) ( 50 20) ( 51 21) ( 52 25)

( 53 13) ( 54 150) ( 55 14) ( 56 5) ( 57 13)

( 58 40) ( 59 50) ( 60 20) ( 61 1000) ( 62 230)

( 63 50) ( 64 23) ( 65 7) ( 66 30) ( 67 20)

( 68 105) ( 69 25) ( 71 10) ( 72 10) ( 73 27)

( 74 85) ( 75 80) ( 76 10) ( 87 9) ( 88 6)

(114 4) (115 290) (116 22) (117 16)

NAME:5H-1-Pyrindine

COMMENT: RI=1124.9, 26.1140 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1124.90

RI:1124.90

FORM:C8H7N

CASNO:270917

RT: 26.114

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 64

( 26 19) ( 27 29) ( 28 11) ( 29 2) ( 31 2)

( 36 2) ( 37 34) ( 38 57) ( 39 126) ( 40 41)

( 41 12) ( 42 1) ( 43 12) ( 44 3) ( 45 3)

( 48 2) ( 49 9) ( 50 57) ( 51 69) ( 52 28)

( 53 5) ( 54 5) ( 55 2) ( 57 2) ( 58 3)

( 59 3) ( 60 4) ( 61 29) ( 62 71) ( 63 163)

( 64 84) ( 65 23) ( 66 5) ( 67 4) ( 69 2)

( 71 1) ( 73 10) ( 74 16) ( 75 14) ( 76 15)

( 77 12) ( 78 16) ( 79 1) ( 84 2) ( 85 6)

( 86 11) ( 87 17) ( 88 21) ( 89 413) ( 90 676)

( 91 71) ( 92 5) ( 97 1) (102 1) (103 2)

(104 2) (105 1) (111 1) (114 8) (115 10)

(116 104) (117 1000) (118 99) (119 5)

NAME:Pyridine, 1-acetyl-1,2,3,4-tetrahydro-

COMMENT: RI=1175.9, 27.7292 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1175.90

RI:1175.90

FORM:C7H11NO

CASNO:19615271

RT: 27.729

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 14

( 41 59) ( 42 39) ( 43 396) ( 53 59) ( 54 198)

( 55 118) ( 67 39) ( 68 366) ( 80 89) ( 82 1000)

( 83 941) ( 84 59) (125 703) (126 59)

NAME:2-Butanone, 4-(2,3-dihydro-1H-indol-1-yl)-

COMMENT: RI=1214.5, 28.9061 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1214.50

RI:1214.50

FORM:C12H15NO

CASNO:40135920

RT: 28.906

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 17

( 77 95) ( 79 40) ( 89 50) ( 90 50) ( 91 90)

(103 40) (105 40) (117 170) (118 60) (130 130)

(132 1000) (133 110) (144 40) (145 20) (146 30)

(189 150) (190 30)

NAME:m-Aminophenylacetylene

COMMENT: RI=1286.7, 30.9720 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1286.70

RI:1286.70

FORM:C8H7N

CASNO:54060309

RT: 30.972

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 62

( 14 2) ( 15 1) ( 17 1) ( 25 1) ( 26 6)

( 27 12) ( 28 41) ( 29 2) ( 30 1) ( 32 2)

( 36 2) ( 37 23) ( 38 40) ( 39 73) ( 40 22)

( 41 37) ( 42 8) ( 43 4) ( 45 4) ( 46 7)

( 48 2) ( 49 12) ( 50 59) ( 51 48) ( 52 38)

( 53 7) ( 54 11) ( 57 2) ( 58 39) ( 60 4)

( 61 34) ( 62 68) ( 63 127) ( 64 48) ( 65 26)

( 66 13) ( 67 9) ( 73 8) ( 74 41) ( 75 28)

( 76 23) ( 77 10) ( 78 18) ( 79 1) ( 84 3)

( 85 10) ( 86 18) ( 87 19) ( 89 393) ( 90 221)

( 91 32) ( 92 1) ( 97 2) ( 98 7) ( 99 2)

(100 3) (101 2) (102 2) (114 5) (117 1000)

(118 89) (119 4)

NAME:6-Methyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline

COMMENT: RI=1366.3, 33.2479 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1366.30

RI:1366.30

FORM:C10H13N

CASNO:91612

RT: 33.248

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 71

( 37 5) ( 38 23) ( 39 18) ( 40 9) ( 41 7)

( 42 2) ( 49 6) ( 50 23) ( 51 23) ( 52 15)

( 53 6) ( 54 3) ( 61 7) ( 62 23) ( 63 40)

( 64 34) ( 65 37) ( 66 9) ( 67 1) ( 71 8)

( 72 10) ( 73 7) ( 74 12) ( 75 14) ( 76 32)

( 77 64) ( 78 41) ( 79 25) ( 80 9) ( 85 2)

( 86 7) ( 87 10) ( 88 20) ( 89 75) ( 90 82)

( 91 187) ( 92 38) ( 93 13) ( 94 3) (100 2)

(101 11) (102 36) (103 69) (104 62) (105 43)

(106 19) (107 2) (113 4) (114 21) (115 83)

(116 80) (117 259) (118 170) (119 69) (120 25)

(127 10) (128 29) (129 58) (130 348) (131 272)

(132 389) (133 41) (141 4) (142 21) (143 39)

(144 94) (145 73) (146 897) (147 1000) (148 110)

(149 5)

NAME:5-Heptadecene, 1-bromo-

COMMENT: RI=1624.4, 39.9793 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1624.40

RI:1624.40

FORM:C17H33Br

CASNO:56600216

RT: 39.979

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 211

( 26 3) ( 27 45) ( 28 96) ( 29 96) ( 30 3)

( 31 1) ( 32 25) ( 35 1) ( 36 5) ( 37 1)

( 38 3) ( 39 74) ( 40 14) ( 41 342) ( 42 42)

( 43 188) ( 44 33) ( 45 2) ( 46 1) ( 47 1)

( 48 1) ( 49 1) ( 50 4) ( 51 13) ( 52 10)

( 53 92) ( 54 87) ( 55 311) ( 56 57) ( 57 92)

( 58 4) ( 59 1) ( 60 2) ( 61 1) ( 62 1)

( 63 4) ( 64 2) ( 65 52) ( 66 87) ( 67 1000)

( 68 197) ( 69 149) ( 70 36) ( 71 33) ( 72 3)

( 73 2) ( 74 2) ( 75 1) ( 76 2) ( 77 83)

( 78 23) ( 79 271) ( 80 100) ( 81 856) ( 82 729)

( 83 271) ( 84 30) ( 85 16) ( 86 2) ( 87 1)

( 88 1) ( 89 1) ( 90 1) ( 91 57) ( 92 11)

( 93 78) ( 94 52) ( 95 390) ( 96 597) ( 97 206)

( 98 21) ( 99 3) (100 1) (101 1) (102 1)

(103 3) (104 2) (105 8) (106 3) (107 14)

(108 17) (109 140) (110 57) (111 28) (112 13)

(113 7) (114 17) (115 4) (116 5) (117 3)

(118 2) (119 3) (120 2) (121 9) (122 12)

(123 65) (124 65) (125 14) (126 4) (127 2)

(128 3) (129 2) (130 1) (131 2) (132 1)

(133 2) (134 1) (135 7) (136 7) (137 39)

(138 44) (139 7) (140 6) (141 10) (142 3)

(143 1) (144 1) (145 1) (146 1) (147 1)

(148 1) (149 2) (150 2) (151 11) (152 20)

(153 4) (154 6) (155 5) (156 2) (157 1)

(158 1) (159 1) (160 1) (161 1) (162 1)

(163 1) (164 1) (165 6) (166 8) (167 3)

(168 2) (169 2) (170 1) (171 1) (172 1)

(173 1) (174 1) (175 1) (176 1) (177 1)

(178 1) (179 10) (180 18) (181 3) (182 1)

(183 1) (184 1) (185 1) (186 1) (187 1)

(188 1) (189 1) (190 1) (191 2) (192 1)

(193 6) (194 7) (195 2) (196 1) (197 1)

(198 1) (199 1) (200 1) (201 1) (202 1)

(203 1) (204 1) (205 1) (206 2) (207 6)

(208 25) (209 4) (210 1) (211 1) (212 1)

(213 1) (215 1) (216 1) (217 1) (218 1)

(219 1) (220 1) (221 1) (222 3) (223 1)

(224 1) (225 1) (226 1) (227 1) (228 1)

(229 1) (230 1) (231 1) (232 1) (233 1)

(234 4) (235 1) (236 155) (237 30) (238 3)

(239 1)

NAME:Hexadecanenitrile

COMMENT: RI=1680.8, 41.7723 min BACTERIODETES\_FOR\_OLDLIB|RI:1680.80

RI:1680.80

FORM:C16H31N

CASNO:629798

RT: 41.772

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 63

( 15 4) ( 26 4) ( 27 130) ( 28 90) ( 29 340)

( 39 100) ( 40 20) ( 41 730) ( 42 180) ( 43 930)

( 53 50) ( 54 210) ( 55 550) ( 56 250) ( 57 970)

( 68 70) ( 69 380) ( 70 440) ( 71 380) ( 82 380)

( 83 430) ( 84 200) ( 85 210) ( 96 650) ( 97 1000)

( 98 200) ( 99 80) (110 800) (111 470) (112 110)

(113 50) (124 570) (125 190) (126 90) (127 30)

(138 320) (139 80) (140 60) (141 20) (152 220)

(153 50) (154 40) (155 10) (166 190) (167 40)

(168 30) (179 7) (180 230) (181 50) (182 30)

(183 6) (194 310) (195 70) (207 40) (208 220)

(209 50) (221 7) (222 50) (223 10) (234 2)

(235 20) (236 10) (237 20)

NAME:1,2-Cyclopentanedione, 3-methyl-

COMMENT: RI=952.4, 22.1730 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:952.40

RI:952.40

FORM:C6H8O2

CASNO:765708

RT: 22.173

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 56

( 14 2) ( 15 11) ( 16 3) ( 18 3) ( 25 7)

( 26 51) ( 27 169) ( 29 107) ( 30 5) ( 31 17)

( 36 3) ( 37 21) ( 38 39) ( 39 206) ( 40 46)

( 41 362) ( 42 128) ( 43 257) ( 44 45) ( 45 10)

( 50 46) ( 52 35) ( 53 102) ( 54 53) ( 55 490)

( 56 273) ( 57 46) ( 58 10) ( 61 5) ( 62 5)

( 63 9) ( 64 2) ( 65 43) ( 66 68) ( 67 21)

( 68 7) ( 69 472) ( 70 48) ( 71 27) ( 80 7)

( 81 11) ( 82 25) ( 83 257) ( 84 31) ( 85 7)

( 93 3) ( 94 2) ( 95 8) ( 97 69) ( 98 2)

(108 6) (110 12) (111 46) (112 1000) (113 69)

(114 5)

NAME:Ethanone, 1-(1H-pyrrol-2-yl)-

COMMENT: RI=966.5, 23.6170 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:966.50

RI:966.50

FORM:C6H7NO

CASNO:1072839

RT: 23.617

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 54

( 13 2) ( 14 6) ( 15 32) ( 18 2) ( 25 2)

( 26 10) ( 27 28) ( 28 5) ( 29 4) ( 30 1)

( 33 2) ( 36 3) ( 37 30) ( 38 67) ( 39 242)

( 40 58) ( 41 38) ( 42 12) ( 43 92) ( 44 5)

( 46 1) ( 47 7) ( 49 4) ( 50 15) ( 51 21)

( 52 22) ( 53 48) ( 54 4) ( 55 2) ( 60 1)

( 61 3) ( 62 5) ( 63 9) ( 64 17) ( 65 23)

( 66 491) ( 67 59) ( 68 2) ( 75 1) ( 76 1)

( 78 3) ( 79 2) ( 80 24) ( 81 2) ( 91 3)

( 92 5) ( 93 10) ( 94 1000) ( 95 59) ( 96 3)

(108 1) (109 796) (110 57) (111 3)

NAME:[1,3]Diazepan-2,4-dione

COMMENT: RI=972.5, 24.2379 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:972.50

RI:972.50

FORM:C5H8N2O2

CASNO:75548991

RT: 24.238

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 75

( 25 4) ( 26 42) ( 27 100) ( 28 265) ( 29 103)

( 30 256) ( 31 9) ( 36 3) ( 37 8) ( 38 14)

( 39 85) ( 40 59) ( 41 272) ( 42 362) ( 43 198)

( 44 264) ( 45 16) ( 47 4) ( 48 2) ( 49 2)

( 50 3) ( 51 6) ( 52 15) ( 53 10) ( 54 25)

( 55 66) ( 56 234) ( 57 253) ( 58 41) ( 59 8)

( 66 5) ( 67 5) ( 68 9) ( 69 27) ( 70 14)

( 71 10) ( 72 5) ( 73 48) ( 74 3) ( 77 3)

( 78 3) ( 79 2) ( 80 2) ( 81 4) ( 82 6)

( 83 22) ( 84 355) ( 85 1000) ( 86 67) ( 87 12)

( 88 2) ( 91 3) ( 93 2) ( 94 2) ( 95 3)

( 96 3) ( 97 7) ( 98 3) ( 99 4) (100 32)

(101 3) (104 2) (105 3) (109 3) (110 4)

(111 5) (112 11) (113 3) (125 3) (126 2)

(127 3) (128 727) (129 70) (130 8) (131 2)

NAME:1,4:3,6-Dianhydro-à-d-glucopyranose

COMMENT: RI=1054.6, 28.5992 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:1054.60

RI:1054.60

FORM:C6H8O4

CASNO:EPA-98148

RT: 28.599

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 57

( 14 5) ( 15 38) ( 19 26) ( 26 20) ( 27 106)

( 29 384) ( 30 34) ( 31 160) ( 37 3) ( 38 11)

( 39 102) ( 40 27) ( 41 249) ( 42 125) ( 43 149)

( 44 66) ( 45 43) ( 47 40) ( 50 2) ( 51 3)

( 52 3) ( 53 22) ( 54 13) ( 55 72) ( 56 12)

( 57 378) ( 58 43) ( 59 14) ( 60 96) ( 61 14)

( 67 8) ( 68 40) ( 69 1000) ( 70 242) ( 71 111)

( 72 9) ( 73 106) ( 74 3) ( 81 20) ( 83 1)

( 84 16) ( 85 148) ( 86 133) ( 87 10) ( 88 1)

( 97 34) ( 98 190) ( 99 124) (100 6) (101 2)

(114 58) (115 9) (127 43) (128 1) (143 2)

(144 94) (145 19)

NAME:(Hexahydropyrrolizin-3-ylidene)-acetaldehyde

COMMENT: RI=1309.3, 34.0910 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:1309.30

RI:1309.30

FORM:C9H13NO

CASNO:EPA-192572

RT: 34.091

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 80

( 27 15) ( 29 91) ( 30 43) ( 31 16) ( 33 11)

( 37 20) ( 38 39) ( 39 204) ( 40 91) ( 41 188)

( 42 55) ( 43 68) ( 44 22) ( 45 13) ( 47 24)

( 50 35) ( 51 44) ( 52 32) ( 53 87) ( 54 68)

( 55 135) ( 56 31) ( 57 46) ( 61 15) ( 62 20)

( 63 30) ( 64 18) ( 65 154) ( 66 177) ( 67 116)

( 68 79) ( 69 79) ( 70 115) ( 71 33) ( 73 9)

( 74 15) ( 77 33) ( 78 14) ( 79 36) ( 80 86)

( 81 91) ( 82 49) ( 83 36) ( 84 18) ( 85 19)

( 91 21) ( 92 16) ( 93 41) ( 94 1000) ( 95 316)

( 96 77) ( 97 39) ( 98 11) (105 22) (106 63)

(107 34) (108 126) (109 67) (110 66) (111 19)

(117 21) (118 10) (119 22) (120 49) (121 27)

(122 259) (123 142) (124 35) (125 18) (132 11)

(134 157) (135 41) (136 29) (137 3) (148 9)

(149 44) (150 601) (151 855) (152 171) (153 20)

NAME:Octadecanoic acid, 2-propenyl ester

COMMENT: RI=2317.3, 51.3983 min BASIDIOMYCETE\_NEW|RI:2317.30

RI:2317.30

FORM:C21H40O2

CASNO:6289312

RT: 51.398

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 241

( 25 2) ( 26 13) ( 27 81) ( 28 105) ( 29 227)

( 30 8) ( 31 15) ( 32 16) ( 33 2) ( 34 2)

( 37 4) ( 38 8) ( 39 117) ( 40 28) ( 41 988)

( 42 154) ( 43 1000) ( 44 56) ( 45 26) ( 46 2)

( 47 2) ( 50 2) ( 51 3) ( 52 2) ( 53 28)

( 54 174) ( 55 696) ( 56 247) ( 57 903) ( 58 211)

( 59 25) ( 60 28) ( 61 13) ( 62 2) ( 63 2)

( 64 2) ( 65 5) ( 66 6) ( 67 130) ( 68 56)

( 69 434) ( 70 105) ( 71 509) ( 72 42) ( 73 52)

( 74 6) ( 75 2) ( 76 1) ( 77 6) ( 78 3)

( 79 23) ( 80 10) ( 81 150) ( 82 101) ( 83 333)

( 84 130) ( 85 317) ( 86 23) ( 87 24) ( 88 4)

( 89 2) ( 90 1) ( 91 8) ( 92 2) ( 93 22)

( 94 8) ( 95 150) ( 96 42) ( 97 276) ( 98 113)

( 99 109) (100 854) (101 219) (102 25) (103 4)

(104 1) (105 5) (106 2) (107 21) (108 6)

(109 89) (110 24) (111 146) (112 40) (113 586)

(114 56) (115 44) (116 5) (117 2) (118 1)

(119 6) (120 2) (121 27) (122 5) (123 47)

(124 16) (125 81) (126 17) (127 52) (128 8)

(129 26) (130 3) (131 2) (132 1) (133 6)

(134 3) (135 28) (136 4) (137 23) (138 10)

(139 56) (140 11) (141 22) (142 18) (143 11)

(144 3) (145 2) (146 1) (147 5) (148 3)

(149 22) (150 4) (151 13) (152 5) (153 38)

(154 8) (155 44) (156 15) (157 17) (158 3)

(159 1) (160 2) (161 3) (162 2) (163 16)

(164 4) (165 10) (166 5) (167 27) (168 5)

(169 93) (170 13) (171 15) (172 2) (173 1)

(175 3) (176 1) (177 10) (178 3) (179 6)

(180 4) (181 19) (182 4) (183 11) (184 3)

(185 13) (186 2) (187 1) (189 2) (191 7)

(192 2) (193 5) (194 3) (195 14) (196 4)

(197 9) (198 3) (199 10) (200 2) (201 1)

(202 1) (203 2) (204 1) (205 6) (206 3)

(207 5) (208 2) (209 10) (210 4) (211 17)

(212 4) (213 7) (214 2) (215 1) (216 1)

(217 2) (218 1) (219 2) (220 7) (221 6)

(222 6) (223 8) (224 3) (225 23) (226 5)

(227 6) (228 2) (229 2) (235 2) (236 2)

(237 2) (238 2) (239 16) (240 5) (241 4)

(242 2) (243 2) (246 2) (247 20) (248 7)

(249 5) (250 2) (251 2) (253 10) (254 3)

(255 2) (263 3) (264 19) (265 50) (266 13)

(267 227) (268 48) (269 6) (270 2) (281 51)

(282 14) (283 19) (284 5) (285 3) (286 2)

(295 17) (296 5) (297 1) (306 1) (309 17)

(310 5) (323 4) (324 56) (325 15) (326 4)

(327 2)

NAME:Isocrotonic acid

COMMENT: RI=829.9, 15.8862 min BETA-PROTEOBACTERIA\_NEW|RI:829.90

RI:829.90

FORM:C4H6O2

CASNO:503640

RT: 15.886

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 28

( 25 7) ( 26 48) ( 27 128) ( 28 27) ( 29 87)

( 31 17) ( 36 19) ( 37 106) ( 38 170) ( 39 873)

( 40 262) ( 41 772) ( 42 158) ( 43 75) ( 44 26)

( 45 202) ( 53 24) ( 55 32) ( 57 38) ( 58 9)

( 60 23) ( 68 390) ( 69 298) ( 70 6) ( 71 87)

( 85 40) ( 86 1000) ( 87 40)

NAME:Acetic acid, cyano-, ethyl ester

COMMENT: RI=915.5, 18.3961 min BETA-PROTEOBACTERIA\_NEW|RI:915.50

RI:915.50

FORM:C5H7NO2

CASNO:105566

RT: 18.396

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 50

( 12 3) ( 13 6) ( 14 14) ( 15 35) ( 16 1)

( 17 1) ( 18 3) ( 25 4) ( 26 39) ( 27 224)

( 28 99) ( 29 1000) ( 30 21) ( 31 29) ( 32 3)

( 38 17) ( 39 35) ( 40 174) ( 41 129) ( 42 47)

( 43 62) ( 44 15) ( 45 98) ( 46 3) ( 47 1)

( 51 1) ( 52 1) ( 53 1) ( 54 12) ( 55 2)

( 56 2) ( 57 2) ( 59 1) ( 60 9) ( 61 1)

( 67 16) ( 68 710) ( 69 27) ( 70 2) ( 71 1)

( 73 4) ( 85 7) ( 86 105) ( 87 4) ( 88 2)

( 98 4) (112 2) (113 17) (114 2) (115 5)

NAME:Pyrrolo[1,2-a]pyrazine-1,4-dione, hexahydro-3-(2-methylpropyl)-

COMMENT: RI=2024.6, 46.2081 min BETA-PROTEOBACTERIA\_NEW|RI:2024.60

RI:2024.60

FORM:C11H18N2O2

CASNO:5654864

RT: 46.208

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 95

( 40 72) ( 41 326) ( 42 136) ( 43 268) ( 44 162)

( 45 13) ( 47 1) ( 50 4) ( 51 10) ( 52 8)

( 53 29) ( 54 28) ( 55 149) ( 56 51) ( 57 49)

( 58 5) ( 59 1) ( 60 4) ( 61 1) ( 62 1)

( 63 7) ( 64 4) ( 65 6) ( 66 7) ( 67 23)

( 68 111) ( 69 147) ( 70 1000) ( 71 61) ( 72 10)

( 73 4) ( 74 7) ( 75 1) ( 76 1) ( 77 6)

( 78 5) ( 79 8) ( 80 6) ( 81 16) ( 82 17)

( 83 24) ( 84 28) ( 85 14) ( 86 282) ( 87 20)

( 88 1) ( 91 11) ( 92 4) ( 93 3) ( 94 8)

( 95 10) ( 96 59) ( 97 34) ( 98 39) ( 99 13)

(105 3) (107 1) (109 6) (110 6) (111 17)

(112 23) (113 8) (115 7) (119 4) (121 2)

(122 2) (123 8) (124 91) (125 104) (126 34)

(127 5) (128 1) (129 3) (131 2) (137 15)

(138 3) (139 60) (140 13) (141 3) (149 7)

(150 2) (151 2) (152 11) (153 37) (154 969)

(155 82) (156 6) (157 16) (165 2) (167 43)

(169 8) (181 3) (195 18) (196 1) (210 2)

NAME:1,3,5,7-Cyclooctatetraene

COMMENT: RI=902.3, 17.0428 min STREPTOMYCETACEAE\_NEW|RI:902.30

RI:902.30

FORM:C8H8

CASNO:629209

RT: 17.043

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 52

( 25 1) ( 26 21) ( 27 52) ( 28 1) ( 36 1)

( 37 27) ( 38 48) ( 39 189) ( 40 7) ( 41 3)

( 43 1) ( 48 2) ( 49 20) ( 50 188) ( 51 325)

( 52 142) ( 53 19) ( 54 3) ( 58 2) ( 60 3)

( 61 18) ( 62 41) ( 63 89) ( 64 13) ( 65 32)

( 66 2) ( 72 1) ( 73 15) ( 74 61) ( 75 45)

( 76 64) ( 77 356) ( 78 818) ( 79 44) ( 80 1)

( 84 1) ( 85 2) ( 86 3) ( 87 6) ( 88 1)

( 89 23) ( 90 1) ( 97 2) ( 98 10) ( 99 2)

(100 1) (101 13) (102 96) (103 628) (104 1000)

(105 79) (106 3)

NAME:1H-Pyrrole, 2-ethyl-

COMMENT: RI=914.9, 18.3372 min STREPTOMYCETACEAE\_NEW|RI:914.90

RI:914.90

FORM:C6H9N

CASNO:1551060

RT: 18.337

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 18

( 38 45) ( 39 69) ( 40 62) ( 50 38) ( 51 45)

( 52 72) ( 53 121) ( 54 28) ( 63 28) ( 64 17)

( 65 34) ( 66 38) ( 67 38) ( 78 38) ( 80 1000)

( 81 69) ( 94 114) ( 95 567)

NAME:3(2H)-Isoxazolone, 4,5-dimethyl-

COMMENT: RI=945.5, 21.4689 min STREPTOMYCETACEAE\_NEW|RI:945.50

RI:945.50

FORM:C5H7NO2

CASNO:930836

RT: 21.469

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 16

( 40 110) ( 41 170) ( 42 1000) ( 43 420) ( 44 50)

( 50 50) ( 51 60) ( 52 90) ( 53 60) ( 54 60)

( 55 50) ( 68 20) ( 70 50) ( 84 20) (113 110)

(114 10)

NAME:Pentanedioic acid, dibutyl ester

COMMENT: RI=1673.3, 39.3794 min STREPTOMYCETACEAE\_NEW|RI:1673.30

RI:1673.30

FORM:C13H24O4

CASNO:6624573

RT: 39.379

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 55

( 41 131) ( 42 70) ( 43 201) ( 44 20) ( 51 20)

( 53 20) ( 55 121) ( 56 90) ( 57 131) ( 58 20)

( 60 20) ( 61 20) ( 67 20) ( 68 30) ( 69 30)

( 70 30) ( 71 30) ( 73 50) ( 74 20) ( 77 20)

( 78 20) ( 81 20) ( 82 20) ( 83 30) ( 84 20)

( 85 161) ( 86 100) ( 87 121) ( 91 20) ( 95 50)

( 97 30) ( 98 30) ( 99 30) (101 90) (109 20)

(111 20) (112 20) (114 80) (115 1000) (116 60)

(117 20) (135 20) (141 20) (142 141) (143 20)

(147 20) (149 20) (155 20) (157 20) (169 20)

(170 60) (171 444) (172 60) (186 20) (189 30)

NAME:2-Dimethylamino-4-methyl-pent-4-enenitrile

COMMENT: RI=889.5, 17.7219 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:889.50

RI:889.50

FORM:C8H14N2

CASNO:94492101

RT: 17.722

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 46

( 26 5) ( 27 35) ( 28 5) ( 29 12) ( 30 8)

( 38 4) ( 39 31) ( 40 11) ( 41 35) ( 42 76)

( 43 11) ( 44 20) ( 45 3) ( 50 3) ( 51 7)

( 52 6) ( 53 12) ( 54 8) ( 55 15) ( 56 23)

( 57 3) ( 58 2) ( 65 4) ( 66 5) ( 67 23)

( 68 8) ( 69 9) ( 70 7) ( 71 5) ( 79 2)

( 80 7) ( 81 15) ( 82 10) ( 83 1000) ( 84 41)

( 94 11) ( 95 7) ( 96 60) ( 97 6) (108 4)

(110 3) (111 34) (112 15) (121 4) (123 4)

(138 8)

NAME:3-Methylpyridazine

COMMENT: RI=892.7, 17.8475 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:892.70

RI:892.70

FORM:C5H6N2

CASNO:1632764

RT: 17.848

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 51

( 12 2) ( 13 3) ( 14 6) ( 15 29) ( 24 2)

( 25 9) ( 26 60) ( 27 47) ( 28 32) ( 29 2)

( 30 1) ( 31 48) ( 32 19) ( 33 7) ( 36 7)

( 37 44) ( 38 89) ( 39 424) ( 40 406) ( 41 35)

( 42 19) ( 43 3) ( 44 2) ( 46 1) ( 48 2)

( 49 8) ( 50 25) ( 51 85) ( 52 46) ( 53 7)

( 54 3) ( 55 1) ( 60 5) ( 61 17) ( 62 27)

( 63 45) ( 64 21) ( 65 394) ( 66 282) ( 67 22)

( 68 2) ( 75 2) ( 76 2) ( 77 5) ( 78 2)

( 79 4) ( 80 1) ( 93 8) ( 94 1000) ( 95 68)

( 96 4)

NAME:Pentanoic acid, 4-methyl-, methyl ester

COMMENT: RI=924.0, 19.0493 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:924.00

RI:924.00

FORM:C7H14O2

CASNO:2412808

RT: 19.049

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 44

( 14 27) ( 15 411) ( 16 19) ( 17 11) ( 18 41)

( 26 34) ( 27 436) ( 28 521) ( 29 412) ( 30 22)

( 31 61) ( 32 48) ( 33 12) ( 39 244) ( 40 42)

( 41 156) ( 42 155) ( 43 1000) ( 44 43) ( 45 72)

( 53 56) ( 54 23) ( 55 456) ( 56 132) ( 57 473)

( 58 28) ( 59 216) ( 69 68) ( 70 60) ( 71 73)

( 73 212) ( 74 992) ( 75 71) ( 81 129) ( 83 102)

( 87 432) ( 88 140) ( 89 21) ( 97 19) ( 99 212)

(100 12) (101 69) (115 33) (130 18)

NAME:2-Butenedioic acid, 2-methyl-, (E)-

COMMENT: RI=956.0, 20.2544 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:956.00

RI:956.00

FORM:C5H6O4

CASNO:498248

RT: 20.254

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 90) ( 38 200) ( 39 1000) ( 40 380) ( 41 300)

( 42 80) ( 43 370) ( 44 40) ( 45 300) ( 53 60)

( 55 60) ( 56 40) ( 57 30) ( 66 30) ( 67 160)

( 68 70) ( 69 100) ( 84 711) ( 85 100) (112 961)

(113 90) (130 5)

NAME:2-Butanone, 3,3-dimethyl-

COMMENT: RI=964.3, 20.5684 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:964.30

RI:964.30

FORM:C6H12O

CASNO:75978

RT: 20.568

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 35

( 14 5) ( 15 43) ( 18 2) ( 26 4) ( 27 49)

( 28 10) ( 29 361) ( 30 7) ( 31 1) ( 37 4)

( 38 9) ( 39 112) ( 40 13) ( 41 557) ( 42 9)

( 43 320) ( 44 6) ( 45 6) ( 49 1) ( 50 8)

( 51 9) ( 52 2) ( 53 8) ( 54 1) ( 55 29)

( 56 40) ( 57 1000) ( 58 43) ( 59 2) ( 63 1)

( 65 1) ( 67 8) ( 85 40) (100 148) (101 10)

NAME:2-Butenedioic acid (E)-, dimethyl ester

COMMENT: RI=1025.1, 22.7693 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:1025.10

RI:1025.10

FORM:C6H8O4

CASNO:624497

RT: 22.769

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 50

( 13 1) ( 14 7) ( 15 305) ( 16 3) ( 25 11)

( 26 146) ( 27 43) ( 28 4) ( 29 64) ( 30 14)

( 31 24) ( 37 2) ( 38 3) ( 39 46) ( 40 2)

( 41 33) ( 42 15) ( 43 2) ( 44 1) ( 45 8)

( 52 3) ( 53 167) ( 54 124) ( 55 33) ( 56 3)

( 57 7) ( 58 1) ( 59 305) ( 60 7) ( 61 1)

( 68 5) ( 69 7) ( 71 2) ( 81 28) ( 82 63)

( 83 4) ( 85 578) ( 86 27) ( 87 4) ( 99 19)

(100 43) (101 4) (112 1) (113 1000) (114 200)

(115 15) (116 2) (144 46) (145 16) (146 1)

NAME:Octanedioic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1446.2, 35.3640 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:1446.20

RI:1446.20

FORM:C10H18O4

CASNO:1732098

RT: 35.364

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 138

( 13 2) ( 14 4) ( 15 170) ( 16 5) ( 17 30)

( 18 90) ( 19 2) ( 26 12) ( 27 160) ( 28 110)

( 29 591) ( 30 30) ( 31 58) ( 32 4) ( 33 12)

( 34 2) ( 35 3) ( 37 8) ( 38 8) ( 39 250)

( 40 64) ( 41 861) ( 42 230) ( 43 621) ( 44 79)

( 45 150) ( 46 8) ( 47 3) ( 50 9) ( 51 12)

( 52 10) ( 53 89) ( 54 74) ( 55 1000) ( 56 180)

( 57 100) ( 58 32) ( 59 721) ( 60 27) ( 61 12)

( 62 6) ( 63 2) ( 65 17) ( 66 12) ( 67 130)

( 68 170) ( 69 931) ( 70 72) ( 71 32) ( 72 22)

( 73 81) ( 74 841) ( 75 45) ( 76 5) ( 77 10)

( 78 4) ( 79 28) ( 80 7) ( 81 75) ( 82 130)

( 83 440) ( 84 92) ( 85 44) ( 86 5) ( 87 330)

( 88 41) ( 89 5) ( 90 2) ( 91 4) ( 92 7)

( 93 27) ( 94 15) ( 95 21) ( 96 30) ( 97 501)

( 98 39) ( 99 24) (100 18) (101 73) (102 10)

(103 3) (104 2) (107 2) (108 2) (109 25)

(110 190) (111 240) (112 24) (113 40) (114 120)

(115 28) (116 15) (117 2) (118 2) (119 2)

(120 4) (121 9) (122 2) (123 2) (124 3)

(125 11) (126 5) (127 30) (128 43) (129 641)

(130 51) (131 5) (136 2) (137 23) (138 561)

(139 150) (140 15) (141 7) (142 120) (143 43)

(144 6) (145 2) (146 2) (152 8) (153 2)

(154 2) (155 4) (156 2) (157 2) (159 2)

(160 13) (161 2) (167 2) (169 3) (170 66)

(171 501) (172 53) (173 6) (174 2) (184 2)

(185 4) (202 30) (203 3)

NAME:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)-, (Z)-

COMMENT: RI=1468.7, 35.9247 min KOHALA\_OLAPA\_590\_180\_1\_JN|RI:1468.70

RI:1468.70

FORM:C10H12O2

CASNO:5912867

RT: 35.925

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 48

( 32 1) ( 41 28) ( 43 48) ( 53 19) ( 55 289)

( 57 19) ( 65 19) ( 69 28) ( 74 19) ( 77 247)

( 78 48) ( 79 69) ( 81 28) ( 82 7) ( 83 7)

( 85 19) ( 87 19) ( 91 169) ( 92 19) ( 93 59)

( 94 7) ( 95 7) (102 7) (103 299) (104 179)

(105 59) (106 7) (107 39) (109 7) (115 19)

(117 7) (119 7) (120 7) (121 209) (122 19)

(131 159) (132 48) (133 159) (134 7) (135 48)

(136 7) (137 59) (147 28) (149 331) (150 28)

(163 28) (164 1000) (165 126)

NAME:N-Isopropyl-4-piperidone

COMMENT: RI=1130.3, 26.2829 min KOHALA\_OLAPA\_L1\_JN|RI:1130.30

RI:1130.30

FORM:C8H15NO

CASNO:5355680

RT: 26.283

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 56

( 15 6) ( 26 4) ( 27 38) ( 28 39) ( 29 9)

( 30 19) ( 34 3) ( 38 1) ( 39 12) ( 40 4)

( 41 43) ( 42 76) ( 43 51) ( 44 19) ( 48 2)

( 51 1) ( 52 1) ( 53 4) ( 54 14) ( 55 43)

( 56 501) ( 57 42) ( 58 4) ( 63 1) ( 67 3)

( 68 9) ( 69 9) ( 70 39) ( 71 17) ( 72 4)

( 78 1) ( 80 1) ( 81 1) ( 82 9) ( 83 2)

( 84 11) ( 85 1) ( 96 4) ( 97 3) ( 98 50)

( 99 4) (106 1) (110 1) (112 2) (113 1)

(123 1) (124 4) (125 2) (126 1000) (127 82)

(128 5) (139 2) (140 15) (141 114) (142 11)

(143 1)

NAME:Naphthalene, 1,2-dihydro-4-methyl-

COMMENT: RI=1292.2, 31.1286 min KOHALA\_OLAPA\_L1\_JN|RI:1292.20

RI:1292.20

FORM:C11H12

CASNO:4373131

RT: 31.129

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 28

( 51 60) ( 52 10) ( 57 40) ( 58 10) ( 63 50)

( 64 60) ( 65 60) ( 70 20) ( 71 70) ( 75 20)

( 77 40) ( 89 20) ( 91 20) (102 20) (115 100)

(116 20) (126 22) (127 110) (128 350) (129 1000)

(130 100) (139 21) (141 70) (142 30) (143 100)

(144 470) (145 56) (146 3)

NAME:4-Hydroxy-2-methylacetophenone

COMMENT: RI=1329.3, 32.1903 min KOHALA\_OLAPA\_L1\_JN|RI:1329.30

RI:1329.30

FORM:C9H10O2

CASNO:875592

RT: 32.190

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 61

( 15 11) ( 18 1) ( 26 6) ( 27 46) ( 28 8)

( 29 12) ( 31 3) ( 32 1) ( 37 5) ( 38 16)

( 39 64) ( 40 7) ( 41 7) ( 42 6) ( 43 87)

( 44 3) ( 50 24) ( 51 63) ( 52 33) ( 53 58)

( 54 5) ( 55 25) ( 60 5) ( 61 8) ( 62 20)

( 63 43) ( 64 9) ( 65 24) ( 66 12) ( 67 18)

( 68 3) ( 74 20) ( 75 8) ( 76 5) ( 77 264)

( 78 51) ( 79 69) ( 80 5) ( 81 8) ( 86 2)

( 87 1) ( 89 8) ( 90 2) ( 91 20) ( 92 1)

( 93 3) (102 1) (103 5) (105 17) (106 10)

(107 295) (108 20) (121 12) (131 1) (134 2)

(135 1000) (136 78) (137 7) (150 345) (151 30)

(152 1)

NAME:Tetradecanoic acid, 10,13-dimethyl-, methyl ester

COMMENT: RI=1986.3, 50.0503 min KOHALA\_OLAPA\_L1\_JN|RI:1986.30

RI:1986.30

FORM:C17H34O2

CASNO:267650237

RT: 50.050

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 16

( 55 370) ( 57 571) ( 74 1000) ( 87 621) (101 70)

(129 130) (143 270) (157 40) (171 40) (185 30)

(199 70) (213 20) (227 60) (255 40) (270 70)

(271 13)

NAME: 1-Dodecene

COMMENT: CONTINENTAL OIL CO., PONCA CITY, OKLA, USA

FORM: C12H24

CASNO: 112-41-4

SOURCE:C:\Documents and Settings\Administrator\My Documents\NIST\_transfer\1-Dodecene.MSP

NUM PEAKS: 81

( 26 24) ( 27 416) ( 28 101) ( 29 544) ( 30 12)

( 32 1) ( 37 4) ( 38 11) ( 39 339) ( 40 45)

( 41 1000) ( 42 282) ( 43 938) ( 44 32) ( 45 1)

( 50 6) ( 51 17) ( 52 11) ( 53 97) ( 54 144)

( 55 809) ( 56 646) ( 57 508) ( 58 22) ( 62 1)

( 63 3) ( 64 1) ( 65 13) ( 66 11) ( 67 111)

( 68 118) ( 69 582) ( 70 564) ( 71 207) ( 72 10)

( 75 2) ( 76 1) ( 77 16) ( 78 5) ( 79 19)

( 80 5) ( 81 47) ( 82 118) ( 83 529) ( 84 402)

( 85 121) ( 86 7) ( 91 5) ( 92 1) ( 93 2)

( 94 1) ( 95 11) ( 96 43) ( 97 368) ( 98 192)

( 99 16) (100 1) (105 1) (109 2) (110 14)

(111 109) (112 68) (113 6) (115 1) (117 1)

(119 1) (123 1) (124 6) (125 37) (126 48)

(127 5) (128 1) (138 2) (139 10) (140 37)

(141 4) (153 1) (166 2) (168 79) (169 10)

(170 1)

NAME:Calamenene (Naphthalene)

COMMENT: RI=1567.3, 37.1166 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:1567.30

RI:1567.30

CASNO:483-77-2

RT:37.117

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 93

( 38 1) ( 39 19) ( 41 13) ( 43 6) ( 45 7)

( 51 1) ( 52 1) ( 53 2) ( 55 13) ( 56 8)

( 57 6) ( 65 4) ( 66 4) ( 67 15) ( 68 4)

( 77 8) ( 78 5) ( 79 19) ( 80 7) ( 81 27)

( 83 3) ( 84 7) ( 91 45) ( 92 3) ( 93 5)

( 95 8) ( 97 8) ( 99 1) (101 2) (102 6)

(103 5) (105 103) (106 10) (107 16) (108 5)

(109 4) (113 3) (115 56) (116 16) (117 73)

(118 11) (119 50) (120 6) (123 2) (124 3)

(125 2) (127 25) (128 103) (129 122) (130 28)

(131 222) (132 30) (133 16) (134 3) (135 2)

(136 2) (139 5) (140 3) (141 32) (142 26)

(143 56) (144 86) (145 41) (146 5) (148 3)

(150 5) (152 8) (153 4) (154 5) (155 7)

(157 58) (158 78) (159 1000) (160 109) (161 93)

(165 2) (175 1) (176 5) (177 2) (179 3)

(181 1) (182 2) (184 1) (189 19) (196 3)

(197 1) (201 5) (202 164) (203 32) (204 52)

(205 6) (207 2) (208 2)

NAME:Phosphonic acid, (p-hydroxyphenyl)-

COMMENT: RI=1004.4, 20.8329 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:1004.40

RI:1004.40

FORM:C6H7O4P

CASNO:33795185

RT: 20.833

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 62

( 15 1) ( 16 1) ( 17 3) ( 18 6) ( 25 2)

( 26 9) ( 27 14) ( 28 3) ( 29 11) ( 31 7)

( 32 2) ( 33 2) ( 36 4) ( 37 28) ( 38 53)

( 39 150) ( 40 62) ( 41 5) ( 42 7) ( 43 4)

( 46 2) ( 47 18) ( 48 2) ( 49 9) ( 50 45)

( 51 36) ( 52 6) ( 53 25) ( 54 4) ( 55 51)

( 56 2) ( 60 5) ( 61 24) ( 62 36) ( 63 63)

( 64 18) ( 65 207) ( 66 321) ( 67 22) ( 68 9)

( 72 1) ( 73 8) ( 74 23) ( 75 10) ( 76 6)

( 77 9) ( 78 1) ( 79 11) ( 80 1) ( 81 9)

( 82 4) ( 92 3) ( 94 1000) ( 95 63) ( 96 3)

( 98 2) (109 1) (110 4) (156 3) (158 4)

(174 14) (175 1)

NAME:N-Butyl-tert-butylamine

COMMENT: RI=1030.5, 21.7249 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:1030.50

RI:1030.50

FORM:C8H19N

CASNO:16486741

RT: 21.725

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 20

( 27 38) ( 29 89) ( 30 342) ( 39 36) ( 41 105)

( 42 67) ( 55 21) ( 56 18) ( 57 123) ( 58 381)

( 59 11) ( 70 22) ( 71 15) ( 72 31) ( 84 8)

( 86 114) (114 1000) (115 99) (129 51) (130 4)

NAME:ç-Selinene

COMMENT: RI=1545.7, 36.5750 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:1545.70

RI:1545.70

FORM:C15H24

CASNO:515-17-3

RT:36.575

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 139

( 27 20) ( 28 65) ( 29 61) ( 30 1) ( 31 1)

( 32 10) ( 39 19) ( 40 6) ( 41 200) ( 42 10)

( 43 87) ( 44 3) ( 45 1) ( 50 2) ( 51 2)

( 52 2) ( 53 59) ( 54 6) ( 55 213) ( 56 12)

( 57 30) ( 58 2) ( 59 2) ( 63 1) ( 64 1)

( 65 24) ( 66 10) ( 67 151) ( 68 21) ( 69 97)

( 70 7) ( 71 8) ( 72 1) ( 73 2) ( 75 2)

( 77 100) ( 78 20) ( 79 205) ( 80 50) ( 81 305)

( 82 35) ( 83 25) ( 84 2) ( 85 2) ( 87 4)

( 88 2) ( 89 1) ( 90 1) ( 91 328) ( 92 67)

( 93 393) ( 94 80) ( 95 209) ( 96 25) ( 97 30)

( 98 3) ( 99 1) (102 1) (103 14) (104 11)

(105 414) (106 79) (107 282) (108 100) (109 215)

(110 23) (111 5) (112 1) (113 2) (114 1)

(115 13) (116 9) (117 44) (118 21) (119 220)

(120 66) (121 132) (122 122) (123 163) (124 18)

(125 3) (126 5) (127 7) (128 7) (129 14)

(130 10) (131 58) (132 16) (133 574) (134 116)

(135 85) (136 50) (137 19) (138 3) (139 2)

(141 3) (142 4) (143 7) (144 6) (145 62)

(146 22) (147 274) (148 71) (149 19) (150 5)

(151 2) (152 1) (153 1) (156 1) (157 8)

(158 2) (159 33) (160 21) (161 423) (162 87)

(163 17) (164 6) (165 3) (173 6) (174 4)

(175 74) (176 44) (177 7) (178 1) (179 3)

(185 1) (187 7) (188 4) (189 1000) (190 153)

(191 12) (193 1) (200 1) (202 9) (203 5)

(204 537) (205 90) (206 8) (207 3)

NAME:Calacorene?

COMMENT: à-Calacorene

CASNO:Calacorene?

RT:38.403

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\LIB\Soil Pyrolysis.MSL

NUM PEAKS: 78

( 39 6) ( 41 22) ( 42 3) ( 43 21) ( 45 4)

( 50 2) ( 51 4) ( 60 4) ( 61 8) ( 62 2)

( 63 17) ( 71 19) ( 73 5) ( 76 3) ( 82 7)

( 84 2) ( 86 7) ( 89 17) ( 92 4) ( 96 3)

( 98 6) (101 7) (102 10) (107 11) (109 19)

(110 10) (113 18) (115 109) (117 19) (118 21)

(119 11) (121 34) (125 15) (126 18) (127 21)

(128 62) (129 201) (130 18) (131 10) (141 302)

(142 683) (143 128) (144 33) (146 9) (149 25)

(152 33) (153 43) (154 85) (155 84) (156 99)

(157 1000) (158 123) (159 18) (160 4) (164 23)

(167 30) (169 202) (170 9) (171 8) (173 9)

(178 16) (179 13) (182 66) (183 26) (184 151)

(185 31) (186 10) (190 9) (191 10) (193 13)

(196 4) (200 362) (201 85) (203 4) (207 14)

(208 4) (222 2) (268 3)

NAME:Benzoic acid, 4-hydroxy-3,5-dimethoxy-, hydrazide

COMMENT: RI=1734.7, 40.9447 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:1734.70

RI:1734.70

FORM:C9H12N2O4

CASNO:1443-76-1

RT:40.945

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 92

( 14 4) ( 15 88) ( 27 13) ( 28 17) ( 29 34)

( 31 19) ( 32 6) ( 37 10) ( 38 45) ( 39 85)

( 40 7) ( 41 17) ( 43 18) ( 45 11) ( 49 11)

( 50 62) ( 51 51) ( 52 25) ( 53 90) ( 54 14)

( 55 16) ( 57 5) ( 59 67) ( 61 7) ( 62 18)

( 63 14) ( 65 77) ( 66 73) ( 67 92) ( 68 21)

( 69 47) ( 71 6) ( 77 49) ( 78 44) ( 79 59)

( 80 19) ( 81 33) ( 82 28) ( 83 9) ( 85 23)

( 90 6) ( 91 8) ( 92 9) ( 93 53) ( 94 14)

( 95 54) ( 96 10) ( 97 13) ( 98 10) (106 21)

(107 35) (108 55) (109 65) (110 40) (111 26)

(112 4) (120 7) (121 9) (122 30) (123 79)

(124 19) (125 28) (126 39) (134 8) (135 39)

(136 29) (137 58) (138 52) (139 28) (141 121)

(142 10) (149 4) (150 11) (151 78) (152 17)

(153 127) (154 45) (155 14) (165 35) (166 17)

(167 14) (168 6) (169 24) (179 12) (181 1000)

(182 112) (183 16) (197 121) (198 15) (212 998)

(213 103) (214 17)

NAME:2,4,6-Trimethoxyacetophenone

COMMENT: RI=2203.4, 49.7627 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:2203.40

RI:2203.40

FORM:C11H14O4

CASNO:832586

RT: 49.763

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 140

( 26 4) ( 27 18) ( 28 9) ( 29 12) ( 30 3)

( 31 4) ( 33 1) ( 36 1) ( 37 3) ( 38 14)

( 39 38) ( 40 5) ( 41 16) ( 42 8) ( 43 101)

( 44 12) ( 45 6) ( 46 1) ( 47 1) ( 49 2)

( 50 19) ( 51 31) ( 52 15) ( 53 37) ( 54 6)

( 55 13) ( 56 3) ( 57 6) ( 58 1) ( 59 34)

( 60 2) ( 61 5) ( 62 17) ( 63 29) ( 64 15)

( 65 21) ( 66 28) ( 67 10) ( 68 5) ( 69 55)

( 70 4) ( 71 3) ( 72 1) ( 73 2) ( 74 4)

( 75 9) ( 76 6) ( 77 35) ( 78 19) ( 79 29)

( 80 9) ( 81 18) ( 82 4) ( 83 9) ( 84 3)

( 85 3) ( 86 3) ( 87 2) ( 88 1) ( 89 1)

( 90 5) ( 91 6) ( 92 17) ( 93 15) ( 94 17)

( 95 11) ( 96 16) ( 97 11) ( 98 4) ( 99 3)

(100 1) (101 1) (102 1) (103 2) (104 2)

(105 8) (106 12) (107 20) (108 10) (109 32)

(110 5) (112 1) (113 1) (115 1) (116 1)

(117 1) (118 2) (119 3) (120 3) (121 15)

(122 26) (123 10) (124 7) (125 7) (126 2)

(127 2) (131 2) (133 4) (134 3) (135 19)

(136 10) (137 81) (138 12) (139 19) (140 2)

(141 3) (147 3) (148 2) (149 9) (150 15)

(151 20) (152 74) (153 10) (154 4) (155 2)

(161 2) (162 2) (163 8) (164 9) (165 25)

(166 8) (167 14) (168 14) (169 10) (170 2)

(177 2) (178 2) (179 9) (180 115) (181 23)

(182 6) (183 3) (195 1000) (196 115) (197 17)

(198 2) (209 21) (210 217) (211 32) (212 4)

NAME:4-Hexanoylbiphenyl

COMMENT: RI=2316.5, 51.6139 min JN\_KOHALA\_OHIA2\_LIVE|RI:2316.50

RI:2316.50

FORM:C18H20O

CASNO:59662269

RT: 51.614

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy2.MSL

NUM PEAKS: 115

( 15 1) ( 26 2) ( 27 34) ( 28 6) ( 29 32)

( 38 1) ( 39 21) ( 40 3) ( 41 40) ( 42 6)

( 43 30) ( 44 1) ( 50 8) ( 51 19) ( 52 4)

( 53 4) ( 55 27) ( 56 7) ( 57 1) ( 62 3)

( 63 13) ( 64 1) ( 65 3) ( 69 2) ( 71 2)

( 74 8) ( 75 14) ( 76 35) ( 77 27) ( 78 4)

( 86 2) ( 87 5) ( 88 2) ( 89 5) ( 90 8)

( 91 4) ( 98 3) ( 99 4) (100 2) (101 9)

(102 16) (103 4) (111 1) (113 3) (114 1)

(115 10) (116 1) (125 4) (126 23) (127 39)

(128 9) (129 1) (133 1) (139 3) (141 2)

(149 1) (150 21) (151 95) (152 405) (153 270)

(154 63) (155 8) (163 2) (164 2) (165 20)

(166 7) (167 24) (168 5) (175 3) (176 3)

(177 3) (178 10) (179 7) (180 6) (181 1000)

(182 143) (183 13) (184 1) (189 3) (190 1)

(191 7) (192 2) (193 3) (194 2) (195 2)

(196 952) (197 147) (198 12) (202 2) (203 2)

(204 2) (205 6) (206 2) (207 1) (208 2)

(209 67) (210 12) (211 1) (217 1) (219 2)

(221 1) (223 5) (224 4) (230 3) (232 2)

(233 1) (234 6) (235 1) (236 2) (237 1)

(250 2) (251 8) (252 270) (253 56) (254 6)

NAME: Acetic anhydride

FORM: C4H6O3

CASNO: 108-24-7

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Acetic anhydride.MSP

NUM PEAKS: 31

( 12 2) ( 13 7) ( 14 34) ( 15 123) ( 16 3)

( 18 1) ( 24 1) ( 25 1) ( 26 2) ( 27 1)

( 28 10) ( 29 11) ( 30 1) ( 31 1) ( 32 1)

( 36 1) ( 40 2) ( 41 12) ( 42 59) ( 43 1000)

( 44 26) ( 45 37) ( 46 1) ( 55 1) ( 56 1)

( 57 1) ( 60 25) ( 61 1) ( 87 3) (101 1)

(102 1)

NAME: Hex-2-yn-4-one, 2-methyl-

COMMENT: ASES Database, Dalian Institute, P.R. China

FORM: C7H10O

CASNO: 52066-33-8

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Hex-2-yn-4-one, 2-methyl-.MSP

NUM PEAKS: 13

( 37 20) ( 38 29) ( 39 148) ( 40 29) ( 41 109)

( 42 20) ( 43 69) ( 66 20) ( 67 1000) ( 68 49)

( 82 59) ( 95 59) (110 19)

NAME: Cyclopropanecarboxaldehyde, methylene-

COMMENT: Chemical Concepts

FORM: C5H6O

CASNO: 142423-24-3

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Cyclopropanecarboxaldehyde, methylene-.MSP

NUM PEAKS: 42

( 24 1) ( 26 92) ( 27 717) ( 28 102) ( 29 95)

( 30 2) ( 31 6) ( 35 1) ( 36 8) ( 37 47)

( 38 74) ( 39 489) ( 40 29) ( 41 4) ( 42 23)

( 43 8) ( 44 1) ( 48 6) ( 49 36) ( 50 147)

( 51 179) ( 52 60) ( 53 495) ( 54 445) ( 55 76)

( 56 17) ( 57 1) ( 60 2) ( 61 7) ( 62 6)

( 63 11) ( 64 2) ( 65 1) ( 66 1) ( 67 4)

( 68 1) ( 77 1) ( 79 1) ( 80 1) ( 81 1000)

( 82 64) ( 83 4)

NAME: Hydrazine, propyl-

COMMENT: ATLAS OF MASS SPECTRA OF ORGANIC COMPOUNDS, V. A. KOPTYUG, ED.

FORM: C3H10N2

CASNO: 5039-61-2

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Hydrazine, propyl-.MSP

NUM PEAKS: 19

( 29 108) ( 30 77) ( 31 145) ( 32 25) ( 39 72)

( 40 17) ( 41 145) ( 42 62) ( 43 113) ( 44 34)

( 45 1000) ( 46 25) ( 56 29) ( 57 13) ( 58 6)

( 59 19) ( 73 16) ( 74 264) ( 75 46)

NAME: Pyridine, 3-methyl-

COMMENT: Chemical Concepts

FORM: C6H7N

CASNO: 108-99-6

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Pyridine, 3-methyl-.MSP

NUM PEAKS: 25

( 26 20) ( 27 30) ( 28 29) ( 37 56) ( 38 88)

( 39 280) ( 40 128) ( 41 20) ( 50 37) ( 51 64)

( 52 20) ( 53 24) ( 54 25) ( 61 28) ( 62 36)

( 63 84) ( 64 32) ( 65 224) ( 66 368) ( 67 80)

( 78 48) ( 91 17) ( 92 288) ( 93 1000) ( 94 80)

NAME:.alpha.-Cubebene

COMMENT: N.W. DAVIES, UNIVERSITY OF TASMANIA, TASMANIA, AUSTRALIA

FORM:C15H24

CASNO:17699-14-8

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\à-Cubebene.MSP

NUM PEAKS: 66

( 27 111) ( 29 43) ( 39 111) ( 40 18) ( 41 336)

( 42 28) ( 43 19) ( 44 38) ( 51 32) ( 52 13)

( 53 80) ( 55 234) ( 56 64) ( 57 26) ( 63 15)

( 65 63) ( 66 13) ( 67 70) ( 69 145) ( 70 30)

( 73 10) ( 77 131) ( 78 42) ( 79 112) ( 80 42)

( 81 320) ( 82 27) ( 83 12) ( 91 292) ( 92 188)

( 93 259) ( 94 39) ( 95 45) (103 34) (104 25)

(105 977) (106 113) (107 144) (108 52) (109 16)

(115 48) (116 20) (117 64) (118 42) (119 934)

(120 286) (121 49) (122 15) (127 13) (128 27)

(129 26) (130 12) (131 39) (132 15) (133 83)

(134 29) (145 22) (146 11) (147 42) (148 11)

(159 32) (161 1000) (162 136) (189 17) (204 204)

(205 35)

NAME: 2,3-Butanedione

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW- 883

FORM: C4H6O2

CASNO: 431-03-8

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\2,3-Butanedione.MSP

NUM PEAKS: 40

( 12 1) ( 13 7) ( 14 29) ( 15 139) ( 16 1)

( 17 1) ( 18 7) ( 25 4) ( 26 9) ( 27 9)

( 28 22) ( 29 10) ( 31 1) ( 32 1) ( 36 2)

( 37 5) ( 38 3) ( 39 7) ( 40 2) ( 41 12)

( 42 61) ( 43 1000) ( 44 23) ( 45 3) ( 49 3)

( 50 5) ( 51 2) ( 52 1) ( 53 4) ( 54 2)

( 55 2) ( 56 5) ( 57 6) ( 69 5) ( 70 1)

( 71 2) ( 84 2) ( 85 1) ( 86 154) ( 87 9)

NAME: 3-Furaldehyde

COMMENT: Chuck Anderson, Aldrich Chemical Co.

FORM: C5H4O2

CASNO: 498-60-2

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\3-Furaldehyde.MSP

NUM PEAKS: 26

( 14 4) ( 25 8) ( 26 11) ( 28 6) ( 29 117)

( 36 11) ( 37 74) ( 38 123) ( 39 419) ( 40 29)

( 41 12) ( 42 13) ( 48 10) ( 49 15) ( 50 28)

( 51 13) ( 53 15) ( 55 9) ( 66 16) ( 67 120)

( 68 14) ( 69 5) ( 95 1000) ( 96 908) ( 97 64)

( 98 5)

NAME: Dimethyl ethylidenemalonate

COMMENT: Chuck Anderson, Aldrich Chemical Co.

FORM: C7H10O4

CASNO: 17041-60-0

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Dimethyl ethylidenemalonate.MSP

NUM PEAKS: 67

( 14 3) ( 15 222) ( 16 4) ( 17 1) ( 25 3)

( 26 14) ( 27 96) ( 28 42) ( 29 220) ( 30 16)

( 31 23) ( 32 3) ( 33 2) ( 36 2) ( 37 22)

( 38 49) ( 39 193) ( 40 79) ( 41 31) ( 42 14)

( 43 16) ( 44 4) ( 45 15) ( 47 1) ( 50 3)

( 51 4) ( 52 3) ( 53 138) ( 54 11) ( 55 34)

( 56 11) ( 57 3) ( 58 2) ( 59 470) ( 60 13)

( 61 2) ( 65 2) ( 66 14) ( 67 68) ( 68 386)

( 69 60) ( 70 9) ( 71 7) ( 75 9) ( 81 2)

( 82 2) ( 83 16) ( 84 6) ( 85 17) ( 95 420)

( 96 28) ( 97 15) ( 98 258) ( 99 50) (100 5)

(101 2) (110 1) (111 3) (113 2) (125 2)

(126 1000) (127 689) (128 51) (129 7) (143 5)

(158 18) (159 1)

NAME: 5-tert-Butylpyrogallol

COMMENT: Japan AIST/NIMC Database- Spectrum MS-NW-2008

FORM: C10H14O3

CASNO: 20481-17-8

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\5-tert-Butylpyrogallol.MSP

NUM PEAKS: 115

( 14 1) ( 15 6) ( 17 2) ( 18 7) ( 26 2)

( 27 17) ( 28 11) ( 29 14) ( 31 1) ( 32 1)

( 37 2) ( 38 7) ( 39 43) ( 40 7) ( 41 64)

( 42 3) ( 43 26) ( 44 2) ( 45 2) ( 46 1)

( 47 1) ( 50 9) ( 51 27) ( 52 12) ( 53 21)

( 54 3) ( 55 21) ( 56 2) ( 57 4) ( 59 4)

( 60 1) ( 61 1) ( 62 3) ( 63 8) ( 64 4)

( 65 20) ( 66 7) ( 67 9) ( 68 3) ( 69 9)

( 71 3) ( 74 2) ( 75 3) ( 76 5) ( 77 34)

( 78 9) ( 79 13) ( 80 5) ( 81 13) ( 82 2)

( 83 9) ( 84 1) ( 89 3) ( 90 2) ( 91 31)

( 92 6) ( 93 16) ( 94 4) ( 95 8) ( 96 1)

( 97 3) (102 1) (103 15) (104 2) (105 9)

(106 2) (107 8) (108 4) (109 29) (110 7)

(111 3) (115 1) (117 2) (118 1) (119 4)

(120 4) (121 67) (122 6) (123 19) (124 6)

(125 3) (126 22) (127 42) (128 3) (131 3)

(133 3) (134 2) (135 11) (136 1) (137 6)

(138 7) (139 110) (140 9) (141 7) (147 2)

(148 1) (149 35) (150 4) (151 9) (152 9)

(153 8) (154 1) (163 8) (164 1) (165 2)

(166 12) (167 1000) (168 99) (169 9) (179 1)

(180 2) (181 7) (182 374) (183 40) (184 4)

NAME: 5-(Acetylaminomethyl)-4-amino-2-methylpyrimidine

COMMENT: R.F. EVANS, DEP. CHEM., QUEENSLAND UNIV., ST. LUCIA, AUST.

FORM: C8H12N4O

CASNO: 23676-63-3

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\5-(Acetylaminomethyl)-4-amino-2-methylpyrimidine.MSP

NUM PEAKS: 16

( 42 150) ( 43 150) ( 52 40) ( 53 50) ( 54 50)

( 69 40) ( 80 70) ( 81 70) ( 96 200) (116 30)

(120 30) (122 150) (137 1000) (138 90) (180 450)

(181 70)

NAME: Benzenamide, N-cyano-3,4,5-trimethoxy-

COMMENT: Div. of Experiment Therapeutics WRAIR, WRAMC, Washington DC 20307

FORM: C10H12N2O3

CASNO: 55305-77-6

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\added compounds\Benzenamide, N-cyano-3,4,5-trimethoxy-.MSP

NUM PEAKS: 108

( 41 19) ( 42 26) ( 43 27) ( 44 3) ( 45 12)

( 47 9) ( 49 49) ( 50 41) ( 51 48) ( 52 67)

( 53 134) ( 54 21) ( 55 23) ( 56 8) ( 57 10)

( 58 11) ( 59 5) ( 61 7) ( 62 16) ( 63 35)

( 64 51) ( 65 81) ( 66 68) ( 67 67) ( 68 83)

( 69 101) ( 70 3) ( 71 2) ( 73 1) ( 75 17)

( 77 87) ( 79 128) ( 80 35) ( 81 15) ( 82 15)

( 83 15) ( 84 20) ( 86 22) ( 88 5) ( 90 31)

( 91 18) ( 93 143) ( 94 37) ( 95 19) ( 96 8)

( 97 12) ( 98 1) ( 99 1) (102 1) (103 1)

(104 24) (105 37) (106 23) (107 16) (108 15)

(109 17) (110 6) (111 2) (112 1) (116 2)

(117 9) (118 3) (119 13) (120 22) (121 16)

(122 70) (123 3) (124 31) (125 6) (133 103)

(135 140) (136 16) (137 5) (138 16) (140 18)

(141 1) (145 3) (147 13) (148 48) (150 148)

(151 11) (152 5) (155 9) (161 1) (162 20)

(163 8) (165 427) (166 31) (167 2) (168 10)

(174 1) (175 3) (177 8) (178 26) (179 3)

(182 15) (183 2) (191 6) (192 16) (193 991)

(194 88) (195 9) (206 1) (207 48) (208 1000)

(209 124) (210 11) (211 3)

NAME:1,3,5-Cyclooctatriene

COMMENT: RI=913.8, 17.4570 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:913.80

RI:913.80

FORM:C8H10

CASNO:1871529

RT: 17.457

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 61

( 25 2) ( 26 21) ( 27 165) ( 29 4) ( 33 2)

( 34 2) ( 35 2) ( 37 13) ( 38 33) ( 39 274)

( 40 28) ( 41 71) ( 42 2) ( 43 6) ( 46 1)

( 47 1) ( 48 2) ( 49 11) ( 50 89) ( 51 194)

( 52 109) ( 53 48) ( 54 12) ( 55 3) ( 57 4)

( 58 2) ( 59 2) ( 60 1) ( 61 8) ( 62 16)

( 63 53) ( 64 8) ( 65 125) ( 66 32) ( 67 11)

( 72 1) ( 73 4) ( 74 19) ( 75 20) ( 76 21)

( 77 229) ( 78 1000) ( 79 267) ( 80 18) ( 81 2)

( 86 1) ( 87 2) ( 89 10) ( 90 4) ( 91 471)

( 92 39) ( 93 1) ( 94 1) ( 98 2) (101 4)

(102 11) (103 61) (104 23) (105 158) (106 212)

(107 18)

NAME:Mequinol

COMMENT: RI=1115.6, 24.5833 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1115.60

RI:1115.60

FORM:C7H8O2

CASNO:150765

RT: 24.583

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 63

( 14 1) ( 15 13) ( 25 2) ( 26 22) ( 27 45)

( 29 20) ( 30 3) ( 31 3) ( 36 1) ( 37 12)

( 38 28) ( 39 83) ( 40 6) ( 41 21) ( 42 6)

( 43 4) ( 45 1) ( 47 2) ( 49 7) ( 50 42)

( 51 63) ( 52 73) ( 53 251) ( 54 61) ( 55 47)

( 56 2) ( 60 3) ( 61 20) ( 62 41) ( 63 65)

( 64 21) ( 65 69) ( 66 17) ( 67 7) ( 68 1)

( 69 6) ( 73 3) ( 74 11) ( 75 5) ( 76 2)

( 77 7) ( 78 1) ( 79 12) ( 80 18) ( 81 562)

( 82 43) ( 83 2) ( 91 1) ( 92 4) ( 93 15)

( 94 9) ( 95 29) ( 96 2) (107 1) (108 9)

(109 1000) (110 72) (111 7) (121 1) (123 22)

(124 850) (125 70) (126 6)

NAME:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-

COMMENT: RI=1411.9, 33.2234 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1411.90

RI:1411.90

FORM:C15H24

CASNO:16728997

RT: 33.223

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 108

( 26 5) ( 27 238) ( 29 155) ( 30 7) ( 34 6)

( 38 10) ( 39 229) ( 40 3) ( 41 623) ( 42 55)

( 43 135) ( 44 2) ( 45 9) ( 50 6) ( 51 62)

( 52 29) ( 53 100) ( 54 11) ( 55 312) ( 56 162)

( 57 61) ( 58 2) ( 59 6) ( 63 28) ( 64 11)

( 65 75) ( 66 15) ( 67 46) ( 68 13) ( 69 170)

( 70 53) ( 71 11) ( 73 8) ( 74 4) ( 75 8)

( 76 8) ( 77 167) ( 78 50) ( 79 109) ( 80 30)

( 81 94) ( 82 22) ( 83 21) ( 84 9) ( 85 3)

( 87 10) ( 88 8) ( 89 18) ( 90 11) ( 91 384)

( 92 265) ( 93 224) ( 94 29) ( 95 11) ( 97 18)

( 98 3) (101 5) (102 11) (103 71) (104 40)

(105 997) (106 102) (107 33) (108 7) (109 11)

(110 4) (114 5) (115 77) (116 29) (117 92)

(118 54) (119 1000) (120 241) (121 232) (122 51)

(123 4) (127 23) (128 61) (129 55) (130 22)

(131 58) (132 36) (133 87) (134 53) (135 10)

(136 5) (141 17) (142 10) (143 24) (144 18)

(145 37) (146 11) (147 56) (148 20) (149 3)

(152 3) (157 12) (159 118) (160 30) (161 449)

(162 60) (173 7) (187 5) (189 15) (202 12)

(203 3) (204 165) (205 22)

NAME:2H-1-Benzopyran-3,4-diol, 2-(3,4-dimethoxyphenyl)-3,4-dihydro-6-methyl-, (2à,3à,4à)-

COMMENT: RI=1604.8, 38.0432 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1604.80

RI:1604.80

FORM:C18H20O5

CASNO:55125218

RT: 38.043

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 15

(119 30) (121 30) (135 60) (137 80) (149 30)

(151 130) (152 30) (165 190) (166 30) (180 1000)

(181 130) (182 20) (270 20) (298 4) (316 50)

NAME:Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-

COMMENT: RI=1622.4, 38.4380 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1622.40

RI:1622.40

FORM:C13H14

CASNO:2245387

RT: 38.438

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 125

( 12 1) ( 13 1) ( 14 4) ( 15 43) ( 16 1)

( 25 1) ( 26 9) ( 27 73) ( 28 16) ( 29 4)

( 33 1) ( 37 3) ( 38 11) ( 39 70) ( 40 7)

( 41 15) ( 42 1) ( 43 1) ( 44 1) ( 49 1)

( 50 30) ( 51 66) ( 52 14) ( 53 11) ( 54 1)

( 55 2) ( 56 2) ( 57 4) ( 58 6) ( 61 4)

( 62 22) ( 63 66) ( 64 39) ( 65 19) ( 66 2)

( 67 1) ( 68 2) ( 69 9) ( 70 18) ( 71 30)

( 73 2) ( 74 21) ( 75 32) ( 76 75) ( 77 68)

( 78 11) ( 79 2) ( 80 2) ( 82 39) ( 83 45)

( 84 50) ( 85 53) ( 86 10) ( 87 15) ( 88 6)

( 89 18) ( 90 3) ( 91 11) ( 92 1) ( 93 1)

( 97 1) ( 98 9) ( 99 6) (100 3) (101 7)

(102 15) (103 7) (104 1) (105 2) (109 1)

(110 3) (111 3) (112 1) (113 8) (114 6)

(115 83) (116 12) (117 2) (118 1) (119 1)

(121 1) (122 2) (123 1) (124 1) (125 3)

(126 15) (127 44) (128 101) (129 44) (130 6)

(131 1) (133 1) (134 1) (135 1) (136 1)

(137 2) (138 4) (139 45) (140 16) (141 62)

(142 35) (143 18) (149 5) (150 11) (151 36)

(152 128) (153 142) (154 66) (155 610) (156 82)

(157 6) (158 2) (161 2) (162 2) (163 9)

(164 8) (165 41) (166 14) (167 25) (168 21)

(169 181) (170 1000) (171 142) (172 9) (173 1)

NAME:Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-

COMMENT: RI=1621.7, 38.4211 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1621.70

RI:1621.70

FORM:C13H14

CASNO:829265

RT: 38.421

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 82

( 37 13) ( 38 3) ( 39 9) ( 41 1) ( 48 11)

( 50 8) ( 51 20) ( 52 3) ( 53 3) ( 55 2)

( 57 18) ( 58 9) ( 62 7) ( 63 30) ( 64 20)

( 65 8) ( 69 6) ( 70 23) ( 71 32) ( 74 8)

( 75 17) ( 76 62) ( 77 47) ( 78 26) ( 80 1)

( 81 9) ( 82 30) ( 83 60) ( 84 74) ( 85 72)

( 86 6) ( 87 2) ( 88 1) ( 89 11) ( 90 1)

( 91 6) ( 97 2) ( 98 3) (100 1) (101 6)

(102 9) (103 3) (106 12) (112 3) (113 10)

(114 3) (115 81) (116 10) (122 12) (125 4)

(126 9) (127 44) (128 98) (129 49) (130 6)

(134 11) (137 1) (138 2) (139 35) (140 9)

(141 47) (142 15) (143 6) (145 11) (149 2)

(150 9) (151 31) (152 135) (153 178) (154 103)

(155 860) (156 106) (157 7) (163 16) (164 19)

(165 37) (166 24) (167 33) (169 190) (170 1000)

(171 145) (172 8)

NAME:3-(3,4-Dimethoxyphenyl)-propionic acid

COMMENT: RI=1661.6, 39.3129 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1661.60

RI:1661.60

FORM:C11H14O4

CASNO:2107-70-2

RT:39.313

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 100

( 14 6) ( 15 42) ( 18 2) ( 26 5) ( 27 24)

( 28 36) ( 29 16) ( 30 2) ( 31 8) ( 32 7)

( 38 13) ( 39 72) ( 40 6) ( 41 16) ( 42 8)

( 43 9) ( 45 61) ( 46 3) ( 50 28) ( 51 85)

( 52 34) ( 53 46) ( 54 5) ( 55 39) ( 57 3)

( 59 3) ( 60 3) ( 61 4) ( 62 14) ( 63 36)

( 64 16) ( 65 75) ( 66 15) ( 67 11) ( 68 2)

( 69 5) ( 73 3) ( 74 7) ( 75 9) ( 76 17)

( 77 145) ( 78 78) ( 79 84) ( 80 14) ( 81 7)

( 82 7) ( 84 2) ( 87 2) ( 89 30) ( 90 27)

( 91 111) ( 92 19) ( 93 20) ( 94 8) ( 95 11)

( 96 4) ( 97 5) (102 7) (103 32) (104 10)

(105 56) (106 44) (107 123) (108 40) (109 8)

(117 3) (118 11) (119 25) (120 14) (121 70)

(122 16) (123 4) (124 2) (125 6) (131 2)

(132 1) (133 7) (134 13) (135 38) (136 11)

(137 13) (138 5) (139 5) (147 2) (149 89)

(151 1000) (152 101) (153 14) (163 2) (164 20)

(165 17) (166 2) (167 5) (179 2) (193 2)

(194 2) (195 11) (210 299) (211 37) (212 5)

NAME:Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-(2-propenyl)-

COMMENT: RI=1686.6, 39.8693 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1686.60

RI:1686.60

FORM:C12H16O3

CASNO:487116

RT: 39.869

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 134

( 26 1) ( 27 21) ( 28 5) ( 29 9) ( 31 2)

( 37 1) ( 38 8) ( 39 49) ( 40 6) ( 41 52)

( 42 4) ( 43 29) ( 44 1) ( 45 8) ( 50 10)

( 51 28) ( 52 18) ( 53 31) ( 54 8) ( 55 19)

( 56 2) ( 57 15) ( 58 1) ( 59 5) ( 61 1)

( 62 5) ( 63 16) ( 64 8) ( 65 38) ( 66 13)

( 67 16) ( 68 6) ( 69 17) ( 70 1) ( 71 12)

( 72 1) ( 74 3) ( 75 7) ( 76 7) ( 77 80)

( 78 29) ( 79 81) ( 80 10) ( 81 14) ( 82 33)

( 83 8) ( 84 1) ( 85 2) ( 86 4) ( 87 1)

( 88 1) ( 89 13) ( 90 12) ( 91 93) ( 92 17)

( 93 23) ( 94 8) ( 95 28) ( 96 16) ( 97 6)

( 98 2) ( 99 1) (100 1) (101 1) (102 6)

(103 35) (104 20) (105 63) (106 23) (107 44)

(108 13) (109 22) (110 26) (111 11) (113 1)

(115 22) (116 7) (117 10) (118 50) (119 31)

(120 20) (121 32) (122 26) (123 9) (124 20)

(125 4) (127 1) (130 1) (131 13) (132 8)

(133 84) (134 38) (135 56) (136 13) (137 18)

(138 9) (139 5) (140 1) (141 1) (142 1)

(145 4) (146 14) (147 19) (148 22) (149 17)

(150 63) (151 25) (152 8) (153 1) (154 3)

(161 21) (162 14) (163 19) (164 3) (165 85)

(166 11) (167 2) (175 3) (176 10) (177 69)

(178 42) (179 14) (181 26) (182 3) (191 5)

(192 10) (193 570) (194 62) (195 7) (207 4)

(208 1000) (209 137) (210 10) (211 1)

NAME:Isoelemicin (1,2,3-Trimethoxy-5-[(1E)-1-propenyl]benzene ) S8

COMMENT: RI=1686.8, 39.8744 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1686.80

RI:1686.80

FORM:C12H16O3

CASNO:487-12-7

RT:39.874

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 127

( 27 6) ( 29 18) ( 31 4) ( 33 1) ( 36 3)

( 38 9) ( 39 64) ( 40 3) ( 41 36) ( 42 6)

( 43 27) ( 44 1) ( 45 13) ( 46 5) ( 50 17)

( 51 38) ( 52 21) ( 53 45) ( 54 4) ( 55 25)

( 57 11) ( 59 7) ( 60 6) ( 61 4) ( 62 7)

( 63 22) ( 64 11) ( 65 43) ( 66 18) ( 67 18)

( 69 27) ( 71 5) ( 72 2) ( 73 6) ( 75 7)

( 76 7) ( 77 89) ( 78 47) ( 79 102) ( 80 9)

( 81 24) ( 82 1) ( 83 2) ( 84 1) ( 88 5)

( 89 18) ( 90 9) ( 91 61) ( 92 16) ( 93 19)

( 94 7) ( 95 11) ( 96 5) ( 97 9) ( 99 2)

(102 7) (103 33) (104 42) (105 67) (106 24)

(107 40) (108 4) (109 12) (110 4) (111 3)

(115 16) (116 9) (117 7) (118 24) (119 29)

(120 18) (121 28) (122 17) (123 6) (124 8)

(125 1) (127 1) (128 3) (129 6) (131 11)

(132 14) (133 65) (134 30) (135 53) (136 6)

(137 16) (138 1) (141 1) (145 9) (146 8)

(147 11) (148 30) (149 21) (150 48) (151 10)

(157 4) (159 9) (160 1) (161 18) (162 12)

(163 9) (164 3) (165 65) (166 6) (167 2)

(173 1) (175 2) (176 18) (177 25) (178 14)

(179 2) (191 5) (192 25) (193 694) (194 89)

(195 12) (196 2) (200 2) (202 5) (204 2)

(205 1) (206 2) (207 7) (208 1000) (209 156)

(210 18) (211 1)

NAME:Methyl benzoate, 2-carboxylic acid-3,4-dimethoxy-

COMMENT: RI=1804.8, 42.4979 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:1804.80

RI:1804.80

FORM:C11H12O6

CASNO:EPA-116070

RT: 42.498

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 158

( 41 46) ( 42 15) ( 43 54) ( 44 56) ( 45 431)

( 46 11) ( 47 8) ( 49 56) ( 50 175) ( 51 226)

( 52 53) ( 53 179) ( 54 21) ( 55 53) ( 56 12)

( 57 20) ( 59 92) ( 60 16) ( 61 39) ( 62 75)

( 63 99) ( 64 51) ( 65 237) ( 66 69) ( 67 51)

( 68 15) ( 69 63) ( 70 7) ( 71 14) ( 73 20)

( 74 41) ( 75 68) ( 76 102) ( 77 231) ( 78 163)

( 79 201) ( 80 31) ( 81 33) ( 82 18) ( 83 15)

( 84 17) ( 85 8) ( 86 8) ( 87 3) ( 88 20)

( 89 5) ( 90 33) ( 91 45) ( 92 76) ( 93 55)

( 94 39) ( 95 60) ( 96 15) ( 97 12) ( 98 8)

( 99 4) (101 3) (103 77) (104 71) (105 56)

(106 91) (107 81) (108 39) (109 34) (110 11)

(111 8) (112 1) (113 3) (114 1) (115 3)

(116 1) (117 4) (118 35) (119 82) (120 74)

(121 85) (122 113) (123 84) (124 19) (125 29)

(126 4) (127 2) (128 1) (129 3) (131 1)

(132 34) (133 51) (134 50) (135 215) (136 84)

(137 164) (138 44) (139 12) (140 1) (141 4)

(142 1) (143 1) (145 1) (146 3) (147 19)

(148 142) (149 88) (150 54) (151 58) (152 36)

(153 14) (154 3) (155 1) (157 1) (160 2)

(161 7) (162 42) (163 134) (164 150) (165 206)

(166 64) (167 16) (168 3) (169 9) (170 1)

(171 1) (175 6) (176 24) (177 69) (178 16)

(179 87) (180 23) (181 16) (182 7) (183 2)

(185 1) (189 1) (190 12) (191 644) (192 71)

(193 69) (194 10) (195 18) (196 6) (197 12)

(198 1) (202 1) (205 2) (207 65) (208 56)

(209 1000) (210 106) (211 15) (212 1) (221 3)

(223 39) (224 4) (225 10) (226 1) (240 690)

(241 79) (242 12) (243 1)

NAME:1-Aminoanthraquinone-2-carboxaldehyde

COMMENT: RI=2000.8, 46.4485 min JN\_KOHALA\_OHIA1\_LITTER|RI:2000.80

RI:2000.80

FORM:C15H9NO3

CASNO:6363877

RT: 46.449

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 20

( 63 51) ( 75 44) ( 76 52) ( 77 43) (139 190)

(150 55) (166 108) (167 231) (168 121) (194 60)

(195 158) (196 58) (205 33) (222 86) (223 1000)

(224 166) (225 16) (251 652) (252 110) (253 17)

NAME:4-Nitro-N-(2-oxo-2-piperidinoethyl)pyrazole-3-carboxamide

COMMENT: RI=1024.3, 21.5110 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1024.30

RI:1024.30

FORM:C11H15N5O4

CASNO:303194878

RT: 21.511

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 86

( 36 3) ( 37 29) ( 38 120) ( 39 180) ( 40 69)

( 41 856) ( 42 306) ( 43 157) ( 44 100) ( 45 23)

( 46 14) ( 50 9) ( 51 19) ( 52 31) ( 53 77)

( 54 61) ( 55 142) ( 56 260) ( 57 52) ( 58 7)

( 64 7) ( 65 52) ( 66 87) ( 67 52) ( 68 25)

( 69 1000) ( 70 120) ( 71 7) ( 77 9) ( 79 5)

( 80 10) ( 81 7) ( 82 27) ( 83 73) ( 84 930)

( 85 93) ( 86 22) ( 93 4) ( 94 45) ( 95 11)

( 96 23) ( 97 25) ( 98 13) (105 5) (110 6)

(111 8) (112 840) (113 68) (114 6) (123 21)

(124 43) (125 26) (126 6) (127 3) (128 3)

(129 3) (130 26) (131 2) (136 5) (137 2)

(138 12) (139 98) (140 106) (141 11) (143 2)

(152 100) (153 13) (154 2) (156 1) (164 3)

(165 1) (166 1) (168 1) (169 36) (170 3)

(171 2) (180 27) (181 2) (212 12) (213 1)

(219 1) (246 3) (247 4) (248 1) (281 11)

(282 1)

NAME:Phenol, 2-methoxy-5-(1-propenyl)-, (E)-

COMMENT: RI=1494.5, 35.2935 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1494.50

RI:1494.50

FORM:C10H12O2

CASNO:19784986

RT: 35.294

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 124

( 26 13) ( 27 77) ( 29 77) ( 30 9) ( 31 22)

( 33 3) ( 34 7) ( 37 10) ( 38 42) ( 39 203)

( 41 95) ( 42 9) ( 43 119) ( 45 34) ( 46 4)

( 49 2) ( 50 82) ( 51 196) ( 52 97) ( 53 105)

( 54 11) ( 55 396) ( 56 15) ( 57 13) ( 58 6)

( 59 10) ( 60 8) ( 61 10) ( 62 60) ( 63 95)

( 64 15) ( 65 124) ( 66 33) ( 67 22) ( 68 9)

( 69 22) ( 70 3) ( 71 2) ( 72 2) ( 73 8)

( 74 18) ( 75 29) ( 76 14) ( 77 369) ( 78 112)

( 79 87) ( 80 6) ( 81 28) ( 82 16) ( 83 2)

( 85 4) ( 87 3) ( 88 1) ( 89 42) ( 90 10)

( 91 315) ( 92 38) ( 93 100) ( 94 33) ( 95 20)

( 97 1) ( 98 1) ( 99 7) (101 16) (102 48)

(103 290) (104 176) (105 80) (106 16) (107 50)

(108 11) (109 23) (110 9) (111 4) (112 2)

(113 3) (115 17) (116 13) (117 22) (118 7)

(119 48) (120 21) (121 290) (122 50) (123 10)

(124 8) (125 1) (126 1) (127 8) (128 1)

(129 1) (130 7) (131 201) (132 90) (133 189)

(134 33) (135 16) (136 7) (137 181) (138 26)

(139 5) (140 2) (141 3) (142 3) (143 2)

(144 3) (145 9) (146 3) (147 42) (148 15)

(149 428) (150 60) (151 26) (152 23) (153 3)

(158 9) (159 2) (160 2) (161 7) (162 6)

(163 40) (164 1000) (165 127) (166 17)

NAME:2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, 1,3,5-trimethyl-

COMMENT: RI=1499.0, 35.4049 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1499.00

RI:1499.00

FORM:C7H10N2O2

CASNO:4401712

RT: 35.405

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 65

( 25 2) ( 26 24) ( 27 65) ( 28 116) ( 29 16)

( 30 19) ( 31 4) ( 33 2) ( 34 1) ( 36 6)

( 37 10) ( 38 23) ( 39 125) ( 40 42) ( 41 117)

( 42 657) ( 43 41) ( 44 2) ( 49 2) ( 50 1)

( 51 6) ( 52 22) ( 53 21) ( 54 41) ( 55 80)

( 56 108) ( 57 12) ( 58 29) ( 61 5) ( 62 2)

( 63 1) ( 64 2) ( 65 3) ( 66 37) ( 67 55)

( 68 667) ( 69 664) ( 70 46) ( 71 2) ( 77 3)

( 80 3) ( 81 2) ( 82 10) ( 83 4) ( 84 9)

( 85 2) ( 93 1) ( 95 7) ( 96 110) ( 97 183)

( 98 26) ( 99 3) (109 1) (110 5) (111 9)

(124 3) (125 15) (126 21) (127 2) (139 7)

(152 7) (153 10) (154 1000) (155 85) (156 6)

NAME:Ethanone, 1-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1536.4, 36.3416 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1536.40

RI:1536.40

FORM:C9H10O3

CASNO:6100749

RT: 36.342

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 69

( 14 1) ( 15 7) ( 26 2) ( 27 4) ( 28 9)

( 29 3) ( 31 5) ( 37 2) ( 38 5) ( 39 15)

( 40 2) ( 41 14) ( 42 2) ( 43 76) ( 44 2)

( 49 1) ( 50 13) ( 51 31) ( 52 35) ( 53 17)

( 54 3) ( 55 24) ( 61 3) ( 62 8) ( 63 15)

( 64 4) ( 65 42) ( 66 8) ( 67 25) ( 68 1)

( 69 5) ( 74 2) ( 75 3) ( 76 2) ( 77 41)

( 78 5) ( 79 19) ( 80 23) ( 81 5) ( 91 8)

( 92 2) ( 93 28) ( 94 9) ( 95 12) (105 2)

(106 1) (107 4) (108 65) (109 10) (110 1)

(119 8) (120 5) (121 4) (122 9) (123 253)

(124 20) (125 1) (135 1) (136 23) (137 9)

(149 2) (150 1) (151 1000) (152 89) (153 9)

(165 5) (166 529) (167 55) (168 5)

NAME:2-Naphthalenol, 3-methoxy-

COMMENT: RI=1547.6, 36.6242 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1547.60

RI:1547.60

FORM:C11H10O2

CASNO:18515112

RT: 36.624

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 48

( 15 20) ( 27 20) ( 28 20) ( 29 20) ( 38 20)

( 39 40) ( 50 50) ( 51 100) ( 52 30) ( 53 20)

( 61 20) ( 62 50) ( 63 80) ( 64 20) ( 65 20)

( 74 40) ( 75 50) ( 76 50) ( 77 200) ( 78 20)

( 86 20) ( 87 100) ( 88 20) ( 89 20) ( 98 20)

(101 20) (102 150) (103 80) (113 30) (114 40)

(115 90) (116 20) (117 20) (127 20) (129 20)

(130 20) (131 991) (132 100) (133 10) (144 20)

(145 50) (146 20) (159 350) (160 50) (173 20)

(174 1000) (175 120) (176 20)

NAME:1,3-Benzenedicarboxylic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1556.1, 36.8368 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1556.10

RI:1556.10

FORM:C10H10O4

CASNO:1459934

RT: 36.837

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 83

( 15 33) ( 18 1) ( 27 2) ( 28 6) ( 29 5)

( 30 1) ( 31 1) ( 32 1) ( 37 2) ( 38 11)

( 39 9) ( 41 2) ( 43 1) ( 45 3) ( 49 2)

( 50 60) ( 51 14) ( 52 33) ( 53 5) ( 56 1)

( 57 2) ( 60 12) ( 61 1) ( 62 2) ( 63 9)

( 64 8) ( 65 6) ( 66 47) ( 73 4) ( 74 23)

( 75 58) ( 76 89) ( 77 56) ( 78 5) ( 79 5)

( 81 2) ( 82 2) ( 89 2) ( 90 2) ( 91 8)

( 92 21) ( 93 2) (102 1) (103 87) (104 42)

(105 14) (106 2) (107 19) (108 2) (117 1)

(118 6) (119 40) (120 61) (121 6) (122 1)

(123 2) (132 2) (133 4) (134 3) (135 237)

(136 23) (137 2) (146 2) (148 30) (149 3)

(160 3) (162 3) (163 1000) (164 104) (165 14)

(166 2) (167 1) (176 2) (177 8) (178 2)

(179 6) (180 2) (181 2) (193 21) (194 243)

(195 32) (196 3) (197 1)

NAME:2-Propanone, 1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-

COMMENT: RI=1573.8, 37.2809 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1573.80

RI:1573.80

FORM:C10H12O3

CASNO:2503460

RT: 37.281

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 32

( 29 15) ( 31 12) ( 39 189) ( 41 25) ( 43 490)

( 50 63) ( 51 185) ( 52 81) ( 53 81) ( 55 60)

( 63 58) ( 65 128) ( 66 128) ( 67 25) ( 77 124)

( 78 42) ( 79 43) ( 81 44) ( 91 34) ( 94 212)

( 95 28) (105 32) (106 21) (107 31) (109 28)

(122 220) (123 82) (136 84) (137 1000) (138 163)

(180 290) (181 38)

NAME:Benzene, 1,1'-(1,1,2,2-tetramethyl-1,2-ethanediyl)bis-

COMMENT: RI=1852.8, 43.4661 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1852.80

RI:1852.80

FORM:C18H22

CASNO:1889674

RT: 43.466

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 57

( 27 6) ( 29 1) ( 39 26) ( 40 3) ( 41 140)

( 42 4) ( 43 4) ( 50 1) ( 51 15) ( 52 3)

( 53 3) ( 55 1) ( 56 1) ( 57 2) ( 63 5)

( 64 1) ( 65 13) ( 67 1) ( 69 1) ( 71 1)

( 75 1) ( 76 2) ( 77 38) ( 78 25) ( 79 57)

( 80 2) ( 83 2) ( 89 3) ( 91 314) ( 92 21)

( 93 1) ( 97 1) (102 3) (103 34) (104 14)

(105 15) (106 1) (115 14) (116 2) (117 19)

(118 122) (119 1000) (120 106) (121 3) (127 1)

(128 1) (129 1) (152 1) (165 2) (166 1)

(167 1) (178 1) (179 1) (222 1) (237 9)

(238 21) (239 2)

NAME:Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester

COMMENT: RI=1956.6, 45.5594 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:1956.60

RI:1956.60

FORM:C17H34O2

CASNO:5129602

RT: 45.559

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 104

( 27 37) ( 28 12) ( 29 73) ( 39 53) ( 40 12)

( 41 330) ( 42 67) ( 43 390) ( 44 15) ( 45 15)

( 53 31) ( 54 25) ( 55 370) ( 56 66) ( 57 180)

( 58 12) ( 59 130) ( 60 5) ( 65 8) ( 67 51)

( 68 21) ( 69 220) ( 70 32) ( 71 59) ( 72 5)

( 73 28) ( 74 1000) ( 75 180) ( 76 11) ( 77 9)

( 79 18) ( 80 7) ( 81 42) ( 82 16) ( 83 140)

( 84 33) ( 85 36) ( 87 731) ( 88 72) ( 89 6)

( 91 10) ( 93 15) ( 95 34) ( 96 12) ( 97 95)

( 98 34) ( 99 10) (101 73) (102 8) (105 7)

(107 12) (109 20) (110 6) (111 43) (112 10)

(113 7) (115 29) (116 13) (121 16) (123 13)

(125 25) (129 83) (130 19) (135 15) (137 7)

(139 16) (143 230) (144 21) (149 14) (153 10)

(157 28) (158 6) (163 6) (166 6) (167 6)

(171 65) (172 12) (177 7) (181 6) (185 71)

(186 12) (195 7) (196 8) (199 66) (200 10)

(205 10) (213 26) (214 10) (215 9) (221 7)

(223 12) (227 190) (228 29) (229 6) (237 5)

(239 61) (240 11) (241 33) (242 7) (255 13)

(256 7) (270 450) (271 110) (272 12)

NAME:1,7-Dimethyl-1,8-naphthyridin-4-one-3-carboxhydrzide

COMMENT: RI=2106.1, 48.1705 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LIVE|RI:2106.10

RI:2106.10

FORM:C11H12N4O2

CASNO:79878469

RT: 48.170

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 115

( 42 207) ( 43 28) ( 44 15) ( 45 14) ( 46 1)

( 47 7) ( 48 1) ( 49 31) ( 50 40) ( 51 114)

( 52 88) ( 53 227) ( 54 18) ( 55 27) ( 56 6)

( 57 5) ( 58 3) ( 59 9) ( 60 3) ( 61 8)

( 62 39) ( 63 135) ( 64 79) ( 65 85) ( 66 50)

( 67 21) ( 68 6) ( 69 8) ( 71 3) ( 72 6)

( 73 6) ( 74 11) ( 75 28) ( 76 68) ( 77 137)

( 78 78) ( 79 29) ( 80 18) ( 81 7) ( 82 7)

( 84 14) ( 86 17) ( 87 9) ( 88 18) ( 89 70)

( 90 46) ( 91 69) ( 92 50) ( 93 55) ( 94 7)

( 95 2) ( 99 2) (100 2) (101 12) (102 33)

(103 41) (104 202) (105 32) (106 13) (107 5)

(108 2) (114 5) (115 5) (116 37) (117 69)

(118 66) (119 18) (120 10) (121 1) (122 2)

(124 5) (128 6) (129 38) (130 50) (131 33)

(132 28) (133 5) (134 1) (135 2) (141 1)

(142 4) (143 22) (144 21) (145 213) (146 24)

(147 5) (149 2) (155 1) (156 2) (157 25)

(158 38) (159 16) (160 65) (161 10) (170 1)

(171 4) (172 3) (173 111) (174 251) (175 25)

(176 2) (185 1) (186 55) (187 83) (188 16)

(189 2) (199 21) (201 1000) (202 117) (203 13)

(215 5) (231 10) (232 476) (233 59) (234 5)

NAME:3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyacetophenone

COMMENT: RI=1728.1, 40.7964 min SAMPLE-TREATED-TMAH-OLAPA-LIVE|RI:1728.10

RI:1728.10

FORM:C16H24O2

CASNO:14035337

RT: 40.796

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 23

(115 25) (128 19) (129 19) (145 28) (158 21)

(159 59) (160 13) (173 35) (174 241) (175 70)

(176 25) (190 48) (203 14) (205 612) (206 71)

(215 60) (217 16) (218 23) (233 1000) (234 156)

(235 25) (248 440) (249 73)

NAME:11-Hexadecenoic acid, methyl ester

COMMENT: RI=1935.5, 45.1352 min SAMPLE-TREATED-TMAH-OLAPA-LIVE|RI:1935.50

RI:1935.50

FORM:C17H32O2

CASNO:55000425

RT: 45.135

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 142

( 15 59) ( 17 14) ( 18 17) ( 26 10) ( 27 65)

( 28 45) ( 29 161) ( 30 14) ( 31 17) ( 32 7)

( 39 91) ( 40 7) ( 41 596) ( 42 122) ( 43 315)

( 44 21) ( 45 35) ( 53 56) ( 54 175) ( 55 1000)

( 56 248) ( 57 175) ( 58 21) ( 59 175) ( 60 10)

( 65 24) ( 66 17) ( 67 300) ( 68 210) ( 69 601)

( 70 168) ( 71 98) ( 72 21) ( 73 49) ( 74 657)

( 75 98) ( 77 21) ( 78 17) ( 79 66) ( 80 49)

( 81 255) ( 82 217) ( 83 485) ( 84 507) ( 85 88)

( 87 470) ( 88 52) ( 91 25) ( 92 14) ( 93 60)

( 94 70) ( 95 220) ( 96 470) ( 97 480) ( 98 426)

( 99 66) (100 14) (101 84) (102 17) (105 21)

(106 10) (107 42) (108 49) (109 143) (110 242)

(111 224) (112 105) (113 49) (114 56) (115 80)

(116 21) (119 49) (120 21) (121 63) (122 31)

(123 168) (124 146) (125 136) (126 35) (127 49)

(128 73) (129 56) (130 21) (133 42) (134 56)

(135 49) (136 31) (137 77) (138 150) (139 105)

(140 24) (141 105) (142 24) (143 56) (144 14)

(147 21) (148 31) (149 28) (151 77) (152 260)

(153 91) (154 28) (155 38) (157 21) (158 10)

(161 28) (162 21) (163 21) (164 14) (165 56)

(166 60) (167 28) (168 14) (169 17) (171 24)

(172 21) (176 14) (177 10) (179 35) (180 28)

(181 21) (182 10) (183 14) (185 21) (186 14)

(189 14) (192 70) (193 56) (194 224) (195 63)

(196 10) (197 14) (218 45) (219 21) (225 21)

(236 400) (237 238) (238 52) (239 17) (250 14)

(268 175) (269 49)

NAME:Pentadecanoic acid, 13-methyl-, methyl ester

COMMENT: RI=1951.8, 45.4640 min SAMPLE-TREATED-TMAH-OLAPA-LIVE|RI:1951.80

RI:1951.80

FORM:C17H34O2

CASNO:5487503

RT: 45.464

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 193

( 15 20) ( 17 3) ( 18 6) ( 27 45) ( 28 42)

( 29 131) ( 30 6) ( 31 6) ( 34 3) ( 37 6)

( 39 42) ( 40 11) ( 41 338) ( 42 70) ( 43 346)

( 44 8) ( 45 11) ( 46 3) ( 48 3) ( 50 3)

( 53 17) ( 54 20) ( 55 346) ( 56 98) ( 57 304)

( 58 11) ( 59 95) ( 60 6) ( 63 6) ( 64 3)

( 65 3) ( 66 3) ( 67 39) ( 68 17) ( 69 212)

( 70 70) ( 71 112) ( 72 3) ( 73 28) ( 74 1000)

( 75 184) ( 76 22) ( 77 3) ( 78 3) ( 79 22)

( 80 8) ( 81 56) ( 82 14) ( 83 151) ( 84 34)

( 85 70) ( 86 6) ( 87 523) ( 88 45) ( 89 3)

( 93 14) ( 94 6) ( 95 45) ( 96 11) ( 97 126)

( 98 47) ( 99 17) (100 8) (101 67) (102 6)

(105 8) (107 20) (108 8) (109 53) (110 3)

(111 84) (112 20) (113 6) (115 117) (116 11)

(117 6) (118 3) (119 6) (120 6) (121 22)

(123 28) (124 6) (125 50) (126 11) (127 3)

(129 67) (130 25) (131 3) (132 6) (133 6)

(134 6) (135 28) (136 11) (137 11) (138 14)

(139 45) (140 6) (141 3) (142 3) (143 218)

(144 22) (145 11) (146 6) (147 6) (148 3)

(149 22) (150 6) (151 3) (153 22) (154 6)

(155 6) (157 45) (158 6) (161 11) (162 3)

(163 6) (164 6) (165 3) (166 8) (167 17)

(168 8) (169 3) (170 3) (171 67) (172 22)

(173 3) (175 6) (176 6) (177 3) (178 3)

(181 14) (182 9) (183 6) (184 6) (185 78)

(186 20) (187 6) (189 6) (191 34) (192 11)

(193 11) (194 11) (195 8) (196 3) (197 3)

(199 98) (200 11) (201 15) (202 3) (203 3)

(205 8) (206 3) (207 11) (208 11) (209 37)

(210 8) (211 3) (213 64) (214 6) (215 11)

(216 6) (218 3) (219 6) (220 6) (221 14)

(222 6) (223 14) (224 3) (225 3) (226 6)

(227 137) (228 39) (229 3) (236 6) (237 8)

(238 11) (239 56) (240 8) (241 81) (242 17)

(243 6) (245 9) (248 3) (250 3) (251 3)

(252 3) (253 3) (256 11) (257 3) (269 11)

(270 489) (271 115) (272 8)

NAME:? 9-Hexadecenoic acid, methyl ester, (Z)-

COMMENT: RI=2012.1, 46.6334 min SAMPLE-TREATED-TMAH-OLAPA-LIVE|RI:2012.10

RI:2012.10

FORM:C17H32O2

CASNO:1120-25-8

RT: 46.633

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 77

( 39 382) ( 41 479) ( 42 70) ( 43 242) ( 53 208)

( 54 61) ( 55 822) ( 56 80) ( 57 188) ( 59 158)

( 66 49) ( 67 632) ( 68 265) ( 69 433) ( 70 75)

( 71 106) ( 74 116) ( 75 114) ( 79 216) ( 80 120)

( 81 1000) ( 82 475) ( 83 578) ( 84 331) ( 85 135)

( 87 453) ( 93 159) ( 94 132) ( 95 613) ( 96 726)

( 97 714) ( 98 692) ( 99 104) (101 342) (107 155)

(108 133) (109 335) (110 474) (111 430) (112 165)

(113 372) (115 122) (119 170) (120 94) (121 258)

(122 109) (123 310) (124 256) (125 270) (127 248)

(129 85) (133 168) (134 291) (135 214) (137 273)

(138 434) (139 93) (141 346) (143 144) (148 275)

(149 135) (151 282) (152 411) (161 110) (165 577)

(171 430) (172 94) (185 151) (192 99) (193 193)

(194 283) (195 93) (199 59) (222 247) (225 107)

(236 378) (237 374)

NAME:Dehydroabietic acid methyl ester

COMMENT: RI=2459.0, 53.9317 min SAMPLE-TREATED-TMAH-OLAPA-LIVE|RI:2459.00

RI:2459.00

FORM:C21H30O2

CASNO:1235-74-1

RT:53.932

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 139

( 41 188) ( 43 326) ( 44 16) ( 45 12) ( 47 2)

( 49 3) ( 51 2) ( 53 35) ( 55 85) ( 56 9)

( 57 14) ( 59 74) ( 60 8) ( 63 3) ( 65 13)

( 67 30) ( 69 53) ( 70 2) ( 71 23) ( 73 13)

( 76 3) ( 77 36) ( 78 15) ( 79 27) ( 81 33)

( 82 11) ( 83 11) ( 84 2) ( 85 15) ( 86 2)

( 88 5) ( 89 6) ( 91 62) ( 92 10) ( 93 12)

( 95 19) ( 97 15) ( 98 8) ( 99 8) (101 17)

(103 13) (105 36) (107 16) (109 11) (111 2)

(112 28) (115 68) (116 5) (117 78) (118 2)

(119 15) (121 36) (123 20) (127 22) (128 52)

(129 67) (131 66) (133 38) (134 2) (139 2)

(141 94) (142 47) (143 66) (144 3) (145 28)

(146 24) (147 18) (149 7) (151 4) (152 20)

(153 32) (154 19) (155 44) (156 8) (157 41)

(158 3) (159 53) (160 2) (161 8) (165 22)

(166 8) (167 30) (168 15) (169 37) (170 7)

(171 39) (173 54) (174 6) (178 9) (179 12)

(181 36) (182 2) (183 32) (184 7) (185 43)

(186 20) (187 27) (189 2) (192 14) (193 4)

(195 19) (196 11) (197 68) (198 3) (199 30)

(200 8) (202 8) (203 2) (207 2) (209 8)

(211 26) (212 3) (213 23) (215 3) (223 11)

(224 4) (225 17) (227 8) (237 18) (238 4)

(239 1000) (240 192) (241 20) (243 2) (251 2)

(253 54) (254 8) (255 30) (256 5) (267 10)

(268 9) (269 14) (296 8) (299 127) (300 31)

(301 2) (313 9) (314 146) (315 30)

NAME:Nonanedioic acid, dibutyl ester

COMMENT: RI=1952.4, 45.4753 min FOIL-TMAH-TREATED-OLAPA-LIVE|RI:1952.40

RI:1952.40

FORM:C17H32O4

CASNO:2917739

RT: 45.475

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 77

( 41 373) ( 42 100) ( 43 151) ( 44 50) ( 45 30)

( 53 20) ( 54 20) ( 55 516) ( 56 414) ( 57 292)

( 58 20) ( 59 30) ( 60 151) ( 61 40) ( 63 50)

( 67 60) ( 68 40) ( 69 100) ( 70 30) ( 71 20)

( 73 111) ( 74 20) ( 77 70) ( 79 30) ( 80 20)

( 81 70) ( 82 70) ( 83 272) ( 84 111) ( 85 30)

( 87 70) ( 93 20) ( 95 40) ( 96 60) ( 97 222)

( 98 131) ( 99 30) (101 60) (107 40) (109 20)

(110 40) (111 272) (112 20) (114 20) (115 40)

(116 30) (117 20) (123 40) (124 131) (125 323)

(126 50) (129 343) (130 30) (135 50) (136 20)

(137 30) (141 20) (142 20) (143 70) (144 30)

(151 30) (152 677) (153 131) (154 20) (155 20)

(157 20) (170 20) (171 1000) (172 131) (184 20)

(185 161) (186 30) (198 30) (200 40) (226 20)

(227 768) (228 131)

NAME:1,4-Benzenediol, 2-methoxy-

COMMENT: RI=1189.9, 26.9178 min FOIL-TMAH-TREATED-ULUHE-LIVE|RI:1189.90

RI:1189.90

FORM:C7H8O3

CASNO:824464

RT: 26.918

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 93

( 12 1) ( 13 2) ( 14 9) ( 15 32) ( 18 2)

( 25 7) ( 26 35) ( 27 56) ( 28 30) ( 29 41)

( 30 3) ( 31 8) ( 32 2) ( 33 1) ( 34 5)

( 36 2) ( 37 12) ( 38 20) ( 39 88) ( 40 14)

( 41 86) ( 42 41) ( 43 34) ( 44 3) ( 45 4)

( 48 1) ( 49 9) ( 50 32) ( 51 66) ( 52 50)

( 53 88) ( 54 43) ( 55 67) ( 56 8) ( 57 3)

( 59 2) ( 60 1) ( 61 7) ( 62 9) ( 63 11)

( 64 3) ( 65 15) ( 66 8) ( 67 9) ( 68 36)

( 69 90) ( 70 15) ( 71 4) ( 73 1) ( 74 1)

( 75 1) ( 76 1) ( 77 5) ( 78 4) ( 79 49)

( 80 11) ( 81 25) ( 82 19) ( 83 5) ( 84 5)

( 85 2) ( 91 1) ( 92 2) ( 93 10) ( 94 3)

( 95 14) ( 96 23) ( 97 472) ( 98 29) ( 99 3)

(105 1) (107 9) (108 33) (109 8) (110 20)

(111 30) (112 3) (113 1) (116 1) (121 1)

(122 1) (123 5) (124 3) (125 628) (126 45)

(127 5) (128 1) (137 2) (138 20) (139 24)

(140 1000) (141 85) (142 10)

NAME:2,4-Imidazolidinedione, 1,5,5-trimethyl-

COMMENT: RI=1254.6, 28.7882 min FOIL-TMAH-TREATED-ULUHE-LIVE|RI:1254.60

RI:1254.60

FORM:C6H10N2O2

CASNO:6851816

RT: 28.788

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 14

( 41 70) ( 42 40) ( 43 30) ( 54 30) ( 55 30)

( 56 971) ( 57 50) ( 70 40) ( 71 40) ( 84 10)

(127 1000) (128 110) (142 210) (143 20)

NAME:Tridecanoic acid, 12-methyl-, methyl ester

COMMENT: RI=1748.6, 41.2551 min FOIL-TMAH-TREATED-ULUHE-LIVE|RI:1748.60

RI:1748.60

FORM:C15H30O2

CASNO:5129588

RT: 41.255

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 105

( 27 75) ( 28 20) ( 29 110) ( 31 6) ( 39 70)

( 40 15) ( 41 320) ( 42 70) ( 43 300) ( 44 10)

( 45 15) ( 51 5) ( 53 30) ( 54 25) ( 55 300)

( 56 60) ( 57 120) ( 58 10) ( 59 100) ( 60 5)

( 65 10) ( 67 45) ( 68 20) ( 69 190) ( 70 27)

( 71 45) ( 73 30) ( 74 1000) ( 75 150) ( 76 10)

( 77 10) ( 79 20) ( 80 7) ( 81 40) ( 82 15)

( 83 120) ( 84 35) ( 85 25) ( 87 801) ( 88 70)

( 89 5) ( 91 20) ( 92 10) ( 93 20) ( 95 30)

( 96 10) ( 97 100) ( 98 40) ( 99 10) (101 90)

(102 10) (105 15) (106 10) (107 15) (109 20)

(110 10) (111 55) (112 15) (113 5) (115 30)

(116 10) (117 5) (119 10) (121 15) (123 15)

(125 25) (129 100) (130 25) (131 5) (133 10)

(134 10) (135 15) (137 10) (139 15) (140 5)

(143 270) (144 30) (149 15) (153 12) (157 65)

(158 10) (166 5) (167 10) (168 10) (171 25)

(172 5) (177 20) (185 60) (186 15) (187 10)

(195 20) (199 440) (200 60) (201 15) (209 10)

(211 120) (212 20) (213 50) (214 10) (227 15)

(228 10) (241 5) (242 310) (243 60) (244 7)

NAME:Heptadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester, (ñ)-

COMMENT: RI=2177.2, 49.3342 min FOIL-TMAH-TREATED-ULUHE-LIVE|RI:2177.20

RI:2177.20

FORM:C19H38O2

CASNO:57274450

RT: 49.334

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 133

( 37 6) ( 39 145) ( 41 303) ( 42 64) ( 43 349)

( 53 43) ( 54 21) ( 55 240) ( 57 190) ( 58 26)

( 62 1) ( 63 25) ( 64 2) ( 65 7) ( 69 243)

( 70 33) ( 74 100) ( 75 173) ( 76 5) ( 78 11)

( 82 49) ( 83 37) ( 84 62) ( 85 31) ( 86 1)

( 87 309) ( 88 116) ( 89 12) ( 91 36) ( 92 11)

( 93 21) ( 94 42) ( 95 21) ( 97 131) ( 98 30)

( 99 14) (101 462) (103 14) (106 2) (107 65)

(108 45) (109 185) (110 61) (112 9) (113 14)

(114 21) (115 228) (119 34) (121 138) (125 55)

(126 13) (127 53) (129 598) (130 100) (131 6)

(135 7) (138 16) (139 10) (140 31) (143 771)

(144 43) (151 20) (152 42) (153 64) (157 344)

(159 11) (161 36) (164 16) (165 45) (166 25)

(167 53) (170 32) (171 337) (172 70) (179 30)

(183 69) (185 264) (187 38) (189 34) (190 5)

(191 41) (192 48) (193 42) (196 33) (197 29)

(199 688) (201 97) (202 44) (204 51) (205 27)

(206 50) (207 118) (208 19) (210 36) (212 28)

(213 357) (214 97) (219 36) (220 31) (223 8)

(226 26) (228 65) (230 47) (231 30) (233 39)

(237 25) (240 37) (241 332) (242 202) (243 11)

(245 87) (246 19) (247 64) (248 187) (250 36)

(255 562) (256 82) (260 38) (261 2) (268 30)

(270 61) (272 7) (274 6) (278 23) (279 21)

(280 20) (281 26) (285 6) (286 25) (288 13)

(290 2) (293 9) (298 1000)

NAME:9H-Purin-6-amine, N,N,9-trimethyl-

COMMENT: RI=1785.9, 42.0877 min SAMPLE-TMAH-TREATED-UHULE-LIVE|RI:1785.90

RI:1785.90

FORM:C8H11N5

CASNO:3013829

RT: 42.088

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\Cathy3.MSL

NUM PEAKS: 93

( 25 1) ( 26 12) ( 27 35) ( 28 160) ( 29 14)

( 30 171) ( 31 2) ( 37 1) ( 38 16) ( 39 26)

( 40 47) ( 41 63) ( 42 273) ( 43 25) ( 44 231)

( 45 5) ( 50 4) ( 51 24) ( 52 98) ( 53 67)

( 54 43) ( 55 18) ( 56 9) ( 57 8) ( 60 1)

( 61 1) ( 63 1) ( 64 14) ( 65 21) ( 66 36)

( 67 68) ( 68 11) ( 69 6) ( 70 1) ( 71 6)

( 74 7) ( 75 1) ( 76 7) ( 77 48) ( 78 24)

( 79 130) ( 80 173) ( 81 40) ( 82 6) ( 83 1)

( 88 2) ( 89 30) ( 90 1) ( 91 12) ( 92 22)

( 93 30) ( 94 24) ( 95 4) ( 96 1) ( 97 2)

(104 4) (105 9) (106 115) (107 331) (108 82)

(109 7) (118 3) (119 17) (120 21) (121 12)

(122 4) (123 5) (129 1) (131 1) (132 5)

(133 252) (134 134) (135 135) (136 11) (144 2)

(145 1) (146 5) (147 24) (148 1000) (149 111)

(150 10) (159 1) (160 9) (161 5) (162 482)

(163 43) (164 1) (174 2) (175 1) (176 40)

(177 484) (178 50) (179 2)

NAME:Acetic anhydride

COMMENT: RI=702.9, 9.1873 min OLAPA-UNTREATED-2|RI:702.90

RI:702.90

FORM:C4H6O3

CASNO:108247

RT: 9.187

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\100507.MSL

NUM PEAKS: 31

( 12 2) ( 13 7) ( 14 34) ( 15 123) ( 16 3)

( 18 1) ( 24 1) ( 25 1) ( 26 2) ( 27 1)

( 28 10) ( 29 11) ( 30 1) ( 31 1) ( 32 1)

( 36 1) ( 40 2) ( 41 12) ( 42 59) ( 43 1000)

( 44 26) ( 45 37) ( 46 1) ( 55 1) ( 56 1)

( 57 1) ( 60 25) ( 61 1) ( 87 3) (101 1)

(102 1)

NAME:3-Buten-2-ol

COMMENT: RI=1134.5, 25.2168 min ULUHE-UNTREATED-LIVE|RI:1134.50

RI:1134.50

FORM:C4H8O

CASNO:598323

RT: 25.217

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\100507.MSL

NUM PEAKS: 18

( 37 25) ( 38 25) ( 39 353) ( 40 25) ( 41 149)

( 42 65) ( 43 1000) ( 44 232) ( 45 38) ( 53 20)

( 54 22) ( 55 19) ( 57 310) ( 58 14) ( 71 9)

( 87 10) (117 14) (138 7)

NAME:3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol

COMMENT: RI=1902.5, 44.4741 min ULUHE-UNTREATED-LIVE|RI:1902.50

RI:1902.50

FORM:C20H40O

CASNO:102608537

RT: 44.474

SOURCE:U:\AMDIS Libraries\100507.MSL

NUM PEAKS: 60

( 27 89) ( 29 193) ( 39 129) ( 41 812) ( 42 144)

( 43 966) ( 44 40) ( 51 22) ( 52 20) ( 53 227)

( 55 853) ( 56 254) ( 57 812) ( 58 33) ( 65 82)

( 67 663) ( 68 729) ( 69 631) ( 70 203) ( 71 749)

( 72 42) ( 77 114) ( 79 339) ( 80 125) ( 81 1000)

( 82 987) ( 83 467) ( 84 77) ( 85 150) ( 86 22)

( 91 95) ( 92 22) ( 93 136) ( 94 129) ( 95 963)

( 96 421) ( 97 290) ( 98 41) ( 99 27) (105 25)

(107 86) (108 35) (109 263) (110 115) (111 157)

(112 33) (113 18) (121 34) (123 893) (124 216)

(125 62) (126 40) (137 91) (138 41) (151 27)

(152 20) (179 40) (193 25) (278 113) (279 26)

NAME:Acetamide, N,N-dimethyl-

FORM:C4H9NO

CASNO:127-19-5

RI:881.9

RW:

RT:16.181

COMMENT: RI=881.9, 16.1814 min PT1\_3-4|RI:881.9

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\AMDIS Libraries\110107.MSL

NUM PEAKS: 46

( 40 11) ( 41 16) ( 42 198) ( 43 217) ( 44 1000)

( 45 528) ( 46 16) ( 51 5) ( 53 3) ( 56 31)

( 57 18) ( 58 7) ( 59 5) ( 60 2) ( 62 2)

( 64 2) ( 65 14) ( 67 20) ( 68 17) ( 71 1)

( 72 148) ( 73 4) ( 74 7) ( 77 17) ( 78 3)

( 79 5) ( 83 2) ( 84 13) ( 85 11) ( 86 4)

( 87 350) ( 88 104) ( 89 5) ( 91 14) ( 92 3)

( 94 6) ( 95 1) ( 96 3) (103 5) (106 8)

(107 5) (108 6) (109 5) (110 7) (117 4)

(119 3)

NAME:Phenol, 3-(dimethylamino)-

FORM:C8H11NO

CASNO:99-07-0

RI:1214.2

RW:

RT:27.598

COMMENT: RI=1214.2, 27.5982 min PT1\_41-42|RI:1214.2

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\AMDIS Libraries\110107.MSL

NUM PEAKS: 39

( 39 25) ( 41 17) ( 42 22) ( 51 15) ( 53 9)

( 55 14) ( 56 18) ( 63 7) ( 65 27) ( 67 98)

( 68 6) ( 77 52) ( 78 12) ( 79 74) ( 80 11)

( 81 11) ( 91 39) ( 92 10) ( 93 34) ( 94 23)

( 95 15) ( 96 5) (105 8) (106 37) (107 62)

(108 21) (117 5) (118 21) (119 10) (120 79)

(121 188) (122 347) (123 32) (127 10) (134 53)

(135 33) (136 1000) (137 701) (138 86)

NAME:Phenol, 3-(ethylamino)-4-methyl-

FORM:C9H13NO

CASNO:120-37-6

RI:1268.9

RW:

RT:29.153

COMMENT: RI=1268.9, 29.1530 min PT1\_41-42|RI:1268.9

SOURCE:C:\Documents and Settings\dan\My Documents\AMDIS Libraries\110107.MSL

NUM PEAKS: 31

( 39 28) ( 56 32) ( 65 28) ( 67 153) ( 77 70)

( 79 86) ( 80 27) ( 81 29) ( 91 55) ( 93 53)

( 94 32) ( 95 37) ( 96 29) (106 59) (107 246)

(108 59) (117 27) (118 28) (120 164) (121 240)

(122 997) (123 82) (134 158) (135 206) (136 1000)

(137 128) (139 16) (150 130) (151 938) (152 130)

(166 21)

NAME:n-Heneicosane (C21)

COMMENT: RI=2118.6, 49.6133 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2118.60

RI:2118.60

FORM:C21H44

CASNO:629-94-7

RT: 49.613

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 63

( 39 146) ( 40 11) ( 41 478) ( 42 32) ( 43 397)

( 53 16) ( 55 154) ( 56 76) ( 57 964) ( 58 41)

( 66 17) ( 67 96) ( 68 18) ( 69 134) ( 70 104)

( 71 1000) ( 72 55) ( 81 73) ( 82 109) ( 83 180)

( 84 49) ( 85 881) ( 86 59) ( 95 30) ( 96 118)

( 97 250) ( 98 74) ( 99 448) (100 31) (109 8)

(110 81) (111 190) (112 71) (113 313) (114 32)

(124 64) (125 98) (126 83) (127 194) (128 25)

(138 37) (139 35) (140 66) (141 165) (142 26)

(154 52) (155 141) (166 27) (167 17) (168 39)

(169 94) (182 43) (183 56) (184 9) (196 38)

(197 41) (210 42) (211 38) (224 28) (225 32)

(238 32) (239 28) (252 16)

NAME:n-Docosane (C22)

COMMENT: RI=2230.1, 51.3843 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2230.30

RI:2230.30

FORM:C22H46

CASNO:629-97-0

RT: 51.384

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 57

( 39 150) ( 41 477) ( 43 316) ( 55 154) ( 56 75)

( 57 970) ( 58 40) ( 67 66) ( 68 20) ( 69 123)

( 70 114) ( 71 1000) ( 72 61) ( 81 79) ( 82 106)

( 83 199) ( 84 72) ( 85 885) ( 86 66) ( 95 46)

( 96 116) ( 97 271) ( 98 72) ( 99 478) (110 100)

(111 200) (112 56) (113 328) (124 72) (125 124)

(126 71) (127 257) (128 32) (138 62) (139 48)

(140 62) (141 254) (142 21) (152 34) (153 38)

(154 55) (155 145) (166 27) (168 43) (169 119)

(170 18) (180 21) (182 51) (183 101) (195 13)

(196 47) (197 58) (210 46) (211 40) (212 7)

(239 31) (253 44)

NAME:n-Tricosane (C23)

COMMENT: RI=2315.9, 52.7466 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2315.90

RI:2315.90

FORM:C23H48

CASNO:638-67-5

RT: 52.747

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 66

( 39 122) ( 40 9) ( 41 392) ( 42 29) ( 43 350)

( 55 149) ( 56 69) ( 57 940) ( 58 31) ( 67 87)

( 69 127) ( 70 107) ( 71 1000) ( 72 57) ( 81 84)

( 82 114) ( 83 191) ( 84 63) ( 85 997) ( 86 58)

( 95 41) ( 96 131) ( 97 281) ( 98 58) ( 99 543)

(100 47) (109 17) (110 106) (111 229) (112 81)

(113 405) (114 40) (124 87) (125 114) (126 61)

(127 282) (128 26) (138 56) (139 74) (140 51)

(141 201) (142 25) (146 7) (152 34) (154 55)

(155 159) (166 27) (167 14) (168 51) (169 128)

(170 25) (180 17) (182 50) (183 94) (184 19)

(196 47) (197 79) (210 36) (211 53) (224 30)

(225 34) (238 29) (239 33) (252 30) (253 28)

(266 26)

NAME:n-Tetracosane (C24)

COMMENT: RI=2398.8, 54.0633 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2399.10

RI:2399.10

FORM:C24H50

CASNO:646-31-1

RT: 54.063

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 61

( 39 119) ( 41 333) ( 42 24) ( 43 281) ( 55 128)

( 56 62) ( 57 916) ( 58 39) ( 66 25) ( 67 67)

( 69 120) ( 70 96) ( 71 1000) ( 72 61) ( 81 72)

( 82 115) ( 83 172) ( 84 65) ( 85 846) ( 86 68)

( 95 38) ( 96 154) ( 97 275) ( 98 61) ( 99 508)

(100 47) (109 14) (110 109) (111 221) (112 74)

(113 343) (114 36) (124 87) (125 144) (126 59)

(127 287) (138 57) (139 84) (140 46) (141 241)

(142 24) (152 43) (153 34) (154 53) (155 168)

(156 24) (167 20) (168 50) (169 129) (181 15)

(182 51) (183 111) (196 29) (197 89) (210 37)

(211 71) (224 39) (225 58) (239 26) (252 28)

(253 26)

NAME:n-Pentacosane (C25)

COMMENT: RI=2486.6, 55.3930 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2486.60

RI:2486.60

FORM:C25H52

CASNO:629-99-2

RT: 55.393

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 111) ( 41 357) ( 42 27) ( 43 277) ( 54 6)

( 55 125) ( 56 61) ( 57 907) ( 58 36) ( 66 18)

( 67 76) ( 68 17) ( 69 135) ( 70 85) ( 71 1000)

( 72 47) ( 81 71) ( 82 97) ( 83 170) ( 84 70)

( 85 875) ( 86 64) ( 95 41) ( 96 141) ( 97 285)

( 98 77) ( 99 525) (100 49) (110 92) (111 243)

(112 65) (113 384) (114 40) (123 15) (124 94)

(125 134) (126 51) (127 306) (128 33) (138 71)

(139 80) (140 60) (141 268) (142 27) (152 54)

(153 46) (154 57) (155 200) (156 25) (166 32)

(168 42) (169 140) (180 29) (181 21) (182 50)

(183 131) (184 16) (196 54) (197 95) (198 18)

(211 80) (212 15) (225 59) (238 27) (239 42)

(252 23) (253 35) (266 20) (267 31)

NAME:n-Hexacosane (C26)

COMMENT: RI=2579.9, 56.8050 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2579.90

RI:2579.90

FORM:C26H54

CASNO:630-01-3

RT: 56.805

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 68

( 39 111) ( 41 341) ( 42 21) ( 43 283) ( 55 154)

( 56 70) ( 57 925) ( 58 39) ( 67 68) ( 69 148)

( 70 82) ( 71 1000) ( 72 57) ( 81 99) ( 82 127)

( 83 194) ( 84 72) ( 85 984) ( 86 53) ( 95 45)

( 96 164) ( 97 327) ( 98 80) ( 99 589) (100 43)

(109 20) (110 106) (111 279) (112 74) (113 465)

(114 47) (124 105) (125 175) (126 77) (127 331)

(128 37) (138 94) (139 104) (140 57) (141 284)

(142 29) (152 54) (153 73) (154 50) (155 208)

(156 36) (166 50) (167 30) (168 62) (169 165)

(170 22) (180 47) (181 30) (182 43) (183 140)

(184 20) (195 22) (196 45) (197 123) (210 40)

(211 112) (224 38) (225 93) (238 37) (239 60)

(252 29) (280 21) (294 10)

NAME:n-Heptacosane (C27)

COMMENT: RI=2681.9, 58.3489 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2681.80

RI:2681.80

FORM:C27H56

CASNO:593-49-7

RT: 58.349

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 63

( 39 94) ( 41 340) ( 42 23) ( 43 289) ( 55 143)

( 56 54) ( 57 876) ( 58 43) ( 67 68) ( 69 132)

( 70 106) ( 71 1000) ( 72 60) ( 81 104) ( 82 127)

( 83 233) ( 84 61) ( 85 964) ( 86 68) ( 95 58)

( 96 175) ( 97 380) ( 98 70) ( 99 609) (100 49)

(110 131) (111 304) (112 64) (113 432) (114 41)

(123 17) (124 135) (125 174) (126 61) (127 324)

(128 34) (138 93) (139 102) (140 62) (141 291)

(152 65) (153 59) (154 71) (155 229) (156 34)

(166 39) (167 48) (168 68) (169 197) (180 30)

(182 53) (183 153) (195 29) (196 40) (197 138)

(211 122) (224 36) (225 99) (238 27) (239 83)

(240 20) (252 21) (253 53)

NAME:n-Octacosane (C28)

COMMENT: RI=2799.0, 60.1209 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2799.00

RI:2799.00

FORM:C28H58

CASNO:630-02-4

RT: 60.121

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 66

( 39 107) ( 41 333) ( 43 313) ( 55 145) ( 56 62)

( 57 866) ( 58 38) ( 66 18) ( 67 60) ( 68 19)

( 69 129) ( 70 86) ( 71 993) ( 72 50) ( 81 88)

( 82 128) ( 83 214) ( 84 58) ( 85 1000) ( 86 56)

( 95 65) ( 96 174) ( 97 369) ( 98 84) ( 99 622)

(100 52) (109 19) (110 139) (111 332) (112 74)

(113 471) (114 44) (124 141) (125 192) (126 72)

(127 385) (128 41) (138 86) (139 108) (140 70)

(141 317) (142 35) (152 68) (153 65) (154 65)

(155 258) (156 36) (166 58) (167 59) (168 58)

(169 218) (170 25) (180 36) (181 41) (182 52)

(183 167) (184 23) (196 39) (197 160) (211 124)

(225 104) (238 38) (239 79) (253 76) (267 72)

(295 36)

NAME:n-Nonacosane (C29)

COMMENT: RI=2873.6, 62.1913 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2873.60

RI:2873.60

FORM:C29H60

CASNO:630-03-5

RT: 62.191

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 67

( 39 98) ( 41 338) ( 42 24) ( 43 266) ( 55 136)

( 56 62) ( 57 898) ( 58 33) ( 67 76) ( 68 19)

( 69 142) ( 70 79) ( 71 972) ( 72 53) ( 81 101)

( 82 135) ( 83 234) ( 84 64) ( 85 1000) ( 86 64)

( 95 57) ( 96 182) ( 97 426) ( 98 70) ( 99 617)

(100 49) (110 130) (111 333) (112 87) (113 467)

(114 50) (124 146) (125 206) (126 68) (127 385)

(128 35) (137 21) (138 110) (139 145) (140 85)

(141 299) (142 41) (152 84) (153 76) (154 63)

(155 275) (156 42) (166 55) (167 55) (168 56)

(169 244) (170 37) (181 39) (182 58) (183 207)

(184 32) (196 41) (197 165) (210 42) (211 136)

(212 28) (224 42) (225 143) (239 101) (252 41)

(253 85) (295 46)

NAME:n-Triacontane (C30)

COMMENT: RI=2961.7, 64.6523 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:2961.70

RI:2961.70

FORM:C30H62

CASNO:638-68-6

RT: 64.652

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 62

( 39 94) ( 41 306) ( 43 284) ( 55 133) ( 56 52)

( 57 844) ( 58 29) ( 67 69) ( 69 127) ( 70 84)

( 71 946) ( 72 52) ( 80 14) ( 81 100) ( 82 134)

( 83 219) ( 84 58) ( 85 1000) ( 86 66) ( 95 64)

( 96 187) ( 97 411) ( 98 58) ( 99 641) (100 53)

(109 24) (110 118) (111 334) (112 72) (113 458)

(124 158) (125 202) (126 72) (127 412) (128 35)

(138 113) (139 108) (140 58) (141 342) (142 40)

(152 76) (153 97) (154 68) (155 280) (166 56)

(167 62) (168 51) (169 243) (180 49) (182 56)

(183 216) (196 46) (197 191) (198 31) (210 37)

(211 141) (212 30) (224 41) (225 128) (239 92)

(240 23) (253 103)

NAME:n-Hentriacontane (C31)

COMMENT: RI=3067.9, 67.6179 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:3067.90

RI:3067.90

FORM:C31H64

CASNO:630-04-6

RT: 67.618

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 61

( 39 82) ( 41 282) ( 42 22) ( 43 245) ( 55 140)

( 57 802) ( 58 42) ( 67 73) ( 69 133) ( 70 81)

( 71 941) ( 72 48) ( 81 83) ( 82 115) ( 83 237)

( 84 73) ( 85 1000) ( 86 73) ( 95 61) ( 96 196)

( 97 403) ( 98 79) ( 99 606) (100 50) (110 130)

(111 332) (112 85) (113 539) (124 128) (125 228)

(126 83) (127 397) (128 39) (138 129) (139 136)

(140 82) (141 342) (142 46) (152 65) (153 100)

(154 66) (155 307) (166 66) (167 73) (168 46)

(169 266) (170 32) (180 53) (181 45) (183 186)

(184 31) (196 53) (197 180) (211 165) (212 26)

(224 45) (225 140) (226 31) (239 121) (253 89)

(267 89)

NAME:n-Dotriacontane (C32)

COMMENT: RI=3197.8, 71.2449 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:3197.30

RI:3197.30

FORM:C32H66

CASNO:544-85-4

RT: 71.245

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 48

( 39 82) ( 41 263) ( 43 234) ( 55 132) ( 56 43)

( 57 836) ( 67 66) ( 69 153) ( 71 1000) ( 72 40)

( 81 118) ( 82 133) ( 83 202) ( 85 935) ( 96 196)

( 97 405) ( 98 70) ( 99 682) (110 143) (111 390)

(112 68) (113 485) (124 163) (125 234) (126 72)

(127 412) (128 49) (138 111) (139 172) (140 78)

(141 327) (153 93) (154 62) (155 287) (156 40)

(167 60) (169 249) (180 82) (181 60) (183 221)

(184 36) (197 206) (198 43) (211 166) (224 50)

(225 161) (239 86) (253 108)

NAME:n-Tritriacontane (C33)

COMMENT: RI=3356.8, 81.1135 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:3269.90

RI:3269.90

FORM:C33H68

CASNO:630-05-7

RT: 81.114

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 40

( 41 357) ( 43 264) ( 55 107) ( 57 1000) ( 69 211)

( 70 103) ( 71 951) ( 72 77) ( 81 138) ( 82 148)

( 83 282) ( 85 919) ( 95 103) ( 96 166) ( 97 634)

( 98 87) ( 99 698) (110 161) (111 490) (112 155)

(113 623) (124 267) (125 274) (127 573) (138 219)

(139 215) (141 398) (153 133) (154 87) (155 294)

(168 149) (169 351) (182 73) (183 243) (197 222)

(198 54) (211 323) (225 159) (226 75) (239 139)

NAME:n-Tetratriacontane (C34)

COMMENT: RI=3464.7, 87.8678 min HEAVY\_ALLKANESTD\_270-300\_60MIN\_30SF|RI:3356.80

RI:3356.80

FORM:C36H74

CASNO:630-06-8

RT: 87.868

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\21-36-270-300-alkane.MSL

NUM PEAKS: 16

( 55 273) ( 57 856) ( 71 1000) ( 82 197) ( 85 816)

( 97 494) ( 99 827) (110 194) (111 450) (125 390)

(127 617) (141 464) (155 372) (169 432) (197 288)

(225 334)

NAME:n-Dotriacontane

COMMENT: RI=3200.0, 71.3065 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:3197.30

RI:3197.30

FORM:c32h66

CASNO:544-85-4

RT: 71.245

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 79

( 39 78) ( 41 317) ( 43 256) ( 55 150) ( 56 48)

( 57 889) ( 58 33) ( 67 63) ( 68 21) ( 69 148)

( 70 97) ( 71 1000) ( 72 41) ( 80 14) ( 81 111)

( 82 129) ( 83 237) ( 84 57) ( 85 950) ( 86 76)

( 95 61) ( 96 172) ( 97 441) ( 98 94) ( 99 674)

(100 48) (110 126) (111 388) (112 85) (113 450)

(114 55) (123 28) (124 156) (125 221) (126 87)

(127 404) (128 41) (136 20) (138 174) (139 163)

(140 74) (141 360) (152 84) (153 111) (154 85)

(155 275) (156 34) (162 5) (166 74) (167 70)

(168 40) (169 257) (180 46) (181 52) (182 62)

(183 208) (184 47) (194 49) (195 35) (196 47)

(197 195) (198 34) (208 35) (210 42) (211 210)

(212 23) (224 46) (225 124) (226 30) (237 19)

(239 126) (240 26) (250 25) (252 43) (253 108)

(267 84) (280 24) (281 63) (295 50)

NAME:n-Octacosane

COMMENT: RI=2800.0, 60.1362 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:2800.00

RI:2800.00

FORM:c28h58

CASNO:630-02-4

RT: 62.191

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 82

( 39 114) ( 41 361) ( 42 19) ( 43 315) ( 44 15)

( 55 165) ( 56 48) ( 57 941) ( 58 36) ( 67 78)

( 69 138) ( 70 97) ( 71 1000) ( 72 58) ( 81 88)

( 82 119) ( 83 224) ( 84 65) ( 85 978) ( 86 61)

( 95 58) ( 96 190) ( 97 346) ( 98 71) ( 99 637)

(100 53) (109 12) (110 118) (111 336) (112 80)

(113 472) (114 35) (123 20) (124 136) (125 193)

(126 80) (127 349) (128 44) (137 19) (138 103)

(139 125) (140 68) (141 308) (142 37) (152 60)

(153 65) (154 56) (155 293) (156 24) (166 47)

(167 38) (168 55) (169 192) (170 30) (180 33)

(181 28) (182 60) (183 195) (184 27) (194 29)

(195 25) (196 43) (197 162) (208 18) (210 38)

(211 124) (222 15) (223 13) (224 29) (225 106)

(226 20) (238 35) (239 96) (252 30) (253 70)

(254 13) (266 31) (267 51) (280 21) (281 33)

(294 18) (295 28)

NAME:n-Tetracosane

COMMENT: RI=2400.0, 54.0818 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:2399.10

RI:2399.10

FORM:c24h50

CASNO:646-31-1

RT: 54.063

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 80

( 39 130) ( 41 417) ( 42 33) ( 43 347) ( 44 13)

( 53 6) ( 55 159) ( 56 79) ( 57 968) ( 58 38)

( 66 18) ( 67 79) ( 68 16) ( 69 132) ( 70 113)

( 71 1000) ( 72 53) ( 80 8) ( 81 75) ( 82 113)

( 83 217) ( 84 65) ( 85 898) ( 86 61) ( 95 43)

( 96 146) ( 97 285) ( 98 62) ( 99 505) (100 38)

(110 101) (111 232) (112 75) (113 382) (114 31)

(123 11) (124 87) (125 130) (126 68) (127 264)

(128 23) (137 9) (138 64) (139 75) (140 61)

(141 212) (142 22) (152 36) (153 37) (154 51)

(155 169) (156 23) (166 23) (167 23) (168 47)

(169 146) (170 19) (180 20) (182 42) (183 109)

(184 18) (194 15) (196 43) (197 92) (210 35)

(211 68) (212 13) (222 8) (224 30) (225 46)

(226 7) (238 19) (239 36) (240 7) (252 23)

(253 28) (266 20) (267 20) (280 23) (281 29)

NAME:n-Eicosane

COMMENT: RI=2000.0, 47.7294 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:2000.00

RI:2000.00

FORM:c20h42

CASNO:112-95-8

RT: 47.729

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 66

( 39 165) ( 40 9) ( 41 464) ( 42 35) ( 43 380)

( 44 12) ( 53 14) ( 55 153) ( 56 76) ( 57 987)

( 58 42) ( 65 4) ( 66 15) ( 67 74) ( 68 18)

( 69 139) ( 70 107) ( 71 1000) ( 72 57) ( 80 4)

( 81 59) ( 82 100) ( 83 176) ( 84 73) ( 85 873)

( 86 54) ( 95 35) ( 96 131) ( 97 217) ( 98 62)

( 99 424) (100 29) (110 83) (111 163) (112 65)

(113 284) (114 25) (124 56) (125 88) (126 65)

(127 183) (128 19) (138 30) (139 42) (140 57)

(141 151) (142 16) (152 19) (153 21) (154 60)

(155 100) (166 12) (168 37) (169 65) (182 39)

(183 44) (184 9) (196 36) (197 43) (210 31)

(211 36) (212 6) (224 24) (225 33) (239 20)

(281 10)

NAME:n-Octadecane

COMMENT: RI=1800.0, 43.6870 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1800.00

RI:1800.00

FORM:c18hh38

CASNO:593-45-3

RT: 43.687

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 69

( 39 165) ( 40 12) ( 41 476) ( 42 38) ( 43 415)

( 44 15) ( 53 8) ( 54 5) ( 55 151) ( 56 85)

( 57 1000) ( 58 39) ( 66 14) ( 67 70) ( 68 19)

( 69 137) ( 70 129) ( 71 978) ( 72 52) ( 81 47)

( 82 96) ( 83 162) ( 84 79) ( 85 776) ( 86 53)

( 95 20) ( 96 91) ( 97 194) ( 98 63) ( 99 357)

(100 29) (109 4) (110 57) (111 129) (112 67)

(113 218) (114 21) (123 5) (124 33) (125 61)

(126 54) (127 140) (128 11) (138 19) (139 24)

(140 54) (141 93) (142 11) (152 11) (153 11)

(154 45) (155 72) (156 9) (167 6) (168 41)

(169 56) (170 8) (182 29) (183 41) (184 6)

(196 32) (197 32) (198 6) (210 12) (211 16)

(225 8) (252 9) (253 20) (254 16)

NAME:n-Hexadecane

COMMENT: RI=1600.0, 39.2173 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1600.00

RI:1600.00

FORM:c16h34

CASNO:544-76-3

RT: 39.217

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 69

( 39 146) ( 40 10) ( 41 457) ( 42 36) ( 43 418)

( 44 11) ( 53 10) ( 54 4) ( 55 135) ( 56 99)

( 57 1000) ( 58 41) ( 65 4) ( 66 14) ( 67 65)

( 68 14) ( 69 126) ( 70 121) ( 71 880) ( 72 52)

( 73 2) ( 80 3) ( 81 32) ( 82 80) ( 83 141)

( 84 78) ( 85 712) ( 86 42) ( 95 12) ( 96 68)

( 97 147) ( 98 61) ( 99 281) (100 22) (109 3)

(110 37) (111 101) (112 56) (113 164) (114 15)

(120 1) (124 20) (125 42) (126 55) (127 107)

(128 11) (138 8) (139 9) (140 47) (141 81)

(142 9) (151 2) (152 5) (153 4) (154 33)

(155 60) (156 6) (166 2) (168 27) (169 42)

(170 5) (182 12) (183 21) (184 3) (196 5)

(197 7) (224 16) (225 23) (226 13)

NAME:n-Tetradecane

COMMENT: RI=1400.1, 34.1912 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1400.10

RI:1400.10

FORM:c14h30

CASNO:629-59-4

RT: 34.191

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 58

( 37 3) ( 39 184) ( 40 14) ( 41 557) ( 42 49)

( 43 475) ( 44 17) ( 53 8) ( 54 6) ( 55 149)

( 56 136) ( 57 1000) ( 58 39) ( 61 1) ( 65 4)

( 66 9) ( 67 60) ( 68 16) ( 69 133) ( 70 160)

( 71 881) ( 72 52) ( 73 1) ( 81 19) ( 82 84)

( 83 140) ( 84 86) ( 85 657) ( 86 47) ( 95 6)

( 96 55) ( 97 127) ( 98 68) ( 99 234) (100 15)

(110 19) (111 66) (112 74) (113 124) (114 11)

(118 1) (124 7) (125 16) (126 57) (127 89)

(128 8) (138 3) (139 5) (140 45) (141 62)

(142 7) (154 23) (155 26) (168 10) (169 8)

(196 17) (197 21) (198 19)

NAME:n-Dodecane

COMMENT: RI=1200.0, 28.4974 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1200.00

RI:1200.00

CASNO:112-40-3

RT: 28.497

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 55

( 37 3) ( 38 4) ( 39 250) ( 40 16) ( 41 682)

( 42 57) ( 43 504) ( 44 16) ( 53 13) ( 54 6)

( 55 170) ( 56 163) ( 57 1000) ( 58 39) ( 65 5)

( 66 4) ( 67 54) ( 68 13) ( 69 127) ( 70 183)

( 71 826) ( 72 48) ( 79 3) ( 80 1) ( 81 8)

( 82 73) ( 83 129) ( 84 85) ( 85 447) ( 86 32)

( 87 1) ( 96 21) ( 97 67) ( 98 87) ( 99 152)

(100 11) (101 1) (106 1) (110 6) (111 20)

(112 69) (113 92) (114 10) (115 1) (124 1)

(125 4) (126 43) (127 44) (128 4) (140 18)

(141 13) (168 19) (169 15) (170 18) (171 3)

NAME:n-Undecane

COMMENT: RI=1100.0, 25.3397 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1100.00

RI:1100.00

FORM:C11H24

CASNO:1120-21-4

RT: 25.340

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 42

( 37 3) ( 38 3) ( 39 271) ( 40 19) ( 41 735)

( 42 69) ( 43 471) ( 44 17) ( 53 13) ( 54 5)

( 55 175) ( 56 185) ( 57 1000) ( 58 42) ( 65 4)

( 67 36) ( 68 10) ( 69 139) ( 70 179) ( 71 688)

( 72 39) ( 81 4) ( 82 43) ( 83 93) ( 84 67)

( 85 328) ( 86 21) ( 93 1) ( 96 9) ( 97 38)

( 98 74) ( 99 110) (100 8) (111 5) (112 50)

(113 54) (114 5) (126 19) (127 11) (154 15)

(155 11) (156 13)

NAME:n-Decane

COMMENT: RI=1000.0, 21.9564 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:1000.00

RI:1000.00

FORM:c10h22

CASNO:124-18-5

RT: 21.956

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 39

( 37 3) ( 38 4) ( 39 287) ( 40 21) ( 41 767)

( 42 69) ( 43 457) ( 44 15) ( 51 3) ( 53 13)

( 54 6) ( 55 180) ( 56 200) ( 57 1000) ( 58 40)

( 65 4) ( 67 23) ( 68 9) ( 69 131) ( 70 152)

( 71 485) ( 72 29) ( 81 2) ( 82 22) ( 83 61)

( 84 63) ( 85 222) ( 86 14) ( 96 2) ( 97 8)

( 98 59) ( 99 77) (100 6) (111 3) (112 24)

(113 15) (140 13) (141 8) (142 8)

NAME:n-Nonane

COMMENT: RI=900.0, 18.2714 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:900.00

RI:900.00

FORM:C9H20

CASNO:111-84-2

RT: 18.271

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 35

( 37 6) ( 38 8) ( 39 380) ( 40 29) ( 41 889)

( 42 86) ( 43 452) ( 44 16) ( 51 4) ( 53 14)

( 54 6) ( 55 197) ( 56 212) ( 57 1000) ( 58 41)

( 65 4) ( 67 11) ( 68 7) ( 69 136) ( 70 121)

( 71 154) ( 72 8) ( 79 2) ( 82 2) ( 83 15)

( 84 60) ( 85 223) ( 86 12) ( 97 4) ( 98 37)

( 99 26) (100 3) (126 9) (127 4) (128 4)

NAME:n-Octane

FORM:C8H18

CASNO:111-65-9

RI:800.10

RW:

RT:11.7642

COMMENT: RI=800.1, 14.3979 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:800.10

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 32

( 37 8) ( 38 10) ( 39 494) ( 40 31) ( 41 1000)

( 42 107) ( 43 716) ( 44 20) ( 51 6) ( 53 19)

( 54 8) ( 55 225) ( 56 237) ( 57 486) ( 58 21)

( 65 4) ( 66 1) ( 67 8) ( 68 2) ( 69 144)

( 70 49) ( 71 178) ( 72 10) ( 79 3) ( 82 2)

( 83 4) ( 84 87) ( 85 357) ( 86 22) (112 6)

(113 5) (114 3)

NAME:n-Heptane

FORM:C7H16

CASNO:142-82-5

RI:700.00

RW:

RT:8.1798

COMMENT: RI=700.0, 10.6902 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:700.00

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 27

( 37 12) ( 38 13) ( 39 582) ( 40 47) ( 41 1000)

( 42 144) ( 43 541) ( 44 19) ( 50 4) ( 51 8)

( 53 21) ( 54 9) ( 55 316) ( 56 144) ( 57 218)

( 58 10) ( 65 4) ( 67 5) ( 69 7) ( 70 228)

( 71 161) ( 72 7) ( 77 2) ( 85 8) ( 98 5)

( 99 6) (100 6)

NAME:n-Hexane

COMMENT: RI=600.0, 7.9518 min RI\_ALKANE\_270-300\_60MINHOLD\_240SF|RI:600.00

RI:600.00

FORM:C6H14

CASNO:110-54-3

RT: 7.952

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\6-36\_270-300.msl

NUM PEAKS: 24

( 37 16) ( 38 16) ( 39 583) ( 40 50) ( 41 1000)

( 42 67) ( 43 93) ( 44 3) ( 50 8) ( 51 8)

( 53 12) ( 54 2) ( 55 60) ( 56 274) ( 57 170)

( 58 7) ( 65 3) ( 67 3) ( 69 3) ( 70 3)

( 71 6) ( 84 2) ( 85 58) ( 86 4)

NAME:Octanoic acid, methyl ester (C8:0 Caprylic Acid ME)

COMMENT: RI=1136.8, 26.0230 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1136.8

RI:1136.8

FORM:C9H18O2

CASNO:111-11-5

RT: 26.023

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 42

( 38 12) ( 39 306) ( 41 345) ( 42 46) ( 43 1000)

( 45 42) ( 53 27) ( 54 6) ( 55 612) ( 56 52)

( 57 302) ( 59 187) ( 61 2) ( 65 11) ( 67 110)

( 68 11) ( 69 123) ( 73 62) ( 74 548) ( 75 96)

( 76 5) ( 79 29) ( 80 30) ( 82 11) ( 83 82)

( 84 44) ( 87 524) ( 88 42) ( 97 28) ( 98 11)

(101 285) (102 14) (109 60) (115 289) (116 23)

(127 154) (128 19) (129 109) (143 19) (144 3)

(145 3) (154 2)

NAME:Decanoic acid, methyl ester (C10 Capric Acid ME)

COMMENT: RI=1334.0, 31.8244 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1334.0

RI:1334.0

FORM:C11H22O2

CASNO:110-42-9

RT: 31.824

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 48

( 39 266) ( 40 27) ( 41 293) ( 42 27) ( 43 1000)

( 44 27) ( 45 28) ( 53 26) ( 55 671) ( 56 45)

( 57 111) ( 59 107) ( 67 105) ( 68 22) ( 69 133)

( 70 25) ( 71 56) ( 73 78) ( 74 527) ( 75 105)

( 76 8) ( 79 41) ( 81 173) ( 83 152) ( 84 56)

( 85 46) ( 87 620) ( 88 58) ( 89 7) ( 95 137)

( 96 19) ( 97 67) ( 98 35) (101 365) (115 114)

(116 15) (129 328) (130 35) (137 28) (143 919)

(144 89) (155 179) (157 275) (158 22) (171 6)

(186 29) (188 6) (216 2)

NAME:Undecanoic acid, methyl ester (C11:0)

COMMENT: RI=1432.0, 34.5045 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1432.0

RI:1432.0

FORM:C12H24O2

CASNO:1731-86-8

RT: 34.505

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 50

( 39 289) ( 41 363) ( 42 48) ( 43 1000) ( 44 27)

( 45 31) ( 54 10) ( 55 756) ( 56 50) ( 57 150)

( 59 85) ( 65 21) ( 67 113) ( 69 214) ( 70 29)

( 73 80) ( 74 593) ( 75 140) ( 77 15) ( 79 31)

( 81 110) ( 82 32) ( 83 186) ( 84 61) ( 85 40)

( 87 734) ( 88 72) ( 95 252) ( 96 38) ( 97 127)

( 98 59) (101 576) (102 53) (107 21) (109 79)

(110 9) (111 30) (115 258) (116 19) (129 374)

(130 26) (143 932) (144 77) (157 739) (158 88)

(169 239) (170 32) (171 268) (172 28) (200 85)

NAME:Dodecanoic acid, methyl ester (C12 Lauric Acid ME)

COMMENT: RI=1531.6, 37.0055 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1531.6

RI:1531.6

FORM:C13H26O2

CASNO:111-82-0

RT: 37.005

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 73

( 38 8) ( 39 259) ( 41 366) ( 43 708) ( 45 28)

( 53 39) ( 55 598) ( 57 91) ( 59 55) ( 65 11)

( 67 136) ( 69 229) ( 70 34) ( 71 21) ( 73 76)

( 74 412) ( 75 148) ( 76 6) ( 77 9) ( 79 54)

( 81 102) ( 83 248) ( 84 49) ( 87 833) ( 93 34)

( 95 191) ( 96 37) ( 97 111) ( 98 50) ( 99 12)

(102 59) (103 5) (105 3) (107 23) (108 3)

(110 24) (112 23) (115 400) (117 5) (119 1)

(122 3) (124 6) (126 4) (127 1) (129 328)

(130 53) (133 1) (143 1000) (144 95) (145 8)

(146 1) (149 6) (151 1) (154 1) (157 379)

(164 2) (165 17) (166 2) (167 2) (171 789)

(172 109) (173 13) (175 1) (181 5) (183 198)

(185 288) (186 53) (187 6) (199 7) (213 1)

(214 139) (215 33) (267 2)

NAME:Tridecanoic acid, methyl ester (C13:0)

COMMENT: RI=1629.1, 39.3736 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1629.1

RI:1629.1

FORM:C14H28O2

CASNO:1731-88-0

RT: 39.374

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 59

( 39 257) ( 41 328) ( 42 30) ( 43 745) ( 44 18)

( 45 21) ( 53 29) ( 55 637) ( 56 38) ( 57 113)

( 59 89) ( 67 101) ( 69 198) ( 71 53) ( 73 65)

( 74 441) ( 75 135) ( 76 9) ( 79 44) ( 81 92)

( 82 29) ( 83 190) ( 84 60) ( 85 34) ( 87 638)

( 88 77) ( 93 42) ( 95 120) ( 96 29) ( 97 158)

( 98 60) (101 405) (107 32) (109 79) (111 54)

(115 208) (116 44) (123 78) (124 14) (129 572)

(130 81) (143 1000) (144 108) (149 14) (153 8)

(157 374) (158 42) (171 333) (172 48) (177 15)

(179 13) (185 840) (186 112) (197 202) (198 25)

(199 400) (200 50) (228 157) (229 33)

NAME:9-Tetradecenoic acid, methyl ester, (9Z) (C14:1 Myristoleic acid methyl ester)

COMMENT: RI=1720.9, 41.4237 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1720.9

RI:1720.9

FORM:C15H28O2

CASNO:56219-06-8

RT: 41.424

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 92

( 39 541) ( 40 24) ( 41 534) ( 42 44) ( 43 363)

( 45 30) ( 53 110) ( 54 70) ( 55 1000) ( 56 75)

( 57 105) ( 59 93) ( 65 80) ( 66 57) ( 67 788)

( 68 273) ( 69 546) ( 70 56) ( 71 50) ( 72 12)

( 73 62) ( 74 130) ( 77 37) ( 78 56) ( 79 305)

( 80 134) ( 81 623) ( 82 375) ( 83 560) ( 84 405)

( 85 133) ( 87 301) ( 88 31) ( 91 142) ( 92 44)

( 93 176) ( 94 132) ( 95 583) ( 96 759) ( 97 524)

( 98 556) ( 99 96) (101 134) (105 107) (107 129)

(108 117) (109 293) (110 352) (111 307) (112 177)

(113 89) (115 49) (119 238) (120 69) (121 220)

(122 65) (123 296) (124 290) (125 123) (127 85)

(128 22) (129 46) (133 154) (134 234) (135 174)

(137 276) (138 126) (139 59) (141 258) (143 42)

(147 111) (148 209) (149 81) (151 175) (152 174)

(155 34) (157 35) (161 60) (164 178) (165 154)

(166 302) (167 60) (175 23) (179 125) (190 215)

(191 103) (197 66) (208 364) (209 269) (210 41)

(222 19) (241 23)

NAME:Tetradecenoic acid, ME (C14:0 Myristic acid, methyl ester)

COMMENT: RI=1730.6, 41.6408 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1730.6

RI:1730.6

FORM:C15H30O2

CASNO:5129-58-8

RT: 41.641

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 61

( 39 185) ( 41 243) ( 42 20) ( 43 546) ( 44 22)

( 45 16) ( 53 26) ( 55 496) ( 56 29) ( 57 91)

( 59 46) ( 67 90) ( 69 146) ( 70 22) ( 71 34)

( 73 58) ( 74 352) ( 75 124) ( 76 5) ( 79 31)

( 81 101) ( 82 21) ( 83 147) ( 85 23) ( 87 541)

( 88 67) ( 93 41) ( 95 94) ( 96 17) ( 97 115)

( 98 56) (101 407) (102 47) (109 68) (111 75)

(112 22) (115 127) (116 31) (121 24) (123 45)

(125 20) (129 291) (130 80) (135 16) (143 1000)

(144 104) (149 12) (157 434) (158 58) (171 247)

(172 35) (185 380) (186 54) (199 742) (200 98)

(211 148) (212 15) (213 201) (214 27) (242 164)

(243 35)

NAME:10-Pentadecenoic acid, methyl ester, (10Z) (15:1)

COMMENT: RI=1820.1, 43.5978 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1820.1

RI:1820.1

CASNO:90176-52-6

RT: 43.598

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 88

( 39 417) ( 41 457) ( 42 46) ( 43 330) ( 45 27)

( 53 101) ( 54 58) ( 55 1000) ( 56 94) ( 57 134)

( 59 75) ( 65 77) ( 66 37) ( 67 791) ( 68 246)

( 69 410) ( 70 66) ( 71 40) ( 73 44) ( 74 113)

( 75 21) ( 77 41) ( 79 285) ( 80 123) ( 81 719)

( 82 462) ( 83 583) ( 84 405) ( 85 83) ( 87 262)

( 91 123) ( 93 180) ( 94 141) ( 95 515) ( 96 690)

( 97 541) ( 98 695) ( 99 91) (101 90) (105 83)

(107 142) (108 131) (109 325) (110 358) (111 250)

(112 165) (113 58) (115 65) (118 21) (119 170)

(121 221) (123 355) (124 242) (125 161) (126 46)

(127 62) (129 44) (133 154) (134 243) (135 265)

(137 257) (138 278) (139 85) (141 271) (143 36)

(147 83) (148 247) (149 163) (151 194) (152 182)

(153 64) (158 30) (161 107) (162 71) (163 33)

(165 131) (166 100) (175 72) (178 165) (179 127)

(180 235) (181 54) (193 103) (204 147) (205 83)

(222 377) (223 168) (254 57)

NAME:Pentadecanoic acid, methyl ester (C15:0)

COMMENT: RI=1829.9, 43.7951 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1829.9

RI:1829.9

FORM:C16H32O2

CASNO:7132-64-1

RT: 43.795

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 64

( 39 189) ( 41 320) ( 42 20) ( 43 677) ( 44 12)

( 53 25) ( 55 532) ( 56 49) ( 57 119) ( 58 8)

( 59 69) ( 66 7) ( 67 111) ( 69 202) ( 71 49)

( 73 72) ( 74 363) ( 75 128) ( 79 49) ( 81 133)

( 82 25) ( 83 215) ( 84 49) ( 85 27) ( 87 636)

( 88 99) ( 93 60) ( 95 120) ( 97 154) ( 98 47)

(101 546) (102 54) (107 33) (109 73) (111 94)

(115 194) (116 53) (121 37) (123 60) (125 36)

(129 279) (130 90) (135 30) (137 29) (139 13)

(143 1000) (144 161) (145 16) (151 18) (157 829)

(158 109) (171 463) (172 62) (185 406) (186 56)

(199 556) (200 78) (213 711) (214 95) (225 137)

(226 29) (227 175) (256 235) (257 54)

NAME:9-Hexadecenoic acid, methyl ester, (Z)- (C16:1 Palmitoleic acid ME)

COMMENT: RI=1914.0, 45.4949 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1914.0

RI:1914.0

FORM:C17H32O2

CASNO:1120-25-8

RT: 45.495

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 100

( 39 453) ( 40 17) ( 41 508) ( 43 288) ( 53 114)

( 54 51) ( 55 1000) ( 56 116) ( 57 134) ( 59 58)

( 65 98) ( 66 57) ( 67 780) ( 68 272) ( 69 572)

( 70 66) ( 71 68) ( 73 57) ( 74 112) ( 77 40)

( 78 50) ( 79 308) ( 80 127) ( 81 788) ( 82 444)

( 83 665) ( 84 428) ( 85 99) ( 87 232) ( 88 23)

( 91 139) ( 92 52) ( 93 191) ( 94 131) ( 95 591)

( 96 858) ( 97 637) ( 98 763) ( 99 95) (101 93)

(105 112) (107 162) (108 167) (109 317) (110 431)

(111 384) (112 256) (113 84) (115 53) (119 180)

(120 93) (121 239) (122 96) (123 369) (124 300)

(125 163) (127 95) (129 40) (133 226) (134 297)

(135 211) (136 95) (137 323) (138 308) (139 118)

(141 310) (142 37) (143 66) (147 110) (148 267)

(149 130) (150 46) (151 204) (152 397) (153 98)

(155 61) (161 74) (162 71) (163 61) (165 130)

(166 119) (169 23) (171 32) (175 86) (179 107)

(180 57) (185 45) (186 26) (189 42) (192 203)

(193 181) (194 303) (195 61) (207 112) (211 17)

(218 123) (219 70) (236 379) (237 312) (268 79)

NAME:Hexadecanoic acid, methyl ester (C16:0 Palmitic acid, methyl ester)

COMMENT: RI=1931.8, 45.8536 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:1931.8

RI:1931.8

FORM:C17H34O2

CASNO:112-39-0

RT: 45.854

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 234) ( 41 394) ( 42 24) ( 43 755) ( 44 24)

( 45 18) ( 53 28) ( 55 624) ( 56 46) ( 57 116)

( 59 73) ( 65 13) ( 67 129) ( 68 20) ( 69 230)

( 70 26) ( 71 44) ( 73 88) ( 74 454) ( 75 169)

( 79 44) ( 81 141) ( 82 43) ( 83 236) ( 84 55)

( 87 713) ( 88 72) ( 93 51) ( 95 127) ( 96 31)

( 97 172) ( 98 55) ( 99 13) (101 550) (102 96)

(107 36) (109 91) (110 24) (111 82) (115 308)

(116 59) (121 51) (123 47) (125 42) (129 532)

(130 102) (135 32) (139 29) (143 1000) (144 135)

(149 25) (157 509) (158 110) (167 11) (171 747)

(172 145) (185 643) (186 101) (199 592) (200 93)

(213 348) (214 50) (227 716) (228 104) (239 125)

(241 220) (242 28) (270 310) (271 56)

NAME:10-Heptadecenoic acid, methyl ester, (Z)- (9CI) (C17:1)

COMMENT: RI=2015.7, 47.4851 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2015.7

RI:2015.7

FORM:C18H34O2

CASNO:75190-82-8

RT: 47.485

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 99

( 39 433) ( 41 551) ( 42 58) ( 43 336) ( 45 20)

( 53 79) ( 54 66) ( 55 1000) ( 56 96) ( 57 171)

( 59 65) ( 65 63) ( 66 71) ( 67 767) ( 68 257)

( 69 567) ( 70 95) ( 71 64) ( 73 40) ( 74 125)

( 75 20) ( 77 47) ( 78 39) ( 79 313) ( 80 122)

( 81 748) ( 82 441) ( 83 627) ( 84 447) ( 85 120)

( 87 230) ( 91 124) ( 92 41) ( 93 225) ( 94 174)

( 95 672) ( 96 812) ( 97 688) ( 98 751) ( 99 78)

(101 97) (105 112) (106 43) (107 171) (108 139)

(109 265) (110 405) (111 402) (112 239) (113 61)

(115 54) (118 38) (119 208) (120 94) (121 293)

(122 113) (123 323) (124 263) (125 200) (126 52)

(127 69) (133 208) (134 302) (135 262) (136 114)

(137 316) (138 280) (139 118) (141 269) (143 83)

(147 130) (148 333) (149 210) (150 78) (151 322)

(152 371) (153 95) (161 125) (162 85) (163 85)

(164 44) (165 187) (166 341) (167 95) (176 34)

(177 54) (179 120) (186 33) (193 94) (194 62)

(200 33) (206 145) (207 185) (208 311) (221 130)

(222 56) (232 102) (250 393) (251 188)

NAME:Heptadecanoic acid, methyl ester (C17 Margaric acid ME)

COMMENT: RI=2036.2, 47.8139 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2036.2

RI:2036.2

FORM:C18H36O2

CASNO:1731-92-6

RT: 47.814

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 157) ( 41 247) ( 42 26) ( 43 485) ( 44 28)

( 54 9) ( 55 435) ( 56 32) ( 57 101) ( 59 51)

( 67 102) ( 69 202) ( 70 20) ( 71 45) ( 73 52)

( 74 318) ( 75 144) ( 76 9) ( 79 37) ( 81 117)

( 83 183) ( 84 30) ( 85 29) ( 87 498) ( 88 58)

( 93 48) ( 95 109) ( 96 28) ( 97 166) ( 98 43)

(101 434) (102 43) (107 28) (109 62) (111 76)

(115 122) (116 53) (121 45) (123 47) (125 32)

(129 471) (130 103) (135 45) (137 35) (143 1000)

(144 111) (152 11) (157 397) (158 56) (163 13)

(165 12) (171 338) (172 81) (177 12) (181 7)

(185 716) (186 124) (199 591) (200 94) (213 243)

(214 39) (227 232) (228 41) (241 559) (242 96)

(253 81) (255 165) (284 212) (285 44)

NAME:6,9,12-Octadecatrienoic acid, methyl ester (C18:3n6)

COMMENT: RI=2105.6, 48.9303 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2105.6

RI:2105.6

FORM:C19H32O2

CASNO:2676-41-7

RT: 48.930

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 116

( 36 3) ( 39 183) ( 40 10) ( 41 82) ( 43 82)

( 44 2) ( 45 14) ( 52 3) ( 53 66) ( 55 53)

( 57 74) ( 65 160) ( 66 21) ( 67 266) ( 68 55)

( 71 31) ( 74 82) ( 77 300) ( 79 1000) ( 80 87)

( 81 275) ( 82 6) ( 83 14) ( 84 57) ( 85 15)

( 87 102) ( 91 566) ( 92 142) ( 93 229) ( 94 510)

( 95 352) ( 96 104) ( 97 55) ( 98 20) ( 99 19)

(100 3) (101 102) (103 35) (104 37) (105 267)

(106 10) (107 324) (108 141) (109 73) (110 37)

(111 24) (116 19) (117 79) (119 203) (120 186)

(121 392) (122 31) (123 52) (127 13) (129 133)

(130 60) (131 87) (132 57) (133 160) (134 163)

(135 288) (136 73) (138 9) (139 11) (141 20)

(143 31) (144 86) (145 15) (147 41) (149 110)

(150 183) (151 53) (155 10) (157 162) (161 49)

(162 114) (163 133) (164 111) (165 42) (167 9)

(171 110) (174 5) (177 48) (179 2) (181 22)

(188 6) (189 123) (190 27) (191 78) (193 20)

(195 19) (197 2) (201 7) (205 11) (207 84)

(208 35) (209 24) (213 7) (216 14) (218 74)

(222 30) (223 20) (231 12) (233 7) (236 19)

(237 2) (242 7) (243 17) (249 15) (251 8)

(260 8) (261 1) (263 18) (264 12) (265 1)

(287 4)

NAME:9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)-, methyl ester ? (C18:2n6c Linoleic acid ME))

COMMENT: RI=2123.3, 49.2139 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2123.3

RI:2123.3

FORM:C19H34O2

CASNO:112-63-0

RT: 49.214

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 93

( 39 209) ( 41 193) ( 43 61) ( 45 9) ( 53 42)

( 54 58) ( 55 279) ( 56 21) ( 57 42) ( 59 25)

( 65 113) ( 66 100) ( 67 1000) ( 68 194) ( 69 122)

( 77 116) ( 78 55) ( 79 506) ( 80 205) ( 81 991)

( 82 368) ( 83 134) ( 85 37) ( 91 156) ( 92 52)

( 93 265) ( 94 227) ( 95 606) ( 96 376) ( 97 112)

( 99 29) (104 32) (105 78) (106 36) (107 177)

(108 173) (109 265) (110 162) (111 79) (113 15)

(117 69) (119 56) (120 61) (121 314) (122 182)

(123 184) (124 160) (125 48) (129 22) (131 119)

(132 46) (133 90) (134 42) (135 302) (136 171)

(137 123) (138 127) (145 81) (147 53) (148 29)

(149 232) (150 249) (151 99) (152 67) (153 31)

(154 19) (159 55) (161 42) (163 152) (164 223)

(165 63) (166 54) (167 33) (168 44) (173 79)

(177 69) (178 156) (179 33) (181 32) (182 33)

(187 56) (189 23) (191 50) (195 23) (196 18)

(205 28) (206 29) (219 18) (220 39) (233 14)

(262 197) (263 75) (264 20)

NAME:9-Octadecenoic acid (Z)-, methyl ester ? (C18:1n9c Oleic acid, methyl ester)

COMMENT: RI=2128.8, 49.3023 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2128.8

RI:2128.8

FORM:C19H36O2

CASNO:112-62-9

RT: 49.302

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 82

( 39 522) ( 40 20) ( 41 604) ( 43 376) ( 54 94)

( 55 935) ( 56 132) ( 57 213) ( 67 924) ( 68 351)

( 69 481) ( 71 97) ( 74 73) ( 79 397) ( 80 186)

( 81 1000) ( 82 610) ( 83 606) ( 84 411) ( 85 118)

( 87 230) ( 91 119) ( 93 251) ( 95 836) ( 96 915)

( 97 759) ( 98 724) ( 99 98) (101 96) (105 114)

(107 181) (109 351) (110 531) (111 413) (112 215)

(113 87) (115 66) (120 140) (121 322) (122 149)

(123 361) (124 336) (125 208) (126 56) (127 69)

(129 43) (133 207) (134 295) (135 352) (137 363)

(138 318) (139 121) (141 231) (142 40) (147 186)

(150 150) (151 330) (152 324) (154 38) (155 73)

(161 145) (163 153) (166 304) (167 76) (171 51)

(175 85) (179 134) (193 94) (200 40) (208 116)

(220 177) (221 171) (222 302) (223 88) (241 10)

(246 92) (248 17) (249 47) (253 65) (264 381)

(265 224) (296 104)

NAME:9-Octadecenoic acid, methyl ester, (E)- ? (C18:1n9t Elaidic acid, methyl ester)

COMMENT: RI=2133.5, 49.3772 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2133.5

RI:2133.5

FORM:C19H36O2

CASNO:1937-62-8

RT: 49.377

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 98

( 39 565) ( 41 702) ( 43 329) ( 53 117) ( 54 74)

( 55 1000) ( 56 115) ( 57 185) ( 59 75) ( 65 138)

( 67 948) ( 68 249) ( 69 582) ( 70 99) ( 74 110)

( 75 34) ( 81 974) ( 82 506) ( 83 565) ( 84 446)

( 85 155) ( 87 279) ( 92 125) ( 93 589) ( 94 434)

( 95 883) ( 96 894) ( 97 708) ( 98 765) ( 99 103)

(101 135) (105 251) (107 381) (108 339) (109 407)

(110 470) (111 463) (112 254) (113 66) (115 92)

(119 312) (120 165) (121 411) (122 313) (123 473)

(124 329) (125 191) (126 50) (127 75) (128 30)

(130 49) (133 237) (134 386) (135 514) (137 354)

(138 262) (139 143) (140 49) (141 242) (143 169)

(147 156) (148 350) (149 311) (151 347) (152 302)

(161 196) (162 124) (165 181) (166 272) (167 89)

(169 67) (175 130) (176 85) (177 143) (179 134)

(180 237) (181 81) (185 65) (186 35) (189 132)

(192 43) (193 107) (194 104) (208 92) (213 66)

(214 40) (220 128) (221 212) (222 277) (223 78)

(235 154) (246 115) (247 42) (249 54) (264 439)

(265 202) (266 35) (296 80)

NAME:Octadecanoic acid, methyl ester (C18:0 Stearic acid, methyl ester)

COMMENT: RI=2154.3, 49.7117 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2154.3

RI:2154.3

FORM:C19H38O2

CASNO:C19H38O2

RT: 49.712

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 62

( 39 144) ( 41 280) ( 42 21) ( 43 506) ( 45 16)

( 55 403) ( 56 37) ( 57 99) ( 67 85) ( 69 187)

( 71 41) ( 73 46) ( 74 287) ( 75 162) ( 79 45)

( 81 128) ( 82 31) ( 83 183) ( 84 44) ( 85 43)

( 87 548) ( 88 63) ( 93 45) ( 95 89) ( 96 38)

( 97 163) ( 98 54) (101 416) (102 44) (108 10)

(109 71) (111 86) (115 140) (116 41) (121 52)

(123 60) (125 34) (129 277) (130 125) (135 46)

(137 32) (143 1000) (144 157) (157 390) (158 77)

(171 260) (172 80) (185 400) (186 120) (199 902)

(200 130) (213 378) (214 71) (227 204) (228 41)

(241 225) (242 45) (255 489) (267 55) (269 99)

(270 30) (298 286)

NAME:5,8,11,14-Eicosatetraenoic acid, methyl ester, (all-Z)- (C20:4n6)

COMMENT: RI=2299.1, 52.0393 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2299.1

RI:2299.1

FORM:C22H36O2

CASNO:2566-89-4

RT: 52.039

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 96

( 39 180) ( 41 178) ( 43 79) ( 51 32) ( 55 119)

( 57 54) ( 59 31) ( 65 173) ( 66 111) ( 67 345)

( 68 37) ( 69 43) ( 74 58) ( 77 346) ( 78 280)

( 79 1000) ( 80 466) ( 81 313) ( 82 90) ( 83 40)

( 84 25) ( 85 44) ( 87 61) ( 88 57) ( 91 924)

( 92 215) ( 93 479) ( 94 262) ( 95 194) ( 96 72)

( 97 27) (101 18) (103 44) (104 79) (105 482)

(106 280) (107 197) (108 68) (109 65) (115 79)

(117 240) (118 64) (119 405) (120 249) (121 232)

(122 41) (123 31) (124 19) (128 13) (129 133)

(130 113) (131 232) (133 398) (134 178) (135 149)

(136 75) (141 80) (142 34) (143 60) (145 170)

(146 98) (147 286) (148 107) (149 83) (150 95)

(157 104) (159 95) (160 69) (161 133) (162 68)

(164 40) (165 21) (166 19) (169 76) (171 48)

(173 119) (174 49) (175 192) (176 39) (180 32)

(183 119) (187 107) (188 38) (189 72) (190 29)

(197 52) (201 80) (203 134) (204 33) (211 29)

(215 45) (217 83) (229 21) (233 22) (244 19)

(247 22)

NAME:5,8,11,14,17-Eicosapentaenoic acid, methyl ester, (all-Z)- (C20:5n3)

COMMENT: RI=2305.5, 52.1427 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2305.5

RI:2305.5

FORM:C21H32O2

CASNO:2734-47-6

RT: 52.143

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 94

( 39 149) ( 41 128) ( 43 54) ( 51 24) ( 53 24)

( 54 8) ( 55 92) ( 57 15) ( 65 152) ( 66 72)

( 67 312) ( 69 35) ( 70 13) ( 77 291) ( 78 219)

( 79 821) ( 80 236) ( 81 171) ( 82 33) ( 83 33)

( 84 19) ( 85 18) ( 88 42) ( 91 1000) ( 92 189)

( 93 362) ( 94 148) ( 95 100) ( 98 15) (103 55)

(104 80) (105 493) (106 241) (107 142) (108 77)

(109 45) (115 67) (116 34) (117 358) (118 91)

(119 391) (120 177) (121 104) (122 42) (128 34)

(129 148) (130 89) (131 374) (132 114) (133 286)

(134 104) (135 76) (141 53) (142 18) (143 79)

(144 40) (145 226) (146 81) (147 185) (148 90)

(149 39) (150 13) (155 50) (156 20) (157 89)

(158 33) (159 152) (160 99) (161 113) (162 48)

(169 68) (170 27) (171 82) (173 136) (174 56)

(175 98) (176 22) (180 30) (181 48) (183 45)

(187 92) (188 39) (189 30) (197 65) (199 38)

(201 87) (213 35) (215 85) (220 15) (221 11)

(223 22) (237 38) (247 17) (287 8)

NAME:8,11,14-Eicosatrienoic acid, methyl ester, (Z,Z,Z)- (C20:3n6)

COMMENT: RI=2311.6, 52.2416 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2311.6

RI:2311.6

FORM:C21 H36 O2

CASNO:21061-10-9

RT: 52.242

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 81

( 39 142) ( 41 186) ( 42 9) ( 43 84) ( 53 29)

( 55 166) ( 65 144) ( 66 84) ( 67 563) ( 68 56)

( 69 79) ( 71 30) ( 77 220) ( 78 168) ( 79 1000)

( 80 457) ( 81 518) ( 82 110) ( 83 78) ( 85 65)

( 87 141) ( 91 389) ( 92 93) ( 93 515) ( 94 648)

( 95 379) ( 96 116) ( 97 62) ( 98 47) (101 82)

(103 22) (105 178) (106 78) (107 360) (108 334)

(109 137) (110 33) (111 37) (115 46) (117 188)

(118 43) (119 122) (120 57) (121 491) (122 217)

(123 49) (130 32) (131 138) (132 27) (133 179)

(134 88) (135 444) (136 185) (137 55) (139 8)

(143 108) (145 65) (146 43) (147 125) (148 104)

(149 256) (150 190) (151 43) (157 86) (158 25)

(159 102) (161 104) (162 56) (163 122) (164 115)

(172 29) (175 106) (178 82) (179 35) (185 88)

(189 71) (190 57) (191 51) (204 15) (217 26)

(222 67)

NAME:11,14-Eicosadienoic acid, methyl ester (C20:2)

COMMENT: RI=2325.9, 52.4710 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2325.9

RI:2325.9

FORM:C21H38O2

CASNO:2463-02-7

RT: 52.471

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 97

( 39 121) ( 41 163) ( 43 66) ( 51 5) ( 53 29)

( 54 42) ( 55 152) ( 59 18) ( 65 98) ( 66 84)

( 67 1000) ( 68 232) ( 77 69) ( 78 36) ( 79 351)

( 80 229) ( 81 942) ( 82 360) ( 83 70) ( 85 32)

( 91 94) ( 92 33) ( 93 135) ( 94 191) ( 95 628)

( 96 358) ( 97 84) ( 99 35) (104 23) (105 35)

(106 32) (107 121) (108 137) (109 241) (110 208)

(113 10) (117 54) (118 36) (119 34) (121 228)

(122 109) (123 186) (124 127) (125 76) (129 23)

(131 87) (132 58) (133 82) (135 308) (136 181)

(137 84) (138 128) (139 30) (143 38) (145 42)

(146 45) (147 45) (149 212) (150 258) (157 22)

(159 63) (160 26) (161 25) (163 135) (164 170)

(166 59) (167 25) (168 29) (171 27) (173 86)

(177 88) (178 131) (182 31) (183 17) (187 64)

(188 26) (189 18) (191 66) (192 98) (194 10)

(195 24) (205 33) (206 59) (210 13) (215 17)

(216 8) (220 21) (224 17) (229 11) (233 19)

(234 23) (243 12) (247 16) (261 12) (273 10)

(290 119) (291 69)

NAME:11-Eicosenoic acid ME (C20:1) ?

COMMENT: RI=2333.2, 52.5874 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2333.2

RI:2333.2

CASNO:37\_FAM~2-N1004

RT: 52.587

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 86

( 39 156) ( 41 151) ( 43 63) ( 51 9) ( 53 30)

( 55 171) ( 57 39) ( 59 13) ( 65 100) ( 66 46)

( 67 618) ( 68 45) ( 69 97) ( 70 11) ( 74 30)

( 77 158) ( 78 161) ( 79 1000) ( 80 319) ( 81 421)

( 82 76) ( 83 66) ( 87 72) ( 91 369) ( 92 73)

( 93 508) ( 94 363) ( 95 436) ( 96 53) ( 97 60)

(101 53) (105 167) (106 43) (107 295) (108 319)

(109 184) (110 42) (111 42) (115 31) (117 73)

(119 103) (121 412) (122 248) (123 103) (124 20)

(125 39) (129 41) (131 115) (132 51) (133 96)

(134 53) (135 390) (136 279) (137 73) (143 51)

(144 19) (145 100) (147 56) (148 31) (149 208)

(150 169) (151 58) (153 22) (157 44) (159 90)

(161 65) (163 119) (164 84) (171 71) (175 48)

(176 17) (177 60) (178 56) (180 9) (185 50)

(189 23) (191 37) (192 24) (201 63) (204 9)

(213 20) (219 23) (264 37) (277 20) (289 21)

(291 25)

NAME:Eicosanoic acid, methyl ester (20:0 Arachidic acid ME)

COMMENT: RI=2346.2, 52.7973 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2346.2

RI:2346.2

FORM:C21H42O2

CASNO:1120-28-1

RT: 52.797

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 73

( 39 182) ( 41 342) ( 42 28) ( 43 564) ( 44 29)

( 53 22) ( 55 513) ( 56 29) ( 57 143) ( 59 53)

( 67 120) ( 69 189) ( 71 51) ( 73 71) ( 74 290)

( 75 225) ( 79 71) ( 81 164) ( 83 230) ( 84 59)

( 85 59) ( 87 582) ( 88 85) ( 93 79) ( 95 151)

( 96 39) ( 97 184) ( 98 60) ( 99 26) (101 517)

(102 74) (107 54) (109 70) (110 28) (111 101)

(112 27) (115 209) (116 50) (121 58) (123 59)

(125 71) (129 418) (130 115) (135 57) (139 27)

(143 1000) (144 144) (149 50) (153 31) (154 20)

(157 384) (158 136) (171 572) (172 150) (177 22)

(185 647) (186 138) (199 701) (200 128) (201 15)

(213 358) (214 78) (227 581) (228 106) (241 437)

(242 63) (255 278) (256 67) (269 200) (277 21)

(283 528) (284 112) (297 109)

NAME:Heneicosanoic acid, methyl ester (C21:0)

COMMENT: RI=2429.4, 54.0906 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2429.4

RI:2429.4

FORM:C22H44O2

CASNO:6064-90-0

RT: 54.091

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 54

( 39 136) ( 40 12) ( 41 250) ( 43 423) ( 55 396)

( 57 125) ( 59 52) ( 67 106) ( 69 187) ( 70 23)

( 73 63) ( 74 249) ( 75 233) ( 79 45) ( 81 140)

( 83 183) ( 86 13) ( 88 57) ( 93 62) ( 95 148)

( 98 83) (101 406) (102 54) (107 43) (109 98)

(111 110) (116 66) (121 81) (125 65) (129 380)

(130 130) (135 62) (140 10) (143 1000) (144 130)

(157 355) (171 275) (172 95) (173 18) (185 574)

(186 138) (199 704) (200 117) (213 272) (228 71)

(241 547) (242 163) (255 359) (269 130) (270 28)

(283 146) (284 39) (297 428) (298 76)

NAME:4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic acid, methyl ester, (all-Z)- (C22:6n3)

COMMENT: RI=2465.2, 54.6132 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2465.2

RI:2465.2

FORM:C23H34O2

CASNO:2566-90-7

RT: 54.613

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 80

( 39 146) ( 41 125) ( 43 39) ( 55 81) ( 65 124)

( 66 81) ( 67 270) ( 74 64) ( 77 295) ( 78 210)

( 79 734) ( 80 175) ( 81 139) ( 85 43) ( 91 1000)

( 92 244) ( 93 314) ( 94 91) ( 95 70) (103 68)

(104 67) (105 439) (106 158) (107 127) (108 57)

(109 34) (115 80) (116 36) (117 471) (118 122)

(119 306) (120 126) (121 75) (128 59) (129 198)

(130 86) (131 386) (132 152) (133 272) (134 80)

(135 66) (141 73) (143 138) (144 63) (145 271)

(146 107) (147 117) (148 41) (155 50) (156 34)

(157 152) (158 47) (159 216) (160 60) (161 94)

(162 34) (167 45) (169 67) (170 27) (171 153)

(172 47) (173 127) (175 47) (181 65) (183 58)

(185 100) (186 40) (187 63) (188 30) (195 34)

(197 50) (199 86) (201 61) (212 11) (213 53)

(223 40) (224 14) (225 21) (239 18) (245 11)

NAME:C22:1n9/C22:2 FAME mix

COMMENT: RI=2500.9, 55.1331 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2500.9

RI:2500.9

CASNO:37\_FAM~2-N1002

RT: 55.133

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 72

( 39 323) ( 41 419) ( 43 240) ( 54 89) ( 55 769)

( 56 99) ( 57 201) ( 68 277) ( 69 503) ( 70 87)

( 71 88) ( 74 74) ( 83 584) ( 84 242) ( 85 122)

( 87 141) ( 93 242) ( 96 1000) ( 97 647) ( 98 487)

(101 87) (105 132) (107 252) (108 252) (109 491)

(110 577) (111 448) (112 190) (119 208) (120 90)

(121 428) (122 237) (123 423) (124 398) (125 247)

(127 63) (133 170) (134 248) (135 446) (136 270)

(137 327) (138 309) (139 151) (140 50) (141 226)

(147 160) (148 265) (151 310) (152 343) (153 126)

(161 114) (165 238) (166 252) (167 88) (175 94)

(179 123) (180 142) (189 65) (208 174) (209 57)

(221 146) (222 200) (223 65) (235 177) (236 184)

(250 77) (263 126) (264 85) (276 59) (277 145)

(278 172) (279 42)

NAME:Docosanoic acid, methyl ester (C22:0)

COMMENT: RI=2521.2, 55.4286 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2521.2

RI:2521.2

FORM:C23H46O2

CASNO:929-77-1

RT: 55.429

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 69

( 39 113) ( 41 236) ( 42 21) ( 43 435) ( 55 381)

( 56 36) ( 57 127) ( 59 48) ( 67 106) ( 68 23)

( 69 186) ( 70 21) ( 71 54) ( 74 245) ( 75 183)

( 79 47) ( 81 139) ( 82 27) ( 83 193) ( 84 55)

( 87 494) ( 88 58) ( 93 47) ( 95 131) ( 96 35)

( 97 166) ( 98 64) (101 381) (102 51) (107 47)

(109 98) (111 122) (112 20) (115 95) (121 66)

(123 59) (125 49) (127 11) (129 284) (130 123)

(135 79) (137 33) (139 47) (143 1000) (144 145)

(149 43) (151 30) (153 21) (157 382) (158 58)

(171 251) (172 76) (177 16) (185 421) (186 150)

(199 776) (200 144) (213 342) (214 91) (227 206)

(228 50) (241 282) (242 92) (255 454) (256 109)

(269 213) (270 40) (283 95) (297 145)

NAME:Tricosanoic acid (C23:0)

COMMENT: RI=2618.0, 56.8397 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2618.0

RI:2618.0

FORM:C23H46O2

CASNO:2433-96-7

RT: 56.840

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 62

( 39 130) ( 41 297) ( 42 18) ( 43 421) ( 55 444)

( 57 161) ( 59 40) ( 67 129) ( 69 209) ( 71 79)

( 74 264) ( 75 219) ( 79 53) ( 81 154) ( 82 38)

( 83 232) ( 85 63) ( 87 487) ( 93 59) ( 95 153)

( 96 39) ( 97 194) ( 98 102) ( 99 30) (101 516)

(102 56) (107 54) (109 86) (111 120) (112 29)

(115 164) (123 109) (125 62) (129 330) (130 141)

(137 40) (143 1000) (144 156) (149 60) (151 26)

(157 550) (158 135) (171 355) (172 133) (173 12)

(177 19) (185 446) (186 160) (199 782) (200 202)

(213 498) (214 111) (227 372) (228 82) (241 268)

(255 396) (256 92) (269 400) (270 87) (283 220)

(284 48) (297 154)

NAME:15-Tetracosenoic acid, methyl ester, (Z)- (C24:1 Nervonic Acid ME)

COMMENT: RI=2703.7, 58.0886 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2703.7

RI:2703.7

FORM:C25 H48 O2

CASNO:2733-88-2

RT: 58.089

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 100

( 39 305) ( 41 570) ( 43 290) ( 53 77) ( 55 984)

( 56 114) ( 57 306) ( 65 51) ( 67 641) ( 68 176)

( 69 698) ( 70 133) ( 71 140) ( 74 73) ( 79 173)

( 80 183) ( 81 865) ( 82 557) ( 83 730) ( 84 412)

( 85 121) ( 87 187) ( 91 71) ( 93 173) ( 94 361)

( 95 753) ( 96 1000) ( 97 819) ( 98 883) ( 99 152)

(101 107) (105 97) (107 236) (108 294) (109 474)

(110 531) (111 596) (112 244) (113 89) (119 211)

(120 104) (121 502) (122 251) (123 437) (124 426)

(125 387) (126 114) (127 114) (133 223) (134 390)

(135 518) (136 183) (137 350) (138 400) (139 247)

(141 323) (143 161) (147 171) (148 322) (149 341)

(150 110) (151 373) (152 605) (153 173) (155 80)

(161 171) (162 82) (163 234) (165 270) (166 385)

(167 159) (168 54) (175 146) (177 135) (179 216)

(180 162) (181 125) (189 87) (191 95) (193 143)

(194 245) (195 102) (199 86) (208 202) (218 30)

(221 204) (222 215) (235 233) (236 161) (237 59)

(248 48) (249 197) (250 223) (251 67) (263 219)

(264 214) (277 188) (278 141) (291 167) (292 113)

NAME:Tetracosanoic acid, methyl ester (C24:0 Lignoceric acid ME)

COMMENT: RI=2726.1, 58.4160 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2726.1

RI:2726.1

FORM:C25H50O2

CASNO:2442-49-1

RT: 58.416

SOURCE:C:\Program Files\NIST\270-300-3-36Cal-FAME.MSL

NUM PEAKS: 65

( 39 115) ( 41 279) ( 43 432) ( 55 379) ( 56 29)

( 57 148) ( 59 40) ( 67 108) ( 69 207) ( 71 69)

( 74 231) ( 75 202) ( 79 37) ( 81 178) ( 83 190)

( 84 41) ( 85 67) ( 87 475) ( 88 62) ( 93 65)

( 94 20) ( 95 162) ( 97 201) ( 98 102) ( 99 33)

(101 418) (102 49) (107 51) (108 17) (109 85)

(111 118) (115 159) (116 59) (121 68) (123 67)

(125 53) (129 357) (130 125) (135 83) (136 22)

(139 30) (143 1000) (144 136) (157 391) (158 99)

(171 385) (172 121) (185 516) (186 142) (199 706)

(200 128) (213 278) (214 87) (227 391) (228 120)

(241 353) (242 82) (255 331) (256 71) (269 190)

(270 60) (283 321) (284 71) (297 232) (298 60)

NAME:Naphthalene

COMMENT: RI=1201.9, 28.5517 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1201.90

RI:1201.90

FORM:C10H8

CASNO:91-20-3

RT: 28.552

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 35

( 38 2) ( 39 9) ( 50 22) ( 51 28) ( 52 3)

( 61 4) ( 62 12) ( 63 28) ( 64 8) ( 74 29)

( 75 36) ( 76 33) ( 77 32) ( 78 24) ( 85 2)

( 86 8) ( 87 13) ( 88 2) ( 89 3) ( 98 10)

( 99 5) (100 6) (101 17) (102 125) (103 12)

(125 6) (126 91) (127 135) (128 1000) (129 119)

(130 6) (190 1) (202 2) (203 1) (255 3)

NAME:Acenaphthylene

COMMENT: RI=1482.6, 36.2649 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1482.60

RI:1482.60

FORM:C12H8

CASNO:208-96-8

RT: 36.265

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 36

( 38 1) ( 39 7) ( 50 10) ( 51 4) ( 61 4)

( 62 8) ( 63 30) ( 74 21) ( 75 27) ( 76 39)

( 77 4) ( 85 3) ( 86 8) ( 87 13) ( 88 2)

( 98 13) ( 99 11) (100 6) (102 6) (110 4)

(111 5) (113 1) (120 1) (122 4) (123 4)

(124 4) (125 11) (126 26) (127 6) (146 1)

(149 20) (150 156) (151 204) (152 1000) (153 137)

(154 8)

NAME:Acenaphthene

COMMENT: RI=1516.1, 37.1079 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1516.10

RI:1516.10

FORM:C12H10

CASNO:83-32-9

RT: 37.108

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 45

( 39 8) ( 50 10) ( 51 7) ( 52 1) ( 61 2)

( 62 7) ( 63 35) ( 64 2) ( 74 15) ( 75 32)

( 76 86) ( 77 14) ( 78 3) ( 85 2) ( 86 7)

( 87 11) ( 88 3) ( 89 5) ( 98 7) ( 99 6)

(100 4) (101 4) (102 8) (111 3) (113 3)

(115 4) (123 2) (124 1) (125 6) (126 26)

(127 17) (128 9) (139 4) (140 1) (149 7)

(150 78) (151 150) (152 391) (153 1000) (154 931)

(155 119) (156 7) (215 1) (277 1) (290 2)

NAME:Fluorene

COMMENT: RI=1619.0, 39.6418 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1619.00

RI:1619.00

FORM:C13H10

CASNO:86-73-7

RT: 39.642

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 35

( 39 4) ( 50 5) ( 52 2) ( 62 7) ( 63 18)

( 65 2) ( 69 22) ( 74 9) ( 75 6) ( 76 4)

( 81 48) ( 82 62) ( 83 14) ( 86 11) ( 87 15)

( 88 4) ( 89 20) ( 98 6) (111 6) (113 19)

(114 3) (115 41) (116 5) (137 13) (138 8)

(139 65) (140 8) (161 10) (162 32) (163 177)

(164 175) (165 1000) (166 965) (167 123) (168 8)

NAME:Phenanthrene

COMMENT: RI=1834.6, 44.3867 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1834.60

RI:1834.60

CASNO:85-01-8

RT:44.387

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 25

( 62 7) ( 63 23) ( 74 12) ( 75 19) ( 76 52)

( 87 13) ( 88 24) ( 89 25) ( 98 7) ( 99 7)

(126 13) (128 5) (139 6) (149 13) (150 80)

(151 67) (152 216) (153 35) (174 25) (175 26)

(176 242) (177 122) (178 1000) (179 172) (180 14)

NAME:Anthracene

COMMENT: RI=1847.3, 44.6437 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:1847.30

RI:1847.30

FORM:C14H10

CASNO:120-12-7

RT:44.644

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 46

( 57 1) ( 62 7) ( 69 4) ( 71 2) ( 73 3)

( 74 7) ( 75 28) ( 76 51) ( 77 5) ( 79 2)

( 81 4) ( 88 14) ( 89 35) ( 93 1) ( 96 1)

( 98 6) ( 99 4) (102 3) (111 5) (113 4)

(123 7) (124 1) (125 9) (126 10) (127 3)

(128 3) (133 3) (139 4) (149 7) (150 59)

(151 69) (152 149) (153 11) (154 2) (163 5)

(174 14) (175 30) (176 191) (177 71) (178 1000)

(179 153) (180 7) (193 1) (195 1) (208 6)

(282 1)

NAME:Pyrene

COMMENT: RI=2134.0, 50.2184 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2134.00

RI:2134.00

FORM:C16H10

CASNO:129-00-0

RT:50.218

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 30

( 63 3) ( 74 7) ( 75 12) ( 86 4) ( 87 19)

( 88 33) ( 98 6) ( 99 19) (100 39) (101 42)

(111 4) (122 3) (123 3) (148 2) (149 10)

(150 25) (151 9) (152 11) (161 3) (174 36)

(175 19) (176 21) (197 3) (198 28) (199 44)

(200 235) (201 181) (202 1000) (203 187) (204 13)

NAME:Fluoranthene

COMMENT: RI=2197.5, 51.3402 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2197.50

RI:2197.50

FORM:C16H10

CASNO:206-44-0

RT: 51.340

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 33

( 39 2) ( 63 4) ( 73 3) ( 75 10) ( 81 1)

( 88 29) ( 99 18) (110 2) (122 4) (123 4)

(124 3) (133 2) (135 3) (147 1) (148 3)

(149 9) (150 12) (152 5) (161 3) (162 2)

(174 22) (175 16) (176 6) (187 3) (193 2)

(197 6) (200 216) (201 209) (202 1000) (203 179)

(204 18) (208 3) (281 1)

NAME:Chrysene

COMMENT: RI=2555.0, 56.1677 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2555.00

RI:2555.00

FORM:C18H12

CASNO:218-01-9

RT:56.168

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 26

( 88 18) (100 22) (101 43) (112 35) (113 60)

(114 46) (150 10) (152 7) (174 10) (176 10)

(187 9) (188 3) (198 9) (199 11) (200 48)

(201 23) (202 45) (203 9) (223 8) (224 74)

(225 57) (226 313) (227 98) (228 1000) (229 203)

(230 21)

NAME:Benzo[a]anthracene

COMMENT: RI=2567.8, 56.3481 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2567.80

RI:2567.80

FORM:C18H12

CASNO:56-55-3

RT:56.348

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 26

( 75 6) ( 87 12) ( 88 26) (100 23) (101 43)

(112 39) (113 70) (114 45) (174 11) (175 5)

(186 3) (187 9) (188 6) (198 11) (200 50)

(201 19) (202 62) (203 12) (222 6) (224 71)

(225 68) (226 358) (227 150) (228 1000) (229 215)

(230 20)

NAME:Benzo[b]fluoranthene

COMMENT: RI=2890.0, 61.9846 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2890.00

RI:2890.00

CASNO:DATA-N1002

RT: 61.985

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 24

(111 20) (112 47) (113 81) (123 13) (124 50)

(125 83) (126 93) (174 8) (198 11) (200 13)

(202 7) (222 20) (223 14) (224 51) (225 34)

(226 40) (227 11) (248 54) (249 45) (250 257)

(251 79) (252 1000) (253 226) (254 23)

NAME:Benzo[k]fluoranthene

COMMENT: RI=2898.7, 62.1643 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2898.70

RI:2898.70

FORM:C20H12

CASNO:207-08-9

RT:62.164

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 57

( 59 1) ( 67 1) ( 75 1) ( 77 4) ( 83 7)

( 85 1) ( 91 3) ( 97 2) ( 99 6) (100 18)

(101 8) (111 17) (112 25) (113 66) (117 2)

(123 11) (124 56) (125 76) (126 118) (134 1)

(145 1) (147 3) (150 7) (174 7) (177 5)

(178 3) (186 2) (195 1) (197 2) (200 4)

(201 9) (202 3) (203 2) (210 4) (211 4)

(212 3) (221 6) (222 4) (223 23) (224 49)

(225 29) (226 29) (227 8) (235 3) (237 5)

(246 5) (247 10) (248 53) (249 46) (250 271)

(251 77) (252 1000) (253 219) (254 21) (268 3)

(283 3) (296 1)

NAME:Benzo[a]pyrene

COMMENT: RI=2988.4, 64.3677 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:2988.40

RI:2988.40

FORM:C20H12

CASNO:50-32-8

RT:64.368

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 21

(111 24) (112 45) (113 106) (124 65) (125 93)

(126 102) (198 11) (201 5) (222 14) (224 49)

(225 33) (226 58) (246 10) (247 12) (248 61)

(249 40) (250 275) (251 92) (252 1000) (253 227)

(254 26)

NAME:Indeno[1,2,3-cd]pyrene

COMMENT: RI=3281.7, 74.8694 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:3281.70

RI:3281.70

FORM:C22H12

CASNO:193-39-5

RT: 74.869

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 13

(124 62) (125 65) (136 89) (137 162) (138 189)

(246 19) (248 37) (272 56) (273 39) (274 257)

(275 116) (276 1000) (277 283)

NAME:Dibenz[a,h]anthracene

COMMENT: RI=3288.7, 75.1783 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:3288.70

RI:3288.70

FORM:C22H14

CASNO:53-70-3

RT:75.178

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 94

( 39 3) ( 41 1) ( 45 1) ( 50 1) ( 63 3)

( 69 1) ( 70 1) ( 73 15) ( 75 3) ( 78 1)

( 79 1) ( 81 4) ( 82 1) ( 83 2) ( 90 1)

( 93 4) ( 96 4) (101 3) (106 3) (109 2)

(111 15) (113 76) (117 3) (118 4) (121 2)

(123 10) (124 73) (125 70) (126 64) (127 4)

(133 8) (137 47) (138 200) (139 199) (140 11)

(146 2) (148 2) (151 4) (153 1) (154 1)

(158 2) (162 3) (163 7) (165 4) (167 1)

(170 2) (176 4) (185 2) (187 10) (188 3)

(191 14) (192 4) (193 13) (197 4) (198 5)

(200 12) (203 1) (206 3) (207 73) (210 3)

(214 2) (215 1) (217 1) (219 1) (220 1)

(225 11) (226 15) (228 1) (235 7) (238 3)

(241 1) (245 1) (246 10) (247 10) (249 27)

(251 15) (255 1) (260 1) (261 10) (262 5)

(263 17) (264 5) (265 5) (268 3) (270 4)

(271 3) (272 23) (273 12) (275 69) (276 285)

(277 144) (278 1000) (279 213) (280 63)

NAME:Benzo[ghi]perylene

COMMENT: RI=3347.0, 78.2354 min POLY\_NUCLEAR\_AROFUNC\_300\_35MIN\_30SF|RI:3347.00

RI:3347.00

FORM:C22H12

CASNO:191-24-2

RT:78.235

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS32\270-300-PAC.msl

NUM PEAKS: 48

( 44 11) ( 45 4) ( 46 1) ( 65 1) ( 69 2)

( 70 1) ( 78 3) ( 83 3) ( 84 2) ( 92 2)

( 93 1) ( 95 3) (113 5) (124 28) (135 27)

(137 150) (138 181) (148 6) (151 3) (154 1)

(157 2) (161 3) (164 3) (165 6) (166 2)

(173 2) (198 5) (213 1) (225 7) (232 1)

(235 3) (239 1) (246 14) (247 14) (255 3)

(260 2) (266 4) (270 20) (271 17) (273 62)

(274 196) (275 83) (276 1000) (278 56) (280 4)

(283 11) (293 2) (297 3)

COMMENT: RI=836.9, 14.9129 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM1\_LITTER|RI:836.90

RI:836.90

FORM:C5H11NO2

CASNO:7148-06-3

RT:14.913

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 16

( 40 7) ( 41 9) ( 42 134) ( 43 41) ( 44 15)

( 45 13) ( 56 31) ( 57 17) ( 58 1000) ( 59 30)

( 72 10) ( 88 7) (100 5) (116 3) (117 105)

(118 10)

NAME:Methylglyoxal

COMMENT: RI=671.5, 8.6372 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:671.50

RI:671.50

FORM:C3H4O2

CASNO:78988

RT: 8.637

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 27

( 36 2) ( 38 8) ( 40 4) ( 41 23) ( 42 60)

( 43 1000) ( 44 19) ( 45 183) ( 46 5) ( 47 1)

( 51 2) ( 55 8) ( 56 7) ( 57 13) ( 58 10)

( 59 2) ( 70 1) ( 71 3) ( 73 3) ( 74 9)

( 75 27) ( 83 2) ( 91 3) ( 93 1) (117 1)

(119 2) (137 1)

NAME:Pentanoic acid, 4-oxo-, methyl ester

COMMENT: RI=992.5, 20.9268 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:992.50

RI:992.50

FORM:C6H10O3

CASNO:624453

RT: 20.927

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 16

( 43 734) ( 55 199) ( 57 219) ( 58 27) ( 59 81)

( 68 63) ( 71 317) ( 87 202) ( 88 166) ( 97 114)

( 98 686) ( 99 607) (100 46) (115 1000) (116 73)

(130 91)

NAME:Maltol

COMMENT: RI=1127.2, 25.4809 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:1127.20

RI:1127.20

FORM:C6H6O3

CASNO:118718

RT: 25.481

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 41

( 38 3) ( 39 23) ( 41 48) ( 42 14) ( 43 94)

( 45 6) ( 52 18) ( 53 16) ( 54 6) ( 55 50)

( 56 14) ( 59 3) ( 68 7) ( 69 43) ( 70 17)

( 71 152) ( 73 4) ( 90 1) ( 95 11) ( 97 99)

( 98 56) (101 8) (109 6) (111 34) (112 32)

(119 9) (125 12) (126 1000) (127 90) (128 11)

(134 11) (138 3) (139 8) (141 4) (144 25)

(145 2) (148 2) (150 1) (154 7) (156 3)

(269 2)

NAME:Benzenepropanoic acid, 4-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1549.0, 37.2146 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:1549.00

RI:1549.00

FORM:C11H14O3

CASNO:15823048

RT: 37.215

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 25

( 63 7) ( 65 28) ( 77 100) ( 78 37) ( 79 23)

( 89 10) ( 90 7) ( 91 146) ( 92 22) (103 30)

(104 21) (105 35) (106 17) (119 67) (120 24)

(121 1000) (122 111) (132 16) (133 18) (134 332)

(151 29) (166 25) (194 170) (195 23) (210 5)

NAME:4-Hexylanisole

COMMENT: RI=1626.2, 39.6049 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:1626.20

RI:1626.20

FORM:C13H20O

CASNO:81693803

RT: 39.605

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 49

( 39 3) ( 45 8) ( 47 2) ( 51 8) ( 52 4)

( 53 2) ( 55 3) ( 62 1) ( 63 4) ( 64 1)

( 65 16) ( 75 7) ( 76 2) ( 77 78) ( 78 23)

( 79 18) ( 89 11) ( 90 10) ( 91 85) ( 92 14)

( 93 6) (103 19) (105 46) (106 11) (107 8)

(108 4) (115 5) (118 15) (119 13) (120 7)

(121 1000) (122 92) (123 9) (131 3) (132 4)

(133 20) (134 15) (135 60) (136 8) (147 4)

(149 5) (150 7) (151 7) (161 29) (165 55)

(166 5) (192 237) (193 31) (224 17)

NAME:9,12,15-Octadecatrienal, dimethyl acetal

COMMENT: RI=2465.3, 53.9070 min JN\_OLAA\_OLAPA1\_ROOTS|RI:2465.30

RI:2465.30

FORM:C20H36O2

CASNO:26574389

RT: 53.907

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 161

( 39 143) ( 41 266) ( 43 250) ( 44 17) ( 45 13)

( 53 31) ( 54 51) ( 55 252) ( 56 76) ( 57 127)

( 65 30) ( 66 62) ( 67 389) ( 69 254) ( 71 73)

( 73 32) ( 78 44) ( 79 396) ( 80 330) ( 81 942)

( 82 261) ( 83 433) ( 84 111) ( 85 132) ( 89 17)

( 91 192) ( 92 184) ( 93 357) ( 94 645) ( 95 409)

( 96 253) ( 98 474) ( 99 116) (101 200) (102 12)

(104 102) (105 204) (106 169) (107 380) (108 434)

(109 165) (110 373) (111 264) (112 288) (114 6)

(118 54) (119 306) (120 382) (121 521) (122 350)

(123 221) (126 66) (127 21) (128 103) (129 86)

(131 179) (132 169) (133 537) (134 618) (135 735)

(136 404) (137 260) (140 124) (141 22) (142 75)

(143 45) (144 185) (145 305) (147 388) (148 744)

(149 540) (150 271) (151 240) (152 229) (153 126)

(154 47) (155 114) (157 77) (159 219) (160 49)

(161 466) (162 243) (163 371) (164 404) (165 490)

(166 155) (167 151) (168 63) (171 86) (173 93)

(174 115) (175 295) (176 229) (177 281) (178 200)

(180 180) (181 45) (182 148) (185 116) (186 101)

(187 113) (189 141) (190 42) (191 35) (193 105)

(195 151) (196 59) (197 80) (198 69) (199 54)

(200 36) (201 118) (202 40) (204 38) (205 89)

(206 51) (207 36) (208 29) (209 67) (210 68)

(211 107) (212 60) (213 49) (214 50) (216 62)

(219 134) (220 141) (221 76) (222 101) (223 21)

(224 40) (227 94) (229 71) (232 44) (234 133)

(235 28) (240 67) (241 112) (242 15) (247 66)

(248 255) (249 58) (253 36) (259 164) (260 21)

(261 17) (262 40) (263 62) (265 34) (266 24)

(267 8) (268 10) (270 12) (271 7) (276 1000)

(277 522) (278 69) (283 12) (285 20) (287 4)

(295 35)

NAME:Benzenepropanoic acid, 4-methoxy-, methyl ester

COMMENT: RI=1549.0, 37.2146 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:1549.00

RI:1549.00

FORM:C11H14O3

CASNO:15823048

RT: 37.215

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 25

( 63 7) ( 65 28) ( 77 100) ( 78 37) ( 79 23)

( 89 10) ( 90 7) ( 91 146) ( 92 22) (103 30)

(104 21) (105 35) (106 17) (119 67) (120 24)

(121 1000) (122 111) (132 16) (133 18) (134 332)

(151 29) (166 25) (194 170) (195 23) (210 5)

NAME:1-Naphthalenecarboxylic acid, 5-[2-(3-furanyl)ethyl]-3,4,4a,5,6,7,8,8a-octahydro-5,6,8a-trimethyl-, methyl ester, [4aS-(4aà,5à,6á,8aá)]-

COMMENT: RI=2507.8, 54.5699 min JN\_KOHALA\_OLAPA2\_LITTER|RI:2507.80

RI:2507.80

FORM:C21H30O3

CASNO:56630989

RT: 54.570

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 129

( 39 57) ( 41 46) ( 53 71) ( 54 12) ( 59 26)

( 63 4) ( 65 54) ( 66 9) ( 70 4) ( 71 17)

( 77 107) ( 79 247) ( 80 37) ( 81 245) ( 83 44)

( 85 17) ( 88 8) ( 91 264) ( 92 41) ( 93 146)

( 95 154) ( 96 313) ( 97 68) ( 98 20) (103 42)

(105 146) (107 465) (108 30) (109 117) (112 1)

(115 37) (117 69) (119 246) (120 24) (121 85)

(127 3) (128 17) (129 56) (130 25) (131 77)

(132 49) (133 200) (134 26) (135 74) (136 25)

(137 21) (138 6) (139 737) (140 100) (141 42)

(143 104) (144 22) (145 88) (147 240) (149 76)

(150 11) (151 218) (152 49) (153 26) (154 18)

(155 40) (157 119) (158 7) (159 85) (160 27)

(161 138) (162 22) (163 22) (164 17) (166 31)

(167 6) (170 24) (173 111) (174 10) (175 493)

(176 44) (177 80) (178 10) (179 30) (180 4)

(181 24) (183 38) (185 211) (186 64) (187 70)

(188 14) (189 82) (190 19) (196 3) (197 38)

(200 38) (202 55) (203 1000) (204 152) (206 14)

(209 28) (210 12) (213 24) (215 7) (216 5)

(219 106) (220 25) (222 12) (223 22) (225 18)

(227 22) (229 9) (231 11) (233 37) (234 66)

(235 462) (236 95) (239 33) (241 11) (244 12)

(250 8) (251 11) (255 10) (257 9) (265 16)

(267 3) (268 6) (270 19) (271 55) (282 3)

(283 198) (285 7) (286 2) (298 32)

NAME:4-(5,5-Dimethyl-6-oxocyclohex-1-enyl)-3-iodomethylbutyric acid, methyl ester

COMMENT: RI=2489.1, 54.2782 min JN\_KOHALA\_OLAPA2\_LITTER|RI:2489.10

RI:2489.10

FORM:C14H21IO3

CASNO:EPA-210103

RT: 54.278

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 111

( 42 9) ( 45 16) ( 51 11) ( 53 54) ( 54 19)

( 55 75) ( 57 26) ( 65 24) ( 66 14) ( 67 84)

( 68 12) ( 69 23) ( 71 9) ( 78 10) ( 80 21)

( 81 412) ( 82 100) ( 83 49) ( 84 13) ( 85 102)

( 91 139) ( 93 88) ( 94 294) ( 96 266) ( 98 14)

( 99 17) (103 14) (105 88) (106 12) (107 325)

(109 220) (113 15) (116 22) (117 37) (120 25)

(121 311) (123 87) (128 19) (129 8) (130 6)

(131 71) (132 7) (134 20) (136 29) (137 54)

(139 26) (145 69) (147 125) (149 170) (152 8)

(155 20) (156 18) (157 31) (159 25) (160 14)

(163 115) (168 16) (171 14) (172 24) (174 30)

(177 1000) (178 182) (179 54) (180 12) (181 30)

(183 8) (187 401) (188 82) (189 25) (191 30)

(192 15) (193 26) (197 23) (199 29) (200 8)

(201 8) (202 12) (203 88) (204 98) (205 662)

(206 102) (211 5) (215 31) (217 22) (219 16)

(221 33) (222 3) (225 19) (226 11) (235 18)

(236 83) (237 551) (238 121) (240 14) (241 14)

(245 3) (248 12) (251 21) (255 19) (257 3)

(259 2) (265 17) (268 5) (280 4) (281 34)

(282 19) (283 7) (285 8) (289 1) (293 6)

(295 9)

NAME:9,12,15-Octadecatrienoic acid, ethyl ester, (Z,Z,Z)-

COMMENT: RI=2095.2, 49.8782 min OLAA\_OHIA1\_FRESH|RI:2095.2

RI:2095.2

FORM:C20H34O2

CASNO:1191419

RT: 49.878

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\02-06-08.MSL

NUM PEAKS: 144

( 39 116) ( 41 171) ( 42 12) ( 43 95) ( 44 8)

( 45 18) ( 53 9) ( 54 22) ( 55 168) ( 56 11)

( 58 16) ( 59 46) ( 65 139) ( 66 30) ( 67 925)

( 68 93) ( 69 105) ( 71 11) ( 72 15) ( 73 34)

( 75 35) ( 77 111) ( 78 51) ( 79 546) ( 80 222)

( 81 496) ( 82 126) ( 83 100) ( 84 21) ( 85 64)

( 87 60) ( 89 14) ( 91 344) ( 92 53) ( 93 654)

( 94 362) ( 95 1000) ( 96 208) ( 97 120) ( 98 40)

( 99 28) (101 59) (102 23) (105 180) (106 44)

(107 563) (108 311) (109 206) (110 35) (111 78)

(113 17) (117 128) (118 28) (119 134) (120 53)

(121 434) (122 254) (123 165) (125 36) (126 15)

(127 7) (129 58) (131 310) (132 59) (133 142)

(134 93) (135 529) (136 225) (137 65) (140 8)

(141 43) (143 58) (145 161) (147 108) (148 112)

(149 422) (150 288) (151 104) (152 27) (154 14)

(155 29) (156 11) (157 53) (159 66) (160 36)

(161 89) (162 25) (163 215) (164 97) (165 50)

(166 12) (171 27) (173 141) (174 85) (176 3)

(177 34) (178 37) (180 25) (181 42) (183 61)

(185 27) (186 27) (187 26) (188 6) (189 67)

(191 124) (192 18) (193 24) (199 47) (200 12)

(201 3) (204 6) (206 5) (208 4) (209 40)

(210 13) (211 10) (218 59) (219 20) (220 14)

(221 33) (222 12) (226 7) (227 24) (230 21)

(236 16) (237 24) (243 23) (250 18) (251 30)

(255 10) (259 8) (260 16) (263 66) (264 39)

(265 21) (267 11) (269 5) (270 6) (273 18)

(278 9) (283 14) (292 113) (293 38)

NAME:Benzoic acid, 4,5-dimethoxy-2-(2-phenylethenyl)-

COMMENT: RI=2618.3, 56.2885 min OLAA\_OHIA1\_FRESH|RI:2618.30

RI:2618.30

FORM:C17H16O4

CASNO:160856-33-7

RT:56.288

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 80

( 43 22) ( 51 34) ( 65 26) ( 69 18) ( 76 28)

( 77 173) ( 78 47) ( 79 45) ( 89 34) ( 91 347)

( 92 51) ( 95 52) (102 78) (103 256) (104 58)

(105 86) (106 84) (107 66) (115 118) (116 55)

(117 169) (118 46) (119 55) (121 72) (123 65)

(129 39) (131 103) (134 28) (135 134) (136 157)

(137 244) (138 84) (139 54) (142 48) (150 55)

(151 227) (152 155) (153 70) (162 180) (163 68)

(164 36) (165 496) (166 169) (167 65) (168 69)

(177 57) (178 89) (179 131) (180 91) (181 97)

(182 44) (192 35) (193 1000) (194 579) (195 241)

(196 54) (206 36) (209 372) (210 66) (220 32)

(221 589) (222 95) (223 51) (236 32) (238 53)

(239 65) (241 56) (264 27) (266 34) (267 60)

(269 73) (270 145) (271 28) (279 56) (281 98)

(282 77) (284 553) (285 119) (295 177) (297 127)

NAME:2,2',5,5'-Tetramethoxybiphenyl

COMMENT: RI=2143.2, 50.3529 min JN\_OLAA\_OLAPA1\_ROOTS|RI:2143.20

RI:2143.20

FORM:C16H18O4

CASNO:4555640

RT: 50.353

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 154

( 41 16) ( 42 19) ( 43 26) ( 51 5) ( 53 8)

( 55 39) ( 58 9) ( 59 16) ( 65 11) ( 66 21)

( 69 57) ( 71 31) ( 72 6) ( 73 17) ( 74 7)

( 75 16) ( 76 7) ( 77 31) ( 78 16) ( 79 64)

( 81 75) ( 82 37) ( 83 61) ( 85 19) ( 88 2)

( 89 16) ( 91 38) ( 93 20) ( 94 31) ( 95 53)

( 96 43) ( 98 25) ( 99 35) (102 40) (105 3)

(106 4) (107 49) (108 67) (109 39) (110 48)

(111 68) (113 30) (114 41) (115 70) (116 33)

(119 28) (120 24) (121 24) (122 30) (123 33)

(124 18) (125 37) (127 41) (128 41) (129 54)

(130 30) (132 12) (133 17) (134 6) (137 18)

(138 36) (139 45) (140 18) (143 36) (145 68)

(149 39) (150 20) (151 79) (152 17) (153 21)

(155 68) (158 53) (159 40) (160 15) (161 25)

(162 19) (163 43) (166 10) (167 33) (168 65)

(170 9) (171 108) (174 33) (175 3) (176 8)

(177 36) (178 6) (179 18) (180 30) (183 39)

(184 132) (185 62) (186 67) (187 45) (189 60)

(190 34) (191 14) (192 22) (195 16) (196 11)

(197 29) (199 226) (200 73) (201 197) (202 17)

(206 5) (209 22) (212 27) (213 200) (214 50)

(216 215) (217 61) (219 72) (220 8) (222 5)

(223 15) (224 10) (225 17) (227 75) (228 568)

(229 211) (230 55) (231 54) (233 21) (234 60)

(235 11) (238 13) (241 20) (243 44) (244 362)

(245 20) (246 5) (247 11) (248 11) (249 26)

(252 6) (255 6) (256 22) (258 31) (259 382)

(260 101) (261 10) (263 5) (267 25) (273 5)

(274 1000) (275 242) (276 28) (278 35) (285 3)

(289 9) (290 11) (292 9) (293 21)

NAME:2,4,5,6,7-Pentamethoxyheptanoic acid, methyl ester

COMMENT: RI=1492.4, 35.7966 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM3\_OH\_53|RI:1492.40

RI:1492.40

FORM:C13H26O7

CASNO:EPA-293224

RT: 35.797

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 100

( 40 1) ( 41 16) ( 42 9) ( 43 19) ( 44 1)

( 45 71) ( 46 1) ( 47 24) ( 50 1) ( 53 6)

( 54 1) ( 55 17) ( 57 1) ( 58 12) ( 59 35)

( 63 1) ( 68 3) ( 69 17) ( 71 39) ( 72 9)

( 73 23) ( 75 138) ( 76 2) ( 78 4) ( 79 7)

( 80 1) ( 81 8) ( 83 4) ( 85 18) ( 87 3)

( 88 17) ( 89 5) ( 91 8) ( 94 2) ( 95 19)

( 97 8) ( 98 6) (100 1) (101 311) (102 24)

(103 28) (104 4) (105 11) (106 3) (107 5)

(108 3) (109 5) (111 3) (113 30) (114 6)

(115 8) (116 2) (119 8) (120 2) (122 5)

(124 1) (127 108) (128 25) (129 1000) (130 73)

(131 23) (133 15) (134 4) (135 1) (136 3)

(137 11) (141 39) (142 14) (143 8) (145 18)

(146 5) (147 3) (148 5) (151 4) (152 2)

(157 2) (159 154) (160 43) (161 80) (162 9)

(163 7) (165 15) (166 5) (167 3) (168 8)

(169 1) (171 4) (172 3) (173 29) (174 1)

(176 14) (178 3) (180 11) (184 1) (185 2)

(190 1) (191 38) (192 3) (196 2) (207 1)

NAME:2,4-Diphenyl-4-methyl-2(E)-pentene

COMMENT: RI=1800.0, 44.2142 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_LITTER|RI:1800.00

RI:1800.00

FORM:C18H20

CASNO:22768225

RT: 44.214

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 111

( 39 10) ( 50 5) ( 51 12) ( 52 5) ( 53 3)

( 55 7) ( 56 3) ( 57 3) ( 63 5) ( 65 24)

( 67 3) ( 68 5) ( 71 9) ( 73 14) ( 75 9)

( 76 11) ( 77 24) ( 78 25) ( 79 13) ( 84 16)

( 87 2) ( 89 30) ( 90 7) ( 91 334) ( 92 27)

( 93 3) ( 94 5) ( 95 15) ( 99 3) (101 42)

(102 41) (103 59) (104 17) (105 143) (106 14)

(107 2) (108 14) (111 6) (115 154) (116 34)

(117 53) (118 17) (119 14) (120 11) (127 30)

(128 322) (129 138) (130 37) (131 103) (132 4)

(133 14) (139 6) (141 36) (142 37) (143 1000)

(144 123) (145 47) (149 6) (153 11) (157 9)

(158 104) (159 42) (161 8) (163 6) (164 6)

(165 81) (166 17) (167 14) (169 5) (171 13)

(174 3) (176 9) (178 71) (179 38) (180 6)

(181 35) (182 2) (187 30) (188 3) (190 24)

(191 50) (192 16) (193 176) (194 36) (196 2)

(198 10) (201 4) (202 14) (203 14) (205 11)

(206 37) (207 68) (208 15) (214 7) (215 11)

(216 5) (218 2) (221 431) (222 98) (223 14)

(225 2) (234 11) (236 235) (238 3) (240 3)

(242 1) (243 2) (248 5) (253 3) (266 6)

(281 11)

NAME:2-(3,5-Dimethoxy-phenyl)-2-methyl-propionaldehyde

COMMENT: RI=1614.4, 38.7701 min JN\_KOHALA\_ULUHE2\_OH\_850|RI:1614.40

RI:1614.40

FORM:C12H16O3

CASNO:120078300

RT: 38.770

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 102

( 39 17) ( 41 16) ( 42 6) ( 45 8) ( 51 10)

( 53 3) ( 55 8) ( 57 5) ( 58 2) ( 62 3)

( 63 7) ( 64 5) ( 65 15) ( 66 3) ( 68 6)

( 74 3) ( 75 5) ( 76 7) ( 77 52) ( 78 19)

( 79 42) ( 80 4) ( 81 3) ( 83 6) ( 86 2)

( 89 16) ( 90 27) ( 91 117) ( 92 23) ( 93 32)

( 95 9) (102 9) (103 56) (104 20) (105 32)

(106 9) (107 53) (108 4) (109 19) (112 2)

(113 4) (115 26) (116 5) (117 55) (118 37)

(119 42) (120 9) (121 49) (122 12) (123 18)

(124 133) (125 7) (126 6) (129 8) (130 3)

(131 27) (132 56) (133 91) (134 50) (135 32)

(136 57) (137 12) (138 60) (139 161) (140 10)

(146 7) (147 73) (148 41) (149 71) (150 13)

(151 288) (152 11) (154 10) (159 3) (160 10)

(161 140) (162 17) (163 8) (164 84) (165 18)

(166 3) (167 4) (174 3) (178 28) (179 1000)

(180 134) (181 16) (182 5) (183 5) (184 6)

(187 2) (188 7) (191 3) (192 45) (193 3)

(194 10) (203 3) (207 10) (208 76) (209 7)

(222 4) (226 28)

NAME:2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-, methyl ester

COMMENT: RI=1784.7, 42.0294 min JN\_KOHALA\_ULUHE2\_OH\_ROOTS|RI:1784.70

RI:1784.70

FORM:C11H12O4

CASNO:2309071

RT: 42.029

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 105

( 39 18) ( 40 3) ( 41 8) ( 43 25) ( 44 4)

( 45 23) ( 50 12) ( 51 26) ( 52 8) ( 53 17)

( 55 40) ( 58 2) ( 59 33) ( 63 20) ( 65 36)

( 66 6) ( 67 3) ( 68 6) ( 71 37) ( 75 17)

( 77 91) ( 78 34) ( 79 66) ( 80 10) ( 81 16)

( 82 2) ( 83 1) ( 84 3) ( 85 4) ( 88 1)

( 89 36) ( 90 15) ( 91 226) ( 92 29) ( 93 39)

( 95 10) (102 46) (103 81) (104 37) (105 157)

(107 78) (108 18) (109 2) (110 3) (111 10)

(115 146) (116 48) (117 135) (118 71) (119 139)

(121 219) (123 6) (128 9) (129 19) (130 18)

(131 190) (132 62) (133 220) (134 102) (135 56)

(136 12) (138 7) (139 8) (142 10) (144 5)

(145 484) (146 431) (147 311) (149 77) (150 78)

(151 24) (153 3) (154 4) (155 3) (157 6)

(158 13) (159 12) (160 54) (161 181) (162 78)

(163 27) (165 107) (166 22) (169 6) (175 79)

(176 155) (177 1000) (178 183) (179 17) (181 86)

(185 3) (188 4) (192 11) (193 81) (194 27)

(202 7) (204 5) (205 6) (207 53) (208 646)

(209 73) (210 18) (222 5) (237 2) (238 6)

NAME:9,10-Anthracenedione, 1,8-diethoxy-

COMMENT: RI=1103.9, 24.7447 min JN\_KOHALA\_ULUHE2\_OH\_850|RI:1103.90

RI:1103.90

FORM:C18H16O4

CASNO:16294261

RT: 24.745

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 91

( 37 15) ( 38 14) ( 39 148) ( 40 18) ( 41 232)

( 42 23) ( 43 115) ( 44 22) ( 45 321) ( 47 284)

( 51 20) ( 52 14) ( 53 90) ( 54 46) ( 55 495)

( 57 100) ( 58 31) ( 59 124) ( 60 4) ( 61 5)

( 65 34) ( 67 115) ( 68 18) ( 69 205) ( 70 24)

( 71 116) ( 72 27) ( 73 810) ( 74 68) ( 75 686)

( 76 21) ( 77 67) ( 79 169) ( 82 49) ( 84 35)

( 85 320) ( 86 60) ( 87 257) ( 91 18) ( 94 66)

( 95 91) ( 96 27) ( 97 172) ( 98 37) ( 99 190)

(100 8) (101 313) (102 22) (103 30) (107 63)

(110 29) (111 93) (113 104) (114 50) (115 202)

(117 233) (118 14) (123 30) (124 69) (125 478)

(126 40) (128 15) (129 748) (130 70) (131 165)

(134 9) (138 12) (139 36) (140 808) (141 111)

(144 805) (145 89) (146 1000) (147 105) (148 20)

(153 18) (154 16) (165 5) (191 26) (193 16)

(205 6) (207 13) (223 22) (249 29) (251 54)

(252 21) (265 9) (267 628) (268 177) (269 129)

(270 29)

NAME:Formamide

COMMENT: RI=599.3, 6.5231 min JN\_OLAA\_OHIA1\_ROOTS|RI:599.30

RI:599.30

FORM:CH3NO

CASNO:75127

RT: 6.523

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 56

( 39 7) ( 40 11) ( 41 12) ( 44 153) ( 45 1000)

( 46 14) ( 56 10) ( 64 2) ( 66 2) ( 69 11)

( 71 5) ( 75 12) ( 79 5) ( 91 9) ( 93 6)

( 94 3) (105 7) (109 4) (112 2) (118 2)

(119 6) (124 2) (125 4) (131 7) (141 3)

(149 4) (155 4) (158 2) (159 6) (173 2)

(174 3) (175 4) (177 7) (178 3) (179 3)

(183 3) (185 5) (186 2) (187 3) (191 9)

(197 5) (202 4) (204 2) (205 4) (207 24)

(209 8) (221 6) (226 3) (236 2) (249 8)

(251 4) (257 1) (267 11) (268 4) (269 3)

(283 5)

NAME:Hepta-2,4-dienoic acid, methyl ester

COMMENT: RI=1164.7, 26.6662 min JN\_MC\_OLAA\_OLAPA1\_WS|RI:1164.70

RI:1164.70

FORM:C8H12O2

CASNO:56424976

RT: 26.666

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 41

( 37 12) ( 39 30) ( 40 11) ( 49 2) ( 50 30)

( 51 52) ( 52 37) ( 53 171) ( 55 108) ( 56 6)

( 58 32) ( 62 1) ( 63 1) ( 65 2) ( 66 6)

( 68 27) ( 70 11) ( 73 18) ( 80 24) ( 81 249)

( 82 7) ( 84 3) ( 86 12) ( 95 13) (109 211)

(110 14) (111 1000) (112 89) (114 1) (119 14)

(123 26) (124 3) (134 10) (135 3) (136 5)

(137 7) (140 222) (141 21) (142 3) (152 4)

(177 1)

NAME:Methyl 2-furoate

COMMENT: RI=982.6, 20.5512 min JN\_OLAA\_ULUHE\_ROOTS2|RI:982.60

RI:982.60

FORM:C6H6O3

CASNO:611132

RT: 20.551

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 23

( 37 24) ( 38 25) ( 39 85) ( 45 73) ( 47 27)

( 51 13) ( 59 131) ( 67 67) ( 68 53) ( 75 63)

( 81 92) ( 85 31) ( 87 177) ( 88 34) ( 89 85)

( 95 1000) ( 96 122) (103 42) (116 48) (118 84)

(126 431) (127 39) (128 36)

NAME:Pentanedioic acid, dimethyl ester

COMMENT: RI=1138.2, 25.8299 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM2\_OH\_53|RI:1138.20

RI:1138.20

FORM:C7H12O4

CASNO:1119400

RT: 25.830

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 23

( 39 57) ( 41 55) ( 42 118) ( 43 61) ( 44 48)

( 55 192) ( 58 42) ( 59 614) ( 72 106) ( 85 123)

( 87 112) (100 1000) (101 901) (102 68) (103 30)

(109 85) (117 146) (128 319) (129 680) (130 49)

(131 69) (132 99) (138 174)

NAME:Phosphoric acid, trimethyl ester

COMMENT: RI=936.3, 18.8127 min JN\_MC\_OLAA\_ULUHE1\_53|RI:936.30

RI:936.30

FORM:C3H9O4P

CASNO:512561

RT: 18.813

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 37

( 38 3) ( 39 41) ( 40 16) ( 41 25) ( 43 59)

( 47 26) ( 56 27) ( 57 38) ( 61 3) ( 65 17)

( 67 18) ( 69 36) ( 70 24) ( 71 17) ( 79 192)

( 80 340) ( 82 14) ( 83 15) ( 95 137) ( 97 8)

( 98 77) ( 99 49) (109 137) (110 1000) (112 6)

(113 3) (115 7) (121 11) (123 97) (124 94)

(126 7) (127 9) (138 12) (140 74) (141 4)

(208 5) (283 4)

NAME:Propanoic acid, 2-hydroxy-, methyl ester, (ñ)-

COMMENT: RI=742.3, 11.1468 min JN\_KOHALA\_ULUHE2\_OH\_ROOTS|RI:742.30

RI:742.30

FORM:C4H8O3

CASNO:2155308

RT: 11.147

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 9

( 42 23) ( 43 175) ( 44 16) ( 45 1000) ( 46 21)

( 59 26) ( 61 56) ( 89 15) (105 12)

NAME:Pyrazine, 2-methoxy-3-(1-methylpropyl)-

COMMENT: RI=1526.8, 36.6594 min JN\_MC\_OLAA\_OLAPA1\_WS|RI:1526.80

RI:1526.80

FORM:C9H14N2O

CASNO:24168705

RT: 36.659

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 74

( 39 35) ( 41 47) ( 42 46) ( 43 22) ( 52 9)

( 53 10) ( 55 42) ( 56 105) ( 57 22) ( 58 7)

( 59 3) ( 63 4) ( 65 14) ( 66 8) ( 67 4)

( 70 178) ( 71 7) ( 77 7) ( 78 13) ( 79 27)

( 80 86) ( 81 76) ( 82 29) ( 83 64) ( 93 14)

( 94 23) ( 95 186) ( 97 24) ( 98 15) ( 99 4)

(100 25) (101 8) (102 8) (103 10) (106 29)

(107 31) (108 23) (109 98) (110 48) (111 19)

(112 8) (118 14) (119 16) (120 1) (121 79)

(122 39) (123 594) (124 87) (127 5) (129 2)

(131 10) (133 34) (135 60) (136 7) (137 174)

(138 1000) (139 52) (140 21) (150 24) (151 970)

(152 94) (154 1) (159 9) (161 4) (162 7)

(165 51) (166 349) (170 8) (171 6) (179 18)

(180 39) (190 5) (195 16) (207 1)

NAME:à-D-Glucopyranoside, phenyl 2,3,4,6-tetra-O-methyl-

COMMENT: RI=2231.5, 51.2253 min JN\_KOHALA\_CIBOTIUM3\_LIVE|RI:2231.50

RI:2231.50

FORM:C16H24O6

CASNO:3149619

RT: 51.225

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 139

( 39 10) ( 41 25) ( 42 5) ( 43 31) ( 45 121)

( 47 6) ( 53 14) ( 55 22) ( 59 39) ( 67 6)

( 68 5) ( 69 28) ( 70 6) ( 71 67) ( 72 15)

( 73 19) ( 74 19) ( 75 185) ( 76 6) ( 78 3)

( 81 29) ( 82 5) ( 83 10) ( 85 68) ( 86 7)

( 87 8) ( 88 22) ( 89 28) ( 91 4) ( 93 8)

( 94 7) ( 95 153) ( 96 17) ( 97 21) ( 98 18)

( 99 59) (100 7) (101 272) (102 14) (103 15)

(104 2) (106 2) (107 4) (108 5) (110 1)

(111 1000) (112 84) (113 62) (114 22) (115 79)

(116 17) (117 11) (120 2) (121 7) (122 1)

(123 25) (125 35) (126 8) (127 174) (128 16)

(129 31) (130 4) (131 51) (132 5) (134 4)

(135 11) (136 6) (138 5) (140 8) (143 46)

(145 124) (147 14) (148 8) (153 7) (155 157)

(157 31) (158 27) (159 43) (160 6) (161 5)

(162 2) (163 10) (165 14) (167 2) (168 1)

(170 7) (172 24) (173 11) (175 15) (178 3)

(179 2) (186 6) (187 556) (188 51) (189 11)

(194 5) (195 2) (197 5) (199 12) (200 5)

(201 5) (203 5) (205 1) (207 14) (208 7)

(209 3) (210 4) (213 4) (214 4) (217 1)

(218 65) (219 33) (220 3) (224 1) (225 7)

(226 1) (231 26) (232 3) (233 4) (235 12)

(241 3) (247 4) (250 3) (252 1) (255 3)

(258 2) (259 3) (262 6) (263 3) (265 4)

(272 3) (273 5) (277 3) (282 5) (284 2)

(286 5) (290 1) (294 7) (295 2)

NAME:Pyridine, 3-methoxy-

COMMENT: RI=1012.0, 21.6155 min JN\_KOHALA\_DIPLAZIUM1\_LITTER|RI:1012.00

RI:1012.00

FORM:C6H7NO

CASNO:7295763

RT: 21.616

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 27

( 37 31) ( 38 55) ( 39 421) ( 40 41) ( 41 611)

( 42 54) ( 43 429) ( 51 30) ( 52 39) ( 53 12)

( 65 44) ( 66 217) ( 67 60) ( 68 33) ( 69 42)

( 71 834) ( 72 53) ( 74 192) ( 76 11) ( 77 27)

( 78 74) ( 79 176) ( 93 85) ( 94 383) ( 99 30)

(102 106) (109 1000)

NAME:Thiophene, 2-(methylthio)-

COMMENT: RI=1038.2, 22.5134 min JN\_MC\_OLAA\_OLAPA\_ROOTS1|RI:1038.20

RI:1038.20

FORM:C5H6S2

CASNO:5780369

RT: 22.513

SOURCE:C:\Program Files\NIST\AMDIS Libraries\moreHI\_compounds.msl

NUM PEAKS: 32

( 43 206) ( 45 7) ( 57 117) ( 59 108) ( 60 4)

( 61 6) ( 63 5) ( 71 176) ( 73 12) ( 85 308)

( 86 7) ( 87 80) ( 88 8) ( 89 19) ( 91 22)

(100 40) (101 53) (102 6) (103 7) (115 220)

(116 27) (117 232) (118 110) (124 12) (130 1000)

(131 34) (132 10) (149 4) (154 8) (207 5)

(208 3) (283 2)

NAME:2-Phenanthrenol, 4b,5,6,7,8,8a,9,10-octahydro-4b,8,8-trimethyl-1-(1-methylethyl)-, (4bS-trans)-

FORM:C20H30O

CASNO:511-15-9

RI:2413.4

RW:

RT:53.099

COMMENT: RI=2413.4, 53.0985 min W27|RI:2413.4

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 28

( 41 53) ( 43 24) (105 39) (115 48) (128 63)

(131 69) (133 164) (141 70) (145 114) (147 113)

(157 50) (159 152) (173 86) (175 1000) (176 164)

(185 32) (187 101) (189 680) (190 123) (201 425)

(202 63) (215 80) (229 59) (243 30) (271 644)

(272 140) (286 225) (287 51)

NAME:RI=2413.4, 53.0985 min W27

COMMENT: RI=2413.4, 53.0985 min W27|RI:2413.4

RI:2413.4

CASNO:W27-N1001

RT: 53.099

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 28

( 41 53) ( 43 24) (105 39) (115 48) (128 63)

(131 69) (133 164) (141 70) (145 114) (147 113)

(157 50) (159 152) (173 86) (175 1000) (176 164)

(185 32) (187 101) (189 680) (190 123) (201 425)

(202 63) (215 80) (229 59) (243 30) (271 644)

(272 140) (286 225) (287 51)

NAME:4-Methyl-2-oxopentanenitrile

FORM:C6H9NO

CASNO:66582-16-9

RI:1218.8

RW:

RT:28.834

COMMENT: RI=1218.8, 28.8345 min 6CXX|RI:1218.8

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 30

( 37 46) ( 38 54) ( 39 1000) ( 40 123) ( 41 915)

( 42 289) ( 43 808) ( 44 67) ( 45 105) ( 50 21)

( 53 30) ( 54 102) ( 55 283) ( 56 25) ( 57 792)

( 58 140) ( 60 102) ( 68 135) ( 69 168) ( 70 355)

( 71 87) ( 81 211) ( 82 126) ( 85 303) ( 86 30)

( 96 60) ( 98 21) (114 39) (116 19) (128 143)

NAME:Butanenitrile, 4-oxo-

FORM:C4H5NO

CASNO:3515-93-3

RI:734.3

RW:

RT:11.709

COMMENT: RI=734.3, 11.7093 min 4CXN|RI:734.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 15

( 37 13) ( 38 12) ( 39 92) ( 41 76) ( 43 119)

( 44 91) ( 45 62) ( 46 5) ( 52 20) ( 53 25)

( 54 1000) ( 55 428) ( 69 40) ( 72 22) ( 84 19)

NAME:Pyrimidine, 2-methyl-

FORM:C5H6N2

CASNO:5053-43-0

RI:838.3

RW:

RT:15.646

COMMENT: RI=838.3, 15.6458 min 4CXN|RI:838.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 25

( 37 44) ( 38 73) ( 39 291) ( 40 238) ( 41 135)

( 42 151) ( 51 36) ( 52 71) ( 53 29) ( 54 15)

( 62 11) ( 64 28) ( 66 56) ( 67 472) ( 68 26)

( 81 26) ( 93 51) ( 94 1000) ( 95 85) ( 97 6)

(107 36) (108 49) (109 6) (110 25) (208 12)

NAME:Furan, 2,4-dimethyl-

FORM:C6H8O

CASNO:3710-43-8

RI:983.2

RW:

RT:21.122

COMMENT: RI=983.2, 21.1221 min 4CXN|RI:983.2

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 33

( 37 157) ( 39 905) ( 40 38) ( 41 100) ( 44 29)

( 45 18) ( 49 54) ( 50 383) ( 51 344) ( 53 761)

( 54 13) ( 62 73) ( 63 82) ( 65 311) ( 67 994)

( 68 62) ( 69 25) ( 73 9) ( 76 45) ( 77 705)

( 78 124) ( 81 698) ( 83 39) ( 85 37) ( 86 21)

( 87 22) ( 95 911) ( 96 1000) (105 933) (106 177)

(107 72) (109 81) (125 5)

NAME:7,12a-Dimethyl-1,2,3,4,4a,11,12,12a-octahydrochrysene

FORM:C20H24

CASNO:75758-27-9

RI:1917.1

RW:

RT:45.829

COMMENT: RI=1917.1, 45.8290 min 4CXN|RI:1917.1

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 102

( 39 379) ( 40 37) ( 41 265) ( 42 29) ( 43 154)

( 53 239) ( 55 128) ( 56 82) ( 63 39) ( 66 119)

( 67 354) ( 68 127) ( 70 36) ( 73 45) ( 77 62)

( 78 37) ( 79 348) ( 80 133) ( 81 952) ( 83 301)

( 84 97) ( 89 12) ( 91 206) ( 92 65) ( 93 156)

( 94 209) ( 95 1000) ( 96 590) ( 97 217) ( 99 44)

(103 76) (106 135) (107 168) (108 221) (109 742)

(111 159) (112 74) (119 251) (120 101) (121 254)

(122 192) (123 948) (124 566) (127 48) (129 49)

(132 21) (134 142) (135 243) (136 33) (137 577)

(138 236) (140 30) (142 34) (146 37) (148 153)

(149 160) (150 84) (151 372) (153 66) (154 26)

(155 44) (156 73) (160 25) (161 124) (163 88)

(165 370) (168 48) (170 25) (171 14) (173 55)

(175 56) (176 84) (178 106) (182 37) (185 46)

(188 38) (190 35) (191 141) (192 81) (193 381)

(194 149) (196 90) (202 3) (206 78) (207 403)

(208 205) (210 77) (213 43) (217 41) (220 25)

(221 177) (222 221) (223 124) (224 39) (229 24)

(230 9) (233 66) (235 68) (246 118) (264 749)

(265 111) (267 34)

NAME:Isobutyl nitrite

FORM:C4H9NO2

CASNO:542-56-3

RI:602.3

RW:

RT:7.758

COMMENT: RI=602.3, 7.7575 min 4CXX|RI:602.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 13

( 38 8) ( 39 270) ( 40 26) ( 41 459) ( 42 53)

( 43 1000) ( 44 17) ( 49 6) ( 53 16) ( 56 91)

( 57 63) ( 64 3) ( 87 6)

NAME:Methenamine

FORM:C6H12N4

CASNO:100-97-0

RI:1272.7

RW:

RT:30.368

COMMENT: RI=1272.7, 30.3682 min 4CAX|RI:1272.7

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 60

( 39 16) ( 40 22) ( 41 69) ( 42 886) ( 43 30)

( 44 84) ( 45 8) ( 53 4) ( 54 9) ( 55 24)

( 56 71) ( 57 13) ( 58 237) ( 59 11) ( 66 3)

( 67 27) ( 68 6) ( 69 116) ( 70 20) ( 71 27)

( 73 75) ( 76 3) ( 81 34) ( 82 15) ( 83 38)

( 84 99) ( 85 122) ( 86 7) ( 87 2) ( 95 13)

( 96 16) ( 97 15) ( 98 22) ( 99 4) (102 14)

(108 4) (109 10) (110 35) (111 80) (112 38)

(113 9) (122 5) (123 8) (124 19) (125 5)

(129 14) (138 21) (139 8) (140 1000) (141 72)

(142 1) (145 9) (149 5) (153 6) (159 1)

(166 51) (181 35) (182 3) (207 3) (251 6)

NAME:2,3-Hexanedione

FORM:C6H10O2

CASNO:3848-24-6

RI:602.1

RW:

RT:7.750

COMMENT: RI=602.1, 7.7504 min 6CXN|RI:602.1

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 3) ( 38 3) ( 39 100) ( 40 13) ( 41 248)

( 42 61) ( 43 1000) ( 44 20) ( 46 6) ( 49 4)

( 50 2) ( 53 8) ( 56 46) ( 57 41) ( 64 3)

( 66 1) ( 71 6) ( 86 6) ( 87 6) (207 7)

(208 2) (281 3)

NAME:3-Pentyn-1-ol

FORM:C5H8O

CASNO:10229-10-4

RI:734.6

RW:

RT:11.719

COMMENT: RI=734.6, 11.7191 min 6CXN|RI:734.6

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 22

( 37 16) ( 38 16) ( 39 158) ( 40 21) ( 41 88)

( 43 122) ( 44 82) ( 45 79) ( 51 23) ( 52 18)

( 53 28) ( 54 1000) ( 55 461) ( 64 8) ( 66 45)

( 67 27) ( 69 41) ( 70 7) ( 71 28) ( 72 17)

( 83 10) ( 84 21)

NAME:Cyclotetrasiloxane, octamethyl-

FORM:C8H24O4Si4

CASNO:556-67-2

RI:961.5

RW:

RT:20.322

COMMENT: RI=961.5, 20.3220 min 6CXN|RI:961.5

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 68

( 35 1) ( 37 21) ( 43 80) ( 48 6) ( 49 4)

( 52 11) ( 54 15) ( 55 60) ( 57 18) ( 59 4)

( 62 7) ( 65 25) ( 66 21) ( 68 23) ( 71 5)

( 84 29) ( 87 14) ( 90 3) ( 91 37) (104 5)

(106 42) (108 11) (109 10) (112 119) (113 17)

(115 8) (118 3) (119 19) (129 3) (131 3)

(133 48) (134 7) (137 4) (147 7) (151 3)

(155 3) (158 1) (167 7) (168 2) (176 6)

(177 22) (179 27) (180 6) (191 31) (193 66)

(197 3) (205 52) (207 116) (208 37) (209 29)

(210 7) (211 9) (223 10) (231 3) (233 2)

(249 72) (265 149) (266 87) (267 92) (268 25)

(280 3) (281 1000) (282 264) (283 170) (284 49)

(285 17) (289 1) (298 2)

NAME:2,5-Dimethyl-4-hydroxy-3(2H)-furanone

FORM:C6H8O3

CASNO:3658-77-3

RI:1105.6

RW:

RT:25.326

COMMENT: RI=1105.6, 25.3258 min 6CAX|RI:1105.6

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 36

( 37 13) ( 38 17) ( 39 102) ( 41 40) ( 42 36)

( 43 867) ( 44 183) ( 49 6) ( 51 15) ( 52 24)

( 53 24) ( 57 86) ( 63 10) ( 65 6) ( 67 46)

( 70 1) ( 72 255) ( 82 38) ( 87 6) ( 93 4)

( 94 15) ( 95 71) ( 97 10) (100 50) (105 5)

(113 5) (121 4) (123 14) (124 77) (125 7)

(126 23) (127 13) (128 1000) (129 104) (135 2)

(137 5)

NAME:Benzaldehyde, 2,5-bis[(trimethylsilyl)oxy]-

FORM:C13H22O3Si2

CASNO:56114-69-3

RI:1107.8

RW:

RT:25.395

COMMENT: RI=1107.8, 25.3952 min 4CAN\_080318140610|RI:1107.8

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 62

( 37 7) ( 38 10) ( 39 10) ( 40 7) ( 41 36)

( 43 16) ( 44 4) ( 45 23) ( 46 6) ( 47 5)

( 54 6) ( 59 14) ( 62 2) ( 72 2) ( 73 742)

( 74 94) ( 75 32) ( 77 13) ( 80 3) ( 81 2)

( 82 6) ( 83 6) ( 87 1) ( 91 9) ( 94 2)

( 96 9) (104 4) (106 4) (110 6) (112 8)

(117 2) (123 8) (133 6) (135 7) (140 2)

(165 8) (177 6) (179 26) (191 38) (192 12)

(193 34) (194 10) (195 5) (203 5) (205 30)

(207 25) (208 6) (221 6) (223 25) (224 11)

(225 12) (235 13) (237 9) (249 28) (250 11)

(252 26) (253 24) (254 4) (267 1000) (268 306)

(269 172) (285 28)

NAME:1-Penten-3-ol, 3-methyl-

FORM:C6H12O

CASNO:918-85-4

RI:1350.3

RW:

RT:32.576

COMMENT: RI=1350.3, 32.5757 min 4CAN\_080318140610|RI:1350.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 60

( 39 128) ( 41 267) ( 42 39) ( 43 919) ( 44 27)

( 45 67) ( 46 6) ( 47 17) ( 53 44) ( 55 117)

( 56 27) ( 57 104) ( 58 33) ( 59 15) ( 60 45)

( 61 15) ( 67 5) ( 70 18) ( 71 1000) ( 72 63)

( 73 283) ( 74 8) ( 80 12) ( 81 84) ( 82 134)

( 83 120) ( 84 26) ( 85 68) ( 86 4) ( 89 35)

( 95 5) ( 96 4) ( 99 86) (100 34) (102 6)

(107 4) (109 8) (111 7) (112 2) (113 47)

(125 5) (127 7) (129 13) (131 5) (137 3)

(144 5) (145 11) (146 4) (148 5) (150 6)

(151 12) (152 14) (154 2) (159 3) (164 5)

(167 5) (177 2) (207 17) (209 5) (281 6)

NAME:Acetic acid, mercapto-, methyl ester

FORM:C3H6O2S

CASNO:2365-48-2

RI:1100.6

RW:

RT:25.167

COMMENT: RI=1100.6, 25.1672 min A|RI:1100.6

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 56

( 42 239) ( 43 9) ( 44 22) ( 45 442) ( 46 104)

( 47 391) ( 48 76) ( 49 23) ( 50 2) ( 57 24)

( 58 33) ( 59 79) ( 60 66) ( 61 12) ( 62 16)

( 64 21) ( 72 30) ( 73 37) ( 74 1000) ( 75 999)

( 76 277) ( 77 56) ( 78 9) ( 79 41) ( 80 8)

( 81 4) ( 84 2) ( 85 10) ( 87 8) ( 88 21)

( 89 4) ( 90 4) ( 91 5) ( 93 3) ( 94 11)

(104 3) (106 186) (107 9) (108 12) (110 11)

(111 3) (113 3) (117 8) (119 2) (121 19)

(122 4) (149 1) (189 1) (191 3) (193 8)

(207 6) (209 2) (245 3) (250 3) (252 3)

(281 2)

NAME:2-Butene, 1,4-bis(ethylthio)-, (E)-

FORM:C8H16S2

CASNO:79029-65-5

RI:1167.1

RW:

RT:27.265

COMMENT: RI=1167.1, 27.2647 min A|RI:1167.1

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 73

( 37 15) ( 38 19) ( 39 143) ( 40 31) ( 41 98)

( 42 85) ( 43 83) ( 45 572) ( 46 70) ( 47 278)

( 48 103) ( 49 28) ( 50 25) ( 51 28) ( 53 34)

( 54 15) ( 55 159) ( 56 33) ( 57 609) ( 58 186)

( 59 285) ( 60 54) ( 61 260) ( 62 26) ( 63 36)

( 66 16) ( 68 540) ( 69 57) ( 71 138) ( 74 49)

( 75 80) ( 76 148) ( 77 11) ( 78 17) ( 81 281)

( 83 12) ( 84 27) ( 85 1000) ( 86 51) ( 87 128)

( 88 295) ( 89 114) ( 91 16) ( 94 8) ( 97 16)

(101 21) (103 29) (104 16) (108 11) (112 32)

(114 501) (115 52) (118 17) (123 26) (132 173)

(133 69) (134 17) (135 14) (147 8) (149 9)

(151 12) (163 15) (178 10) (179 19) (190 33)

(191 15) (209 15) (221 4) (229 11) (245 17)

(253 9) (281 60) (282 14)

NAME:Ethanol, 2-mercapto-

FORM:C2H6OS

CASNO:60-24-2

RI:1230.3

RW:

RT:29.163

COMMENT: RI=1230.3, 29.1630 min A|RI:1230.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 57

( 37 5) ( 38 10) ( 40 5) ( 41 13) ( 42 54)

( 43 30) ( 45 223) ( 47 264) ( 48 230) ( 52 11)

( 57 8) ( 58 30) ( 59 113) ( 60 1000) ( 61 28)

( 62 67) ( 69 9) ( 70 7) ( 72 9) ( 73 50)

( 74 5) ( 77 29) ( 79 19) ( 81 16) ( 83 13)

( 84 3) ( 92 42) ( 93 19) ( 94 18) ( 95 4)

( 96 7) ( 97 10) (101 12) (102 9) (107 496)

(108 11) (112 32) (116 20) (122 4) (135 13)

(149 4) (163 8) (176 7) (178 6) (179 7)

(190 19) (193 23) (194 6) (205 10) (208 18)

(211 7) (223 4) (231 5) (245 9) (251 16)

(253 3) (263 2)

NAME:2,4-Pentadienoic acid, 1-cyclopenten-3-

FORM:C10H10O3

CASNO:N/A

RI:1241.0

RW:

RT:29.466

COMMENT: RI=1241.0, 29.4663 min A|RI:1241.0

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 78

( 37 14) ( 38 6) ( 39 22) ( 40 15) ( 46 18)

( 47 38) ( 48 12) ( 50 49) ( 51 70) ( 52 35)

( 53 358) ( 54 18) ( 58 30) ( 63 3) ( 64 25)

( 67 7) ( 69 11) ( 72 19) ( 74 16) ( 75 9)

( 77 13) ( 79 48) ( 81 1000) ( 82 81) ( 84 17)

( 85 41) ( 87 4) ( 88 10) ( 93 15) ( 94 7)

( 96 5) ( 98 6) (101 5) (102 13) (104 3)

(105 5) (111 5) (114 9) (115 15) (116 23)

(118 4) (119 6) (120 21) (124 6) (125 27)

(135 4) (137 3) (138 3) (140 3) (143 11)

(145 3) (148 2) (157 3) (160 9) (161 7)

(163 6) (173 17) (190 15) (191 27) (192 4)

(193 14) (194 6) (205 5) (207 36) (223 4)

(225 7) (245 5) (250 13) (251 43) (252 16)

(253 10) (263 12) (265 27) (266 17) (267 17)

(269 16) (279 9) (281 5)

NAME:Tetrasulfide, dimethyl

FORM:C2H6S4

CASNO:5756-24-1

RI:1256.6

RW:

RT:29.911

COMMENT: RI=1256.6, 29.9112 min A|RI:1256.6

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 21

( 45 675) ( 46 146) ( 47 312) ( 48 42) ( 49 22)

( 61 412) ( 63 24) ( 64 353) ( 65 40) ( 66 36)

( 79 814) ( 80 113) ( 93 74) ( 94 905) ( 96 98)

(110 38) (111 55) (112 76) (158 1000) (159 82)

(160 196)

NAME:Thiazolo[5,4-d]pyrimidine, 7-methyl

FORM:C6H5N3S

CASNO:13316-06-8

RI:1571.7

RW:

RT:38.300

COMMENT: RI=1571.7, 38.2998 min A|RI:1571.7

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 101

( 37 11) ( 38 8) ( 39 44) ( 41 26) ( 42 16)

( 43 33) ( 45 45) ( 46 12) ( 47 12) ( 48 4)

( 49 5) ( 51 18) ( 52 24) ( 53 10) ( 54 8)

( 55 24) ( 56 7) ( 57 49) ( 58 40) ( 59 22)

( 60 10) ( 61 35) ( 62 6) ( 63 4) ( 64 40)

( 65 5) ( 66 9) ( 67 13) ( 69 67) ( 70 97)

( 71 60) ( 72 5) ( 73 26) ( 77 5) ( 78 8)

( 79 21) ( 80 12) ( 81 166) ( 82 23) ( 83 21)

( 84 9) ( 85 29) ( 87 12) ( 88 3) ( 94 6)

( 96 22) ( 97 138) ( 98 27) ( 99 33) (103 11)

(105 5) (106 4) (108 10) (109 40) (110 13)

(112 6) (114 6) (119 8) (120 5) (123 94)

(124 348) (125 43) (126 21) (128 6) (129 6)

(130 9) (131 13) (133 11) (134 56) (135 75)

(137 5) (139 6) (145 7) (146 6) (147 17)

(148 31) (150 36) (151 1000) (152 77) (153 53)

(156 3) (162 4) (164 104) (168 7) (172 6)

(175 3) (181 7) (190 9) (191 24) (192 8)

(193 22) (195 8) (211 3) (222 5) (235 4)

(245 5) (249 4) (265 17) (267 9) (268 6)

(270 3)

NAME:1,3,5-Triazine, 2-amino-4-ethylamino-6-methylthio-

FORM:C6H11N5S

CASNO:4147-58-4

RI:1811.3

RW:

RT:43.697

COMMENT: RI=1811.3, 43.6972 min A|RI:1811.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 110

( 40 4) ( 41 3) ( 42 51) ( 43 74) ( 44 30)

( 45 11) ( 46 12) ( 47 9) ( 53 8) ( 55 26)

( 56 5) ( 57 18) ( 59 4) ( 60 5) ( 61 23)

( 64 2) ( 65 1) ( 66 1) ( 67 6) ( 68 69)

( 69 50) ( 70 24) ( 71 62) ( 72 10) ( 73 15)

( 74 16) ( 75 2) ( 76 2) ( 77 2) ( 78 2)

( 79 3) ( 80 5) ( 81 4) ( 82 23) ( 83 9)

( 84 16) ( 85 29) ( 86 3) ( 87 2) ( 93 8)

( 95 43) ( 96 35) ( 97 39) ( 98 14) ( 99 13)

(100 8) (102 4) (103 24) (105 4) (106 4)

(107 5) (108 1) (109 3) (110 20) (111 47)

(112 59) (113 5) (114 15) (116 13) (122 7)

(123 4) (124 71) (125 9) (127 75) (128 9)

(129 4) (134 1) (136 6) (137 9) (138 10)

(139 123) (140 15) (141 11) (142 15) (143 5)

(145 4) (149 6) (150 7) (151 5) (152 40)

(155 13) (156 99) (157 28) (158 7) (159 6)

(163 7) (167 2) (170 162) (171 25) (172 9)

(177 2) (178 2) (184 65) (185 1000) (186 90)

(187 62) (188 6) (189 2) (191 1) (192 1)

(193 4) (223 1) (250 2) (251 4) (252 4)

(265 1) (267 12) (269 1) (282 3) (284 1)

NAME:Carbon disulfide

COMMENT: RI=582.5, 7.2143 min A|RI:582.5

RI:582.5

FORM:CS2

CASNO:75-15-0

RT: 7.214

SOURCE:D:\shared\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 10

( 38 3) ( 44 37) ( 46 3) ( 59 2) ( 64 9)

( 76 1000) ( 77 26) ( 78 87) ( 79 1) ( 80 2)

NAME:Cyanamide

COMMENT: RI=981.8, 21.0719 min A|RI:981.8

RI:981.8

FORM:CH2N2

CASNO:420-04-2

RT: 21.072

SOURCE:D:\shared\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 6

( 41 83) ( 42 1000) ( 43 91) ( 69 5) ( 91 3)

(225 1)

NAME:15-Tetracosenoic acid, methyl ester, (Z)- (C24:1 Nervonic Acid ME)

COMMENT: RI=2635.6, 58.0886 min 37\_FAMES\_300\_10MIN\_50SF|RI:2635.60

RI:2635.60

FORM:C25 H48 O2

CASNO:2733-88-2

RT: 58.089

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\270-300-comb-FAME.msl

NUM PEAKS: 100

( 39 305) ( 41 570) ( 43 290) ( 53 77) ( 55 984)

( 56 114) ( 57 306) ( 65 51) ( 67 641) ( 68 176)

( 69 698) ( 70 133) ( 71 140) ( 74 73) ( 79 173)

( 80 183) ( 81 865) ( 82 557) ( 83 730) ( 84 412)

( 85 121) ( 87 187) ( 91 71) ( 93 173) ( 94 361)

( 95 753) ( 96 1000) ( 97 819) ( 98 883) ( 99 152)

(101 107) (105 97) (107 236) (108 294) (109 474)

(110 531) (111 596) (112 244) (113 89) (119 211)

(120 104) (121 502) (122 251) (123 437) (124 426)

(125 387) (126 114) (127 114) (133 223) (134 390)

(135 518) (136 183) (137 350) (138 400) (139 247)

(141 323) (143 161) (147 171) (148 322) (149 341)

(150 110) (151 373) (152 605) (153 173) (155 80)

(161 171) (162 82) (163 234) (165 270) (166 385)

(167 159) (168 54) (175 146) (177 135) (179 216)

(180 162) (181 125) (189 87) (191 95) (193 143)

(194 245) (195 102) (199 86) (208 202) (218 30)

(221 204) (222 215) (235 233) (236 161) (237 59)

(248 48) (249 197) (250 223) (251 67) (263 219)

(264 214) (277 188) (278 141) (291 167) (292 113)

NAME:2-Amino-4-methylpyrimidine

FORM:C5H7N3

CASNO:108-52-1

RI:1083.9

RW:

RT:24.600

COMMENT: RI=1066.8, 23.4877 min HENDERSON06|RI:1066.8

SOURCE:D:\shared\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 23

( 37 9) ( 38 14) ( 39 60) ( 40 44) ( 41 77)

( 42 51) ( 43 48) ( 52 22) ( 54 32) ( 55 35)

( 64 9) ( 66 24) ( 67 175) ( 68 44) ( 69 67)

( 81 76) ( 82 403) ( 83 24) ( 92 15) ( 94 91)

(108 17) (109 1000) (110 67)

NAME:1,2,3,7-Tetramethylindole

FORM:C12H15N

CASNO:27505-79-9

RI:1668.2

RW:

RT:40.812

COMMENT: RI=1668.2, 40.8121 min T6\_AGL\_2-4\_TMAH|RI:1668.2

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 36

( 39 33) ( 55 48) ( 65 22) ( 77 54) ( 78 22)

( 79 30) ( 89 29) ( 91 104) ( 97 50) (103 43)

(105 46) (109 47) (115 91) (121 1000) (122 90)

(128 57) (129 45) (133 47) (135 503) (136 54)

(142 54) (143 47) (148 48) (156 99) (157 199)

(158 419) (159 50) (163 830) (164 97) (172 823)

(173 725) (174 90) (205 511) (206 87) (234 204)

(235 36)

NAME:Benzoic acid, 4-butyl-, methyl ester

FORM:C12H16O2

CASNO:20651-69-8

RI:1711.2

RW:

RT:41.771

COMMENT: RI=1711.2, 41.7713 min T6\_AGL\_2-4\_TMAH|RI:1711.2

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 33

( 77 45) ( 79 38) ( 89 25) ( 90 29) ( 91 65)

(102 9) (103 40) (109 72) (117 21) (118 51)

(119 36) (121 260) (122 26) (132 26) (133 180)

(134 82) (135 19) (147 23) (148 37) (149 1000)

(150 101) (160 12) (161 358) (162 53) (163 39)

(175 39) (176 13) (182 18) (190 15) (191 20)

(192 304) (193 42) (234 30)

NAME:Phenol, 2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-

FORM:C15H24O

CASNO:2219-84-3

RI:1659.4

RW:

RT:40.614

COMMENT: RI=1659.4, 40.6140 min T1\_TMAH|RI:1659.4

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 95

( 39 12) ( 41 7) ( 42 1) ( 43 1) ( 51 1)

( 53 1) ( 54 1) ( 56 3) ( 58 2) ( 63 4)

( 65 6) ( 66 1) ( 67 8) ( 69 1) ( 71 5)

( 72 1) ( 75 2) ( 77 26) ( 79 9) ( 80 5)

( 81 5) ( 83 4) ( 84 3) ( 85 1) ( 90 2)

( 91 24) ( 92 10) ( 93 17) ( 94 18) ( 95 3)

( 96 5) ( 97 3) (102 1) (103 12) (104 2)

(109 30) (110 3) (111 6) (112 1) (115 8)

(117 7) (118 4) (119 8) (120 6) (121 224)

(122 24) (125 4) (127 2) (131 8) (133 23)

(135 64) (141 10) (142 1) (143 1) (144 4)

(146 4) (149 1000) (150 122) (151 13) (154 2)

(155 1) (156 7) (157 5) (161 2) (162 3)

(163 6) (164 1) (166 1) (168 1) (172 3)

(175 11) (176 6) (178 4) (180 3) (181 5)

(183 4) (186 1) (187 1) (189 1) (191 1)

(192 1) (193 7) (196 4) (198 5) (201 1)

(205 1) (206 1) (207 5) (208 3) (212 9)

(214 1) (219 5) (234 92) (235 8) (236 2)

NAME:Acetamide, N-[3-(diethylamino)-4-methoxyphenyl

FORM:C13H20N2O2

CASNO:19433-93-3

RI:1647.3

RW:

RT:40.343

COMMENT: RI=1647.3, 40.3432 min T4\_TMAH|RI:1647.3

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 87

( 39 22) ( 55 17) ( 56 6) ( 57 37) ( 58 6)

( 65 7) ( 67 7) ( 69 10) ( 78 17) ( 80 2)

( 81 33) ( 83 3) ( 85 1) ( 91 59) ( 97 26)

(103 45) (104 6) (105 76) (106 15) (107 19)

(108 24) (111 17) (113 2) (116 3) (117 10)

(118 25) (119 27) (120 32) (121 347) (122 21)

(127 5) (128 16) (129 60) (130 9) (131 35)

(132 23) (133 64) (135 1000) (136 100) (139 7)

(142 8) (144 26) (146 17) (147 18) (151 35)

(152 23) (153 11) (155 3) (156 23) (159 7)

(161 17) (162 10) (165 52) (168 2) (170 18)

(173 31) (174 9) (176 20) (177 381) (178 67)

(179 69) (180 14) (184 9) (185 5) (191 356)

(192 46) (194 15) (197 3) (199 19) (200 3)

(201 5) (203 5) (205 40) (207 43) (208 10)

(210 4) (215 2) (217 9) (220 6) (221 320)

(222 60) (223 8) (234 70) (236 121) (240 2)

(267 1) (268 3)

NAME:2,5-di-tert-Butyl-1,4-dimethoxybenzene

FORM:C16H26O2

CASNO:7323-63-9

RI:1652.9

RW:

RT:40.469

COMMENT: RI=1652.9, 40.4693 min T4\_TMAH|RI:1652.9

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 106

( 41 32) ( 45 4) ( 51 7) ( 53 6) ( 55 31)

( 57 83) ( 59 6) ( 63 10) ( 65 5) ( 67 6)

( 69 22) ( 73 139) ( 74 14) ( 77 6) ( 79 19)

( 83 6) ( 91 35) ( 92 8) ( 93 13) ( 95 6)

( 98 5) (101 4) (103 10) (104 3) (105 31)

(106 4) (107 20) (108 4) (109 23) (110 6)

(116 20) (117 18) (118 6) (119 68) (120 15)

(121 40) (123 14) (124 6) (126 4) (127 16)

(128 34) (129 30) (131 35) (132 10) (133 76)

(134 16) (137 29) (138 7) (139 21) (140 5)

(142 7) (145 41) (146 9) (147 73) (148 25)

(149 55) (150 12) (151 228) (152 52) (153 50)

(156 11) (159 8) (161 42) (162 12) (163 74)

(164 123) (165 17) (166 8) (167 24) (168 14)

(169 54) (172 17) (173 42) (175 108) (176 12)

(177 35) (178 7) (179 1000) (180 86) (184 29)

(186 4) (187 29) (188 32) (190 8) (193 14)

(196 7) (202 20) (203 26) (205 65) (206 12)

(207 12) (208 12) (211 9) (212 10) (218 4)

(219 18) (220 85) (235 366) (236 65) (249 5)

(250 588) (251 116) (252 13) (267 5) (282 4)

(283 8)

NAME:N-(7-Methylbenzo(b)thien-3-yl)acetamide

FORM:7311-97-9

CASNO:7311-97-9

RI:1668.8

RW:

RT:40.824

COMMENT: RI=1668.8, 40.8241 min T4\_TMAH|RI:1668.8

SOURCE:Z:\Project Folders\NSF Hawaii Project\AMDIS Libraries\02-07-08.MSL

NUM PEAKS: 69

( 51 10) ( 53 9) ( 55 45) ( 65 18) ( 67 17)

( 69 24) ( 70 7) ( 71 10) ( 73 5) ( 77 45)

( 80 10) ( 81 28) ( 83 14) ( 89 8) ( 91 69)

( 96 3) ( 97 52) (102 8) (103 40) (107 5)

(116 14) (119 15) (120 10) (121 1000) (123 15)

(125 3) (126 5) (127 12) (128 6) (130 13)

(142 10) (144 9) (146 12) (147 46) (151 13)

(152 1) (154 6) (155 7) (157 15) (158 97)

(161 17) (162 7) (163 887) (164 113) (165 27)

(166 8) (168 3) (170 17) (171 19) (172 197)

(173 66) (174 20) (175 3) (177 11) (182 8)

(183 2) (186 3) (187 21) (191 15) (195 5)

(200 2) (203 4) (205 700) (206 64) (207 11)

(210 5) (234 174) (267 6) (281 5)

NAME:? n-Hexadecane

FORM:c16h34

CASNO:544-76-3

RI:1596.1

RW:

RT:38.239

COMMENT: RI=1596.1, 38.2393 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1596.1

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 30

( 39 197) ( 41 833) ( 42 67) ( 43 613) ( 44 18)

( 55 181) ( 56 118) ( 57 1000) ( 58 40) ( 69 139)

( 70 138) ( 71 831) ( 72 56) ( 82 74) ( 83 143)

( 84 64) ( 85 664) ( 86 40) ( 97 137) ( 98 73)

( 99 246) (100 26) (112 58) (113 154) (126 46)

(127 56) (140 57) (168 71) (182 28) (183 53)

NAME:? 7-Hexadecene, (Z)-

FORM:C16H32

CASNO:35507-09-6

RI:1591.4

RW:

RT:38.123

COMMENT: RI=1591.4, 38.1229 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1591.4

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 32

( 39 423) ( 40 27) ( 41 1000) ( 42 121) ( 43 300)

( 53 53) ( 55 989) ( 56 329) ( 57 420) ( 66 69)

( 67 409) ( 68 97) ( 69 896) ( 70 416) ( 71 152)

( 72 14) ( 81 287) ( 82 257) ( 83 802) ( 84 181)

( 85 96) ( 95 122) ( 96 258) ( 97 820) ( 98 144)

(110 148) (111 473) (112 74) (124 73) (125 182)

(138 60) (190 24)

NAME:? n-Heptadecene

CASNO:6765-39-5

RI:1694.1

RW:

RT:40.415

COMMENT: RI=1694.1, 40.4153 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1694.1

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 31

( 39 360) ( 41 1000) ( 42 135) ( 43 298) ( 53 55)

( 54 36) ( 55 943) ( 56 352) ( 57 472) ( 66 61)

( 67 410) ( 68 85) ( 69 933) ( 70 415) ( 71 210)

( 81 319) ( 82 280) ( 83 870) ( 84 210) ( 85 135)

( 96 265) ( 97 956) ( 98 158) (110 144) (111 559)

(112 83) (124 84) (125 234) (126 65) (138 82)

(139 96)

NAME:? n-Heptadecane

FORM:C17H36

CASNO:629-78-7

RI:1698.8

RW:

RT:40.520

COMMENT: RI=1698.8, 40.5195 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1698.8

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 24

( 39 197) ( 41 782) ( 42 64) ( 43 559) ( 44 19)

( 55 189) ( 56 127) ( 57 1000) ( 58 36) ( 69 140)

( 70 124) ( 71 839) ( 82 79) ( 83 100) ( 84 65)

( 85 637) ( 96 78) ( 97 132) ( 99 302) (111 76)

(113 175) (126 61) (127 95) (173 41)

NAME:? 9-Octadecene, (E)-

FORM:C18H36

CASNO:7206-25-9

RI:1792.3

RW:

RT:42.584

COMMENT: RI=1792.3, 42.5835 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1792.3

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 36

( 39 321) ( 40 23) ( 41 929) ( 42 86) ( 43 278)

( 53 32) ( 55 912) ( 56 287) ( 57 471) ( 66 53)

( 67 353) ( 68 79) ( 69 829) ( 70 365) ( 71 211)

( 81 313) ( 82 263) ( 83 817) ( 84 178) ( 85 118)

( 95 133) ( 96 269) ( 97 1000) ( 98 134) ( 99 47)

(109 38) (110 131) (111 612) (112 93) (124 138)

(125 268) (126 57) (138 75) (139 104) (152 62)

(153 48)

NAME:? n-Octadecane

FORM:c18hh38

CASNO:593-45-3

RI:1796.8

RW:

RT:42.684

COMMENT: RI=1796.8, 42.6841 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1796.8

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 32

( 39 140) ( 41 762) ( 42 61) ( 43 579) ( 55 175)

( 56 110) ( 57 1000) ( 69 131) ( 70 128) ( 71 925)

( 72 50) ( 82 81) ( 83 125) ( 84 61) ( 85 732)

( 86 49) ( 96 72) ( 97 160) ( 98 54) ( 99 303)

(100 28) (104 105) (110 33) (111 99) (112 60)

(113 201) (114 31) (125 56) (126 59) (127 115)

(140 50) (141 60)

NAME:n-Nonadecane

CASNO:nonadecane

RI:1898.9

RW:

RT:44.732

COMMENT: RI=1898.9, 44.7323 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1898.9

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 36

( 39 174) ( 41 724) ( 42 61) ( 43 599) ( 44 21)

( 55 191) ( 56 113) ( 57 1000) ( 58 47) ( 69 155)

( 70 117) ( 71 880) ( 72 63) ( 82 83) ( 83 171)

( 84 63) ( 85 774) ( 86 58) ( 96 90) ( 97 170)

( 98 59) ( 99 366) (100 36) (110 60) (111 120)

(112 55) (113 229) (125 78) (126 58) (127 126)

(140 41) (141 87) (154 50) (155 63) (168 48)

(197 42)

NAME:? 9-Nonadecene

FORM:C19H38

CASNO:31035-07-1

RI:1894.8

RW:

RT:44.650

COMMENT: RI=1894.8, 44.6495 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1894.8

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 37

( 39 278) ( 40 24) ( 41 757) ( 42 109) ( 43 251)

( 53 41) ( 54 27) ( 55 738) ( 56 257) ( 57 402)

( 66 54) ( 67 336) ( 68 90) ( 69 719) ( 70 303)

( 71 197) ( 81 297) ( 82 254) ( 83 799) ( 84 157)

( 85 110) ( 95 122) ( 96 264) ( 97 1000) ( 98 107)

( 99 55) (110 181) (111 608) (112 107) (113 20)

(124 146) (125 290) (138 85) (139 111) (140 39)

(152 59) (167 34)

NAME:? Eicosene

FORM:C21H42

CASNO:eicosene

RI:1993.0

RW:

RT:46.614

COMMENT: RI=1993.0, 46.6143 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1993.0

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 78

( 37 3) ( 39 255) ( 40 49) ( 41 986) ( 42 93)

( 43 385) ( 45 7) ( 51 12) ( 52 3) ( 53 34)

( 54 31) ( 55 793) ( 56 269) ( 57 495) ( 58 41)

( 62 1) ( 63 8) ( 64 2) ( 66 41) ( 67 473)

( 69 710) ( 70 368) ( 71 150) ( 78 10) ( 79 55)

( 81 481) ( 82 234) ( 83 635) ( 84 194) ( 85 140)

( 86 17) ( 95 252) ( 96 179) ( 97 1000) (104 8)

(109 123) (110 153) (111 607) (112 106) (117 17)

(119 20) (124 268) (125 479) (132 19) (133 23)

(137 57) (138 121) (139 177) (150 13) (153 95)

(157 15) (158 12) (159 14) (161 20) (164 6)

(167 51) (172 10) (178 10) (179 25) (180 51)

(200 23) (215 27) (223 10) (226 12) (227 5)

(228 8) (230 6) (238 8) (240 9) (241 7)

(242 10) (244 5) (252 27) (256 8) (278 6)

(280 17) (283 3) (296 4)

NAME:? 10-Heneicosene

FORM:C21H42

CASNO:95008-11-0

RI:2107.9

RW:

RT:48.491

COMMENT: RI=2107.9, 48.4909 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:2107.9

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 50

( 39 220) ( 40 17) ( 41 629) ( 42 69) ( 43 193)

( 53 34) ( 54 27) ( 55 673) ( 56 229) ( 57 438)

( 58 24) ( 66 45) ( 67 336) ( 68 43) ( 69 653)

( 70 287) ( 71 173) ( 79 21) ( 81 295) ( 82 239)

( 83 746) ( 84 145) ( 85 128) ( 86 17) ( 95 137)

( 96 287) ( 97 1000) ( 98 130) ( 99 37) (109 43)

(110 138) (111 674) (112 113) (113 26) (122 17)

(123 55) (124 153) (125 349) (126 48) (138 124)

(139 192) (140 53) (152 64) (153 71) (155 26)

(166 46) (167 40) (181 39) (194 30) (222 17)

NAME:? n-Docosane (C22)

FORM:C22H46

CASNO:629-97-0

RI:2222.6

RW:

RT:50.337

COMMENT: RI=2222.6, 50.3365 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:2222.6

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 64

( 39 174) ( 41 673) ( 42 53) ( 43 524) ( 44 33)

( 55 114) ( 56 98) ( 57 966) ( 58 44) ( 61 5)

( 70 76) ( 71 1000) ( 72 56) ( 83 162) ( 84 55)

( 85 837) ( 86 56) ( 94 18) ( 96 84) ( 98 51)

( 99 427) (100 16) (110 89) (111 110) (113 301)

(117 21) (124 71) (125 62) (126 63) (127 205)

(128 34) (130 11) (140 63) (141 156) (142 24)

(153 24) (154 46) (155 115) (167 29) (168 39)

(169 98) (170 17) (183 54) (184 15) (191 21)

(196 39) (197 43) (204 7) (207 66) (211 37)

(214 4) (223 14) (224 31) (225 31) (233 8)

(234 7) (238 14) (239 18) (252 18) (268 11)

(273 6) (279 5) (281 27) (291 2)

NAME:n-Eicosane

FORM:C20H42

CASNO:112-95-8

RI:1591.9

RW:

RT:38.135

COMMENT: RI=1591.9, 38.1349 min KOHALAWETA1\_590180\_AC|RI:1591.9

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Kohala-wet-alkene.MSL

NUM PEAKS: 32

( 51 134) ( 58 40) ( 59 30) ( 62 90) ( 64 33)

( 67 700) ( 87 52) ( 97 1000) (107 157) (116 152)

(118 243) (121 379) (133 161) (149 123) (150 74)

(170 448) (180 233) (182 65) (184 247) (186 102)

(188 104) (200 153) (206 55) (210 40) (214 83)

(215 35) (217 44) (228 32) (231 61) (235 26)

(267 107) (283 17)

NAME:Benzothiazole

COMMENT: RI=1277.8, 29.9377 min BIRD-PPINE-CHARCOAL|RI:1277.8

RI:1277.8

FORM:C7H5NS

CASNO:95-16-9

RT: 29.938

SOURCE:C:\PROGRA~1\NIST\AMDIS32\Bird-Charcoal.msl

NUM PEAKS: 38

( 37 12) ( 38 11) ( 39 9) ( 45 19) ( 49 4)

( 50 25) ( 51 6) ( 53 4) ( 54 17) ( 58 58)

( 60 4) ( 61 16) ( 62 23) ( 63 71) ( 68 5)

( 69 132) ( 70 7) ( 74 18) ( 75 11) ( 76 8)

( 77 13) ( 81 24) ( 82 101) ( 83 8) ( 84 42)

( 90 6) ( 91 108) ( 92 6) ( 93 13) (106 8)

(107 15) (108 354) (109 38) (110 22) (134 20)

(135 1000) (136 91) (137 52)

NAME:RI=1338.4, 29.3798 min TURETSKY2\_P9B6\_SM\_HUM\_SAUG

COMMENT: RI=1338.4, 29.3798 min TURETSKY2\_P9B6\_SM\_HUM\_SAUG|RI:1338.4

RI:1338.4

CASNO:TURETS~3-N1002

RT: 29.380

SOURCE:C:\gcms\unh\Dara\Dara 3.msl

NUM PEAKS: 22

( 39 182) ( 50 64) ( 51 134) ( 62 44) ( 63 95)

( 65 210) ( 66 60) ( 75 27) ( 77 156) ( 78 46)

( 79 87) ( 91 596) ( 92 49) ( 94 82) (103 63)

(105 106) (107 44) (119 638) (120 57) (133 204)

(134 1000) (145 47)

NAME:p-isopropenylphenol

CASNO:4286-23-1

RI:1338.4

RW:

RT:29.380

COMMENT: RI=1338.4, 29.3798 min TURETSKY2\_P9B6\_SM\_HUM\_SAUG|RI:1338.40

SOURCE:C:\gcms\unh\Dara\Dara 3.msl

NUM PEAKS: 22

( 39 182) ( 50 64) ( 51 134) ( 62 44) ( 63 95)

( 65 210) ( 66 60) ( 75 27) ( 77 156) ( 78 46)

( 79 87) ( 91 596) ( 92 49) ( 94 82) (103 63)

(105 106) (107 44) (119 638) (120 57) (133 204)

(134 1000) (145 47)

NAME:3-methylphenol

FORM:C7H8O

CASNO:108-39-4

RI:1111.9

RW:

RT:22.597

COMMENT: RI=1111.9, 22.5966 min TURETSKY12\_PRUBC1\_LG\_HUM\_SRUB|RI:1111.90

SOURCE:C:\gcms\unh\Dara\Dara 3.msl

NUM PEAKS: 23

( 37 40) ( 38 40) ( 39 166) ( 50 176) ( 51 194)

( 52 52) ( 53 74) ( 61 28) ( 62 56) ( 63 104)

( 64 11) ( 74 23) ( 77 449) ( 78 71) ( 79 409)

( 80 162) ( 89 65) ( 90 90) ( 91 50) (107 879)

(108 1000) (109 138) (167 31)