

UNIVERSIDAD CATÓLICA DE LA SANTÍSIMA CONCEPCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS



**Facultad de
Ciencias**
Universidad Católica de la Santísima Concepción

EVALUACIÓN DEL POTENCIAL DE PODAS URBANAS DE *LIQUIDAMBAR
STYRACIFLUA* COMO BIOMASA PARA GENERAR COMPUESTOS
FENÓLICOS COMO PRECURSORES DE PRODUCTOS QUÍMICOS DE ALTO
VALOR

Por

MARÍA ALEXANDRA MUÑOZ ARAVENA

Tesis entregada a la Facultad de Ciencias de la Universidad Católica de la Santísima
Concepción para optar al título profesional de Químico Ambiental.

Profesora Guía: Dr. Laura Azocar
Profesora Co-guía: Dr. Fabiola Valdebenito

Concepción
2020



Facultad de Ciencias

Universidad Católica de la Santísima Concepción

Acta de Certificación

Certifico que el trabajo de Tesis se realizó bajo mi dirección y ha sido aprobado.

Profesor Guía: Dra. Laura Azocar U.

Declaro que el contenido de esta tesis no se ha presentado total o parcialmente para optar a otro Título o Grado Académico.

María Alexandra Muñoz Aravena

Nota del Informe de Práctica o Tesis: 6.50

Fecha de aprobación del Examen de Título y Grado:

_____ de _____ de 2020

Ministro de Fe: _____

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, debo expresar mi agradecimiento a mi profesora guía Dra. Laura Azocar y a mi profesora co-guía Dra. Fabiola Valdevenito por la dedicación y apoyo a este trabajo. Asimismo, agradecer al Núcleo Milenio en procesos catalíticos hacia la química sustentable (NM CSC), a la Universidad Católica de la Santísima Concepción, a la Facultad de Ciencias, y también a los profesores, por su paciencia, dedicación, apoyo y enseñanzas de sus valiosos conocimientos que me hicieron crecer como persona y profesional. Agradecer a la Dirección de Aseo y Ornato de la Municipalidad de Concepción, quienes ayudaron en la recolección de muestras para este trabajo.

Mis agradecimientos a mi familia, por su apoyo incondicional en todo momento, especialmente a mi madre, quien es un pilar fundamental en mi vida y siempre me animo a seguir adelante. A mis amigos quienes me apoyaron de distintas maneras a lo largo de este proceso.

ÍNDICE DE CONTENIDO

	Página
1. Resumen	8
2. Introducción	10
3. Hipótesis y Objetivos	16
3.1 Hipótesis	16
3.2 Objetivos	16
3.2.1 Objetivo general	16
3.2.2 Objetivos específicos	16
4. Metodología	17
4.1 Muestreo	17
4.2 Preparación de muestras	19
4.3 Contenido humedad	20
4.4 Cuantificación extraíbles en acetona	20
4.5 Cuantificación lignina	21
4.6 Cuantificación holocelulosa	21
4.7 Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de espectrofotometría	22
4.8 Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de GC/MS	23
4.9 Análisis elemental	23
4.10 Análisis proximal mediante TGA	24
4.11 Análisis de pirolisis en TGA/GC-MS	25
4.12 Análisis estadístico	26
5. Resultados y discusión	27
5.1 Contenido Humedad	27

5.2	Contenido extraíbles en acetona	28
5.3	Contenido de lignina	28
5.4	Contenido de holocelulosa	30
5.5	Cuantificación de compuestos fenólicos en extraíbles a través de espectrofotometría	31
5.6	Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de GC/MS	32
5.7	Análisis elemental	35
5.8	Análisis proximal mediante TGA	37
5.9	Pirólisis en TGA GC-MS	38
5.9.1	Abundancia relativa	39
6.	Conclusiones	43
7.	Carta Gantt	44
8.	Bibliografía	45
9.	Anexos	51
9.1	Anexo 1	51
9.2	Anexo 2	52
9.3	Anexo 3	53
9.4	Anexo 4	54
9.5	Anexo 5	72
9.6	Anexo 6	73
9.7	Anexo 7	77
9.8	Anexo 8	78
9.9	Anexo 9	79

ÍNDICE DE FIGURAS

	Página
Figura 1 Principales procesos de conversión termoquímicos de lignina y sus productos potenciales	13
Figura 2 Obtención de moléculas bloque a partir de biomasa para procesos catalíticos hacia una química sustentable.	14
Figura 3 Sitios donde fueron muestreados los 3 ejemplares de Liquidámba en la comuna de Concepción	18
Figura 4 Metodología propuesta para determinar potencial de producción de fenol a partir de biomasa de podas de <i>Liquidambar styraciflua</i>	19
Figura 5 Contenido de Lignina en Ramas, Hojas y Corteza de <i>L. styraciflua</i>	29
Figura 6 Contenido de Holocelulosa en Ramas, Hojas y corteza de <i>L. styraciflua</i> .	30
Figura 7 Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en corteza de <i>L. styraciflua</i>	33
Figura 8 Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en hojas de <i>L. styraciflua</i>	33
Figura 9 Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en ramas de <i>Liquidambar styraciflua</i>	34
Figura 10 Análisis elemental mediante TGA realizado en muestras de biomasa residual de <i>Liquidambar styraciflua</i>	36
Figura 11 Análisis proximal mediante TGA realizado en muestras de biomasa residual de <i>Liquidambar styraciflua</i>	37

Figura 12	Fenoles encontrados en las muestras de <i>Liquidambar styraciflua</i> a través de pirólisis rápida (50 – 500 °C) en TGA/GC-MS	39
Figura 13	Abundancias relativas estimadas a partir de las áreas de los picos de GC-MS a partir de muestras de biomasa residual de <i>L. styraciflua</i>	40

ÍNDICE DE TABLAS

	Página
Tabla 1 Condiciones de operación del analizador elemental Eurovector EA 3000	24
Tabla 2 Rampas de temperatura en análisis proximal por TGA	25
Tabla 3 Composición proximal de las muestras analizadas en analizador termogravimétrico (TGA)	25
Tabla 4 Humedad y extraíbles de las diferentes muestras analizadas correspondientes a los tres ejemplares de <i>Liquidambar styraciflua</i> muestreados	27
Tabla 5 Concentración de compuestos fenólicos expresadas en como equivalentes de ácido gálico (EAG) en mg g ⁻¹ de extracto	31
Tabla 6 Identificación de compuestos principales a través de GC/MS en muestra de corteza de <i>Liquidambar styraciflua</i>	35

1. RESUMEN

En este trabajo se estudió el potencial de la biomasa residual del árbol *Liquidambar styracifula* como materia prima para la obtención de fenol y compuestos fenólicos como moléculas bloques de alto valor. Esta especie fue seleccionada debido a que es muy utilizada en la comuna de Concepción como árbol ornamental (debido a sus llamativos colores en los cambios estacionales), por lo mismo es un árbol que genera constantemente residuos de podas que son llevados a rellenos sanitarios, los cuales están casi colapsados en la actualidad.

El muestreo fue realizado en el centro de la ciudad de Concepción, Bío Bío, Chile. Se analizaron muestras de ramas, hojas y corteza del árbol para conocer su composición química y lignocelulósica, separando esta última en lignina y holocelulosa.

Las muestras se sometieron a pirólisis bajo condiciones estándar en un TGA/GC-MS para detectar la generación de fenol y compuestos fenólicos a partir de ellas. También se analizaron los extraíbles obtenidos de cada muestra por espectrofotometría, para conocer la cantidad de fenoles obtenidos directamente. Los fenoles obtenidos a partir de los extraíbles, se encontraron en cantidades significativamente superiores en las muestras de corteza ($3,55 \text{ mg g}^{-1}$, $p < 0,05$), lo cual se relaciona directamente con la mayor cantidad de lignina de este residuo (45,22%). Respecto al fenol generado después de la pirólisis, se obtuvo una mayor cantidad en las muestras de hojas (8,98%), respecto a las muestras de corteza (0,21%) y ramas (0,40%). Se destaca también una importante cantidad de compuestos fenólicos encontrados en la muestra de corteza tales como, 2-metoxifenol y 2-metoxi-4-vinilfenol, en comparación a las otras muestras analizadas. De acuerdo a estos resultados, las muestras correspondientes a corteza y hojas de Liquidámbar presentaron un mayor potencial para obtener fenol y compuestos fenólicos como moléculas bloque para ser usadas en el sector industrial químico y farmacéutico, entre otros.

1. ABSTRACT

In this work we studied the potential of residual biomass of the *Liquidambar styraciflua* tree as a raw material to obtain phenol, a high value chemical. This species was selected because it is widely used in the city of Concepción as an ornamental tree (due to its striking colors in seasonal changes), therefore it is a tree that constantly generates pruning residues that are taken to landfills, which they are reaching its capacity.

The sampling was carried out in the center of the city of Concepción, Bio Bio, Chile. Samples of branches, leaves and bark were analyzed to know their chemical and lignocellulosic composition, separating the latter into lignin and holocellulose.

The samples were subjected to pyrolysis in a TGA / GC-MS to detect the generation of phenolic compounds from it. The removables obtained from each sample were also analyzed by spectrophotometry, to know the amount of phenols obtained directly. Phenols obtained from extractables were found in greater quantity in the bark samples (3.55 mg g⁻¹), directly related to the greater amount of lignin (45.22%), where there are significant differences ($p < 0.05$). Regarding phenol generated after pyrolysis, a higher amount was found in leaf samples (8.98%), compared to bark samples (0.21%) and branches (0.4%). It is also remarkable the great amount of phenolic compounds found in the bark sample, compared to the other samples. According to these results, the samples corresponding to bark and leaves showed a higher potential to obtain phenol and phenolic compounds as building blocks molecules to be used in the chemical and pharmaceutical industries.

2. INTRODUCCIÓN

En los últimos años la prevención de la contaminación ambiental ha sido un tema de estudio a nivel global, siendo la industria química uno de los principales focos de contaminación (Quintero y Quintero, 2015), aportando con el 17% de las emisiones directas de CO₂ a la atmosfera (Montes-Valencia, 2015).

Es por esto que se han incorporado áreas de estudio tales como “Química verde” o “Química sostenible”, las cuales tienen como objetivo reemplazar materias y procesos no sostenibles, reducir el uso de energía y productos químicos. (Vidal *et al.*, 2017). Algunos ejemplos son el empleo de solventes verdes, líquidos iónicos, catalizadores, aplicaciones de fluidos súper críticos, entre otros (Sierra *et al.*, 2014).

En este contexto surge el termino **biomasa**, que es definida como la fracción biodegradable de los productos, desechos y residuos de origen biológico, procedentes de actividades agrarias, silvicultura e industrias, como la pesca y acuicultura, así como también se considera biomasa la fracción biológica biodegradable de los residuos municipales (Hergueds y Taranco, 2012).

La **biomasa** es una alternativa renovable para el remplazo de combustibles fósiles, tales como carbón, petróleo y gas natural (Romero, 2010). Por sus características caloríficas y fisicoquímicas la biomasa puede ser utilizada como materia prima para la producción de biocombustibles, energía (calor y electricidad) y generación de productos químicos (Martínez, 2009). La utilización de **biomasa** tiene el potencial de reducir la dependencia del petróleo y las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) (Romanelli *et al.*, 2017).

La clasificación de **biomasa** según su origen se divide en tres, la primera de ella, biomasa natural, esta se produce de forma espontánea en la naturaleza, en ecosistemas que no hayan sufrido intervención humana. La explotación de esta biomasa no es muy

rentable, ya que la gestión de la adquisición y transporte de las materias primas al lugar de utilización no son rentables. La segunda clasificación es la **biomasa** residual, la cual se obtiene de diversas actividades industriales, alimentarias, pecuarias y madereras entre otras, y sus sub productos poseen potencial energético. Por último, se encuentra la **biomasa** proveniente de cultivos energéticos, estos son cultivos con fines no alimentarios destinados a la producción de energía. A diferencia de los cultivos agrícolas alimenticios, los agro-energéticos son seleccionados en base a la producción de cantidad de biomasa, y no de calidad. Las especies suelen ser seleccionadas por su robustez a fin de abaratar costos de cultivo y así disminuir el precio de la biomasa final (Hergueds y Taranco, 2012).

Una de las biomásas que ha generado amplio interés en los últimos años corresponde a la **biomasa residual generada en las ciudades producto de la podas y mantención de áreas verdes (UGW)** (Escalante *et al.*, 2011). El interés en esta biomasa se debe a su disponibilidad en el radio urbano, lo cual se asocia a bajos costos de transporte ya sea para producir biocombustible, o para obtener productos de alto valor en la industria farmacéutica, química y cosmética, entre otras (Wetzel *et al.*, 2006). Estos residuos son generados a nivel local, ya que los municipios de Chile tienen por función y cumplimiento de la ley 18.695 Orgánica constitucional de Municipalidades (2002), Art. 3 “El aseo y ornato de la comuna” y según el Art. 25 “La construcción, conservación y administración de las áreas verdes de la comuna” (Ley N° 18695, 1988).

Los **UGW** provienen principalmente de árboles y residuos orgánicos, es la más común y abundante en el mundo, por lo que es considerada prácticamente inagotable (Romanelli *et al.*, 2017).

La **biomasa** lignocelulósica está compuesta principalmente por polímeros de celulosa, hemicelulosas y lignina, los cuales son el soporte estructural de la pared celular (Rowell *et al.*, 2005). La fracción total de polisacáridos, se conoce como holocelulosa y está

formada por la combinación de celulosa y hemicelulosa (Barroso, 2010). La celulosa está formada por unidades de glucosa y es considerada el biopolímero más abundante en la tierra. Las hemicelulosas son polímeros heterogéneos, cortos y ramificados compuestos por pentosas, hexosas y diferentes tipos de ácidos urónicos. Por último, la **lignina** es considerada un heteropolímero constituido por tres tipos de monómeros básicos de fenilpropano, se obtiene como residuo de la industria de celulosa y papel, por lo que es considerado un residuo (Rowell *et al.*, 2005). La lignina es una fuente de materia prima renovable, y alternativa para la obtención de productos de alto valor, debido a su composición química, se considera un *commodity* (fuente de compuestos aromáticos e hidrocarburos) para la industria química (Chávez-Sifontes y Domine, 2013).

La biomasa se puede degradar a través de diferentes procesos bioquímicos, térmicos y fisicoquímicos. Dentro de los procesos de transformación termoquímicos se cuenta con la pirólisis, la gasificación, la combustión y la licuefacción. Estos procesos termoquímicos presentan tres variables, el tipo de biomasa, perfil de tiempo-temperatura y la atmósfera del proceso (Gómez *et al.*, 2004).

La figura 1 muestra una clasificación esquemática de varios procesos termoquímicos a los que se puede someter la lignina, así como también se muestran los principales productos que se pueden obtener (Pandey y Kim, 2011). El proceso térmico denominado pirólisis, ocurre en ausencia de oxígeno y consta de tres etapas, la primera de ellas es la alimentación o dosificación de materia prima, luego la transformación de la masa orgánica y finalmente la obtención y separación de los productos, los cuales se dividen en tres fracciones, gaseosa, líquida y sólida (Klug, 2012). La biomasa está compuesta principalmente por largas cadenas poliméricas de celulosa, lignina, hemicelulosa, pectina, entre otras, y a través de la pirolisis las moléculas más grandes comienzan a descomponerse para producir moléculas más pequeñas. Dependiendo de la temperatura,

tiempo y velocidad de calentamiento y presión se obtienen distintas proporciones de productos finales (Chowdhury *et al.*, 2017).

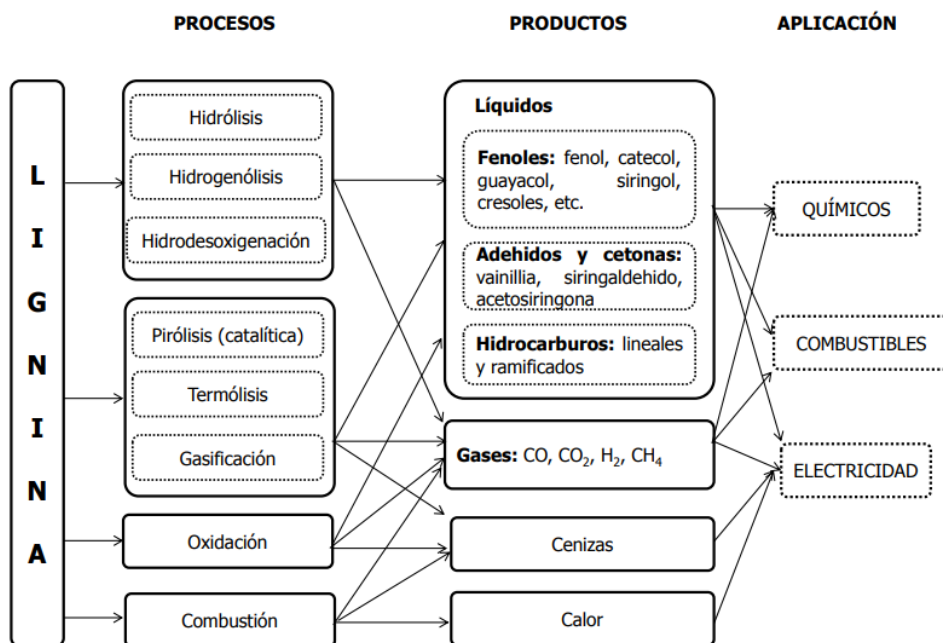


Fig. 1 Principales procesos de conversión termoquímica de lignina y sus productos potenciales (Pandey y Kim, 2011).

La pirólisis es clasificada como rápida y lenta, dependiendo de la temperatura empleada y el tiempo de residencia. Basado en el medio, se puede clasificar como pirólisis hidratada e hidropirólisis. La pirólisis lenta y rápida son llevadas a cabo en atmósferas inertes, mientras que la pirólisis hidratada se lleva a cabo en presencia de agua (Chowdhury *et al.*, 2017).

Esta tesis está enmarcada dentro de la primera etapa del proyecto "Núcleo Milenio sobre Procesos Catalítico hacia la Química Sostenible" (NM CSC). Para obtener dichos

productos objetivos, la primera etapa de esta investigación consiste en la obtención de moléculas bloque (fenol, furfural, ácido levulínico y 2-metoxi fenol) a partir de biomasa, es en ésta primera etapa del proyecto en donde se desarrolló esta tesis cuyo objetivo es la obtención de fenol, una de las moléculas bloque más importantes. En la figura 2 se muestra el esquema general del proyecto, cuyo objetivo final es la obtención de productos objetivos (por ejemplo, ciclohexanona, ciclohexano, benceno, ciclopentanona, cresol, ácido pentanoico, etc.) a través de procesos catalíticos sustentables.

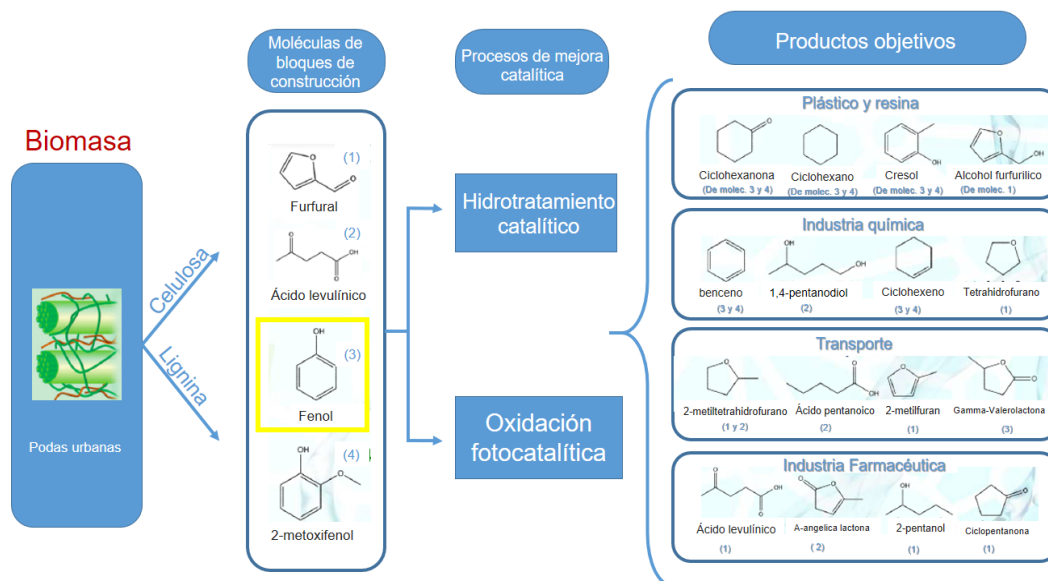


Fig. 2 Obtención de moléculas bloque a partir de biomasa para procesos catalíticos hacia una química sustentable.

Los compuestos fenólicos son utilizados como moléculas base para la generación de compuestos de valor en la industria química, farmacéutica, así como en la generación de plásticos y resinas. Los compuestos en base a fenol son actualmente producidos en base sintética (a partir del petróleo) (Chávez-Sifontes y Domine, 2013).

Para el caso de la obtención de fenol, se han propuesto rutas termoquímicas en donde la presencia de **lignina** en la biomasa favorece la formación de moléculas que son consideradas precursores de fenol, a través de pirólisis (Wang *et al.*, 2011).

Los fenoles pueden ser obtenidos a partir de la fracción extraíble de la biomasa lignocelulósica debido al metabolismo secundario de las plantas, junto a otros compuestos tales como ácidos grasos, alcoholes grasos, ácidos resínicos, terpenos, fenoles, taninos, esteroides, alcaloides, compuestos nitrogenados, azúcares, grasas y ceras (Taiz y Zeiger, 2006).

De acuerdo a lo anterior, surge la necesidad de buscar fuentes renovables para la generación de moléculas bloque que permitan reemplazar compuestos químicos obtenidos a partir del petróleo. Lo anterior, genera el interés por conocer el potencial de biomasa de podas urbanas de la ciudad de Concepción, para la producción de compuestos fenólicos a través de procesos termoquímicos. Para esto se seleccionó el árbol ornamental más abundante en la ciudad de Concepción y que genera la mayor cantidad de residuos, *Liquidambar Styraciflua*. (ver anexo 1)

3. HIPÓTESIS Y OBJETIVOS

3.1 Hipótesis

Es posible obtener mayor variedad de compuestos fenólicos a partir de la pirólisis de corteza de podas urbanas de *Liquidambar styraciflua*, respecto a sus ramas y hojas, debido a su composición lignocelulósica.

3.2 Objetivos

3.2.1 Objetivo General

Evaluar la biomasa generada a partir de las podas urbanas de *Liquidambar styraciflua* de la ciudad de Concepción como fuente de obtención de compuestos fenólicos.

3.2.2 Objetivos específicos

- Estudiar la composición lignocelulósica de podas urbanas de *Liquidambar styraciflua* a través de metodologías estandarizadas.
- Evaluar la obtención de compuestos fenólicos de manera directa a partir de la fracción extraíble de podas urbanas de *Liquidambar styraciflua*.
- Determinar la variedad de compuestos fenólicos obtenidos a partir de las podas de *Liquidambar styraciflua* a través de pirólisis (TGA/GG-MS).

4. METODOLOGÍA

El estudio se realizó en la ciudad de Concepción. El clima del área se caracteriza por ser templado marítimo con influencia mediterránea. Su temperatura media anual es de 9 °C alcanzando la máxima comúnmente a los 20 °C (Verano: promedio 17 °C, Invierno: 8 °C). La precipitación y la humedad relativa son de 1.100 pmm y 66% respectivamente.

4.1 Muestreo

Se utilizó biomasa obtenida a partir de podas urbanas de la ciudad de Concepción, las cuales corresponden a ramas, hojas y corteza de *Liquidambar styraciflua*.

De acuerdo a información recabada en entrevista al director del Departamento de Aseo y Ornato de la Municipalidad de Concepción (ver Anexo 1), se estableció que la especie Liquidámbar es la más abundante en la comuna y requiere de poda periódica debido a su rápido crecimiento, siendo la que genera una mayor acumulación de residuos. Por otra parte, sus hojas caducifolias requieren un constante aseo en las calles, ya que la acumulación de estas puede producir el colapso de las rejillas del sistema de alcantarillado, esta fue una de las razones por la que se decidió trabajar con la especie Liquidámbar.

En la literatura científica existen numerosas investigaciones acerca del contenido de fenol en las ramas y hojas de los árboles (Rosales-Castro *et al.*, 2016; Garrido *et al.*, 2013; Pérez-Pérez *et al.*, 2014; Ocampo *et al.*, 2014), por lo que el muestreo consideró principalmente estas partes del árbol, además de la corteza.

Se muestrearon 3 árboles correspondientes a la especie *Liquidambar styraciflua* en Concepción, en distintos puntos de la comuna. El primero de ellos se encontraba en la intersección de Aníbal Pinto con Chacabuco (36°49'48.5"S 73°02'50.6"W), el segundo

ejemplar se encontraba frente Plaza Perú por Chacabuco ($36^{\circ}49'35.6''S$ $73^{\circ}02'27.0''W$), el tercero y último se ubicaba en Freire, entre las calles Orompello y Tucapel ($36^{\circ}49'24.8''S$ $73^{\circ}02'47.7''W$).

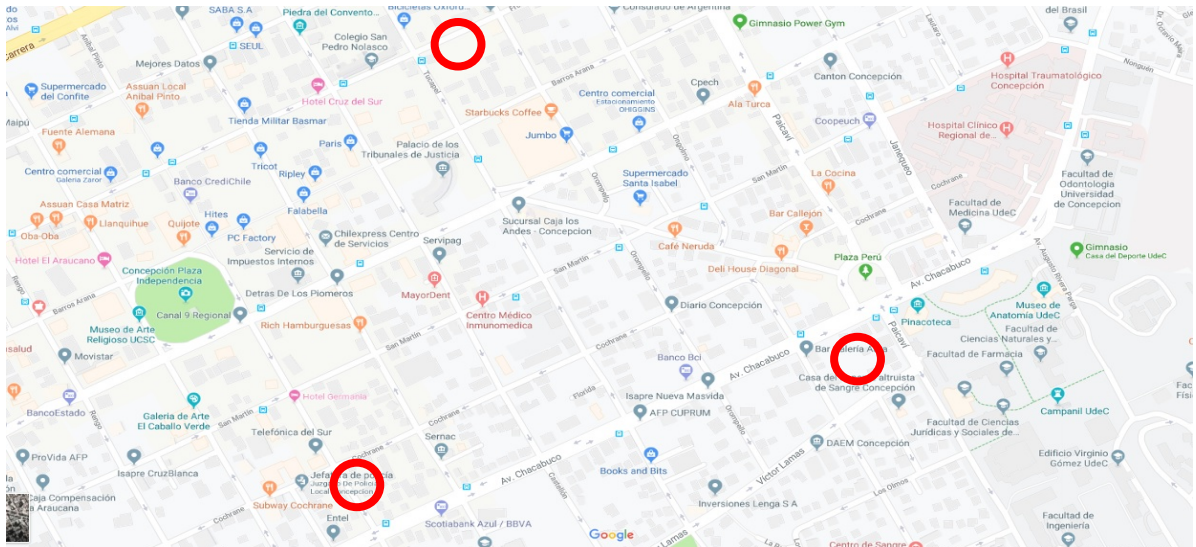


Fig. 3. Sitios donde fueron muestreados los 3 ejemplares de Liquidámbar en la comuna de Concepción.

De cada individuo se recolectaron muestras de hojas, ramas y corteza. Las cuales fueron obtenidas con la ayuda del Departamento de Aseo y Ornato de la Comuna de Concepción. Se procedió a cortar las ramas bajas de la copa del árbol con una motosierra de poda de largo alcance y cuidadosamente se recolectaron las muestras necesarias. Se realizó la misma metodología de muestreo en los 3 individuos

4.2 Preparación de las muestras

Las hojas, ramas y corteza se secaron a 105 °C en una estufa por 24 horas. Posteriormente la muestra se sometió a molienda en un molino, para luego ser tamizadas, donde se utilizó la fracción comprendida entre 0,425 y 0,212 mm, siendo guardada la fracción inferior a 0,212 mm para posteriores análisis. Las muestras finalmente fueron almacenadas en tubos falcón en un desecador de sílica gel (TAPPI T 257 cm85).

La biomasa fue caracterizada siguiendo la metodología de normas TAPPI, las cuales son estándares internacionales para la caracterización de productos madereros, que se pueden adaptar para la caracterización de cualquier material lignocelulósico (Fig. 4).

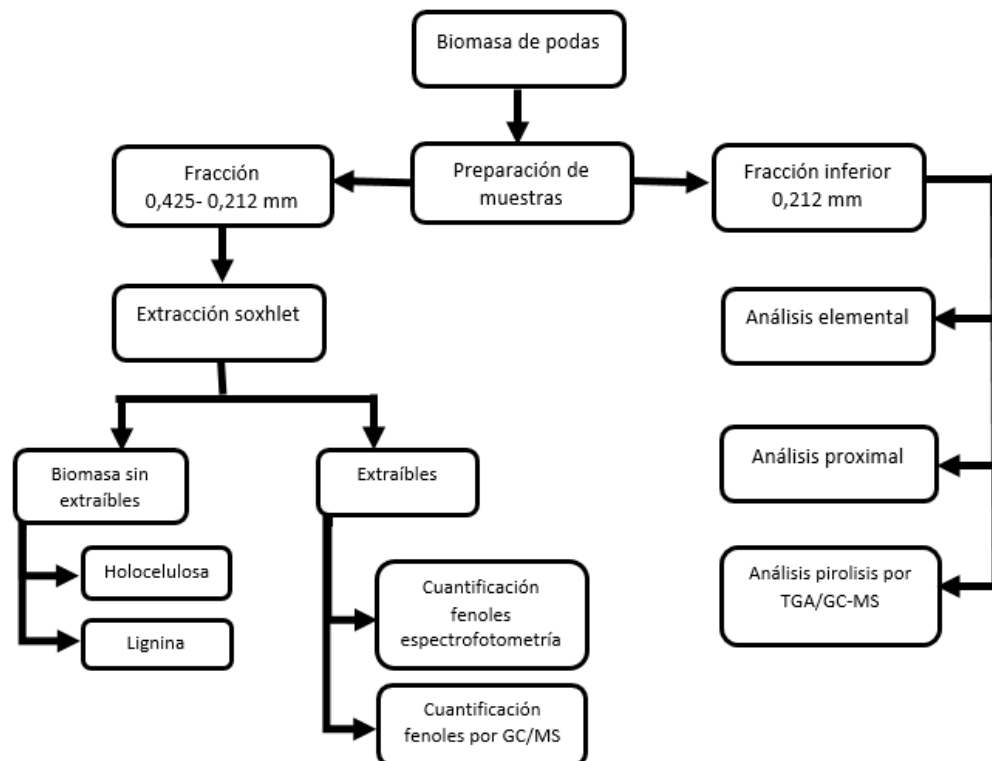


Fig. 4. Metodología propuesta para determinar potencial de producción de fenol a partir de biomasa de podas de *Liquidambar styraciflua*

4.3 Contenido de humedad

La humedad de la muestra corresponde a la humedad de equilibrio de cada muestra y es tomada en cuenta en posteriores análisis (TAPPI T264 cm-97).

La humedad de las muestras preparadas según la norma TAPPI 257 cm-85 fue determinada pesando 2,00 g de muestra (m_i) en un recipiente tarado libre de humedad, luego, el conjunto se colocó en una estufa a 105 °C durante 24 horas. Una vez transcurrido el tiempo de secado, las muestras se enfriaron a temperatura ambiente dentro de un desecador de sílica gel. Una vez frías las muestras se pesaron (m_f) y se determinó la humedad de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\text{Humedad (\%)} = \frac{m_i - m_f}{m_i} \cdot 100$$

4.4 Cuantificación de extraíbles

Se pesaron 8,0 g de muestra seca (m_i) preparada anteriormente, en un dedal de extracción previamente pesado. Se utilizó un papel filtro como tapa, el cual también estaba previamente pesado, y así evitar pérdida de muestra durante la extracción. Se colocó todo en un extractor soxhlet y se agregaron 250 mL de acetona. La mezcla fue llevada a ebullición por 6 horas. Una vez transcurrido el tiempo se dejó enfriar, para posteriormente desmontar el soxhlet y dejar evaporar parcialmente el disolvente del matraz a temperatura atmosférica bajo campana. La muestra del matraz fue almacenada para análisis posteriores. El dedal con la muestra sólida fue retirado del soxhlet y secado en estufa a 105 °C durante 24 horas o hasta que el extracto quedara completamente seco. Finalmente el dedal fue pesado y la masa extraída (m_f) fue calculada de acuerdo a metodología estándar (TAPPI, 2007).

El porcentaje de extraíbles se obtuvo mediante la siguiente ecuación, expresándose en base seca:

$$\text{Extraíbles (\%)} = \frac{m_i - m_f}{m_i} \cdot 100$$

4.5 Cuantificación de lignina

Se pesó 1,00 g de la muestra libre de extraíbles (m_i), para posteriormente adicionarle 15 mL de ácido sulfúrico al 72%, agitando ocasionalmente durante 2 horas a temperatura ambiente. Una vez transcurrido el tiempo la muestra se cambia a un matraz de 1000 mL donde se añadieron 560 mL de agua destilada, llevándola a ebullición con reflujo durante 4 horas. Utilizando un papel filtro N° 3 previamente pesado, se procedió a filtrar la disolución, lavando el precipitado con agua caliente hasta pH neutro. El filtro se secó en estufa a 105 °C durante 24 horas. Una vez transcurrido el tiempo el filtro se dejó en un desecador de sílica gel para evitar la absorción de humedad. Posteriormente se pesó el filtro frío (m_f) y se procedió a determinar el porcentaje de lignina con la siguiente ecuación (TAPPI, 2007):

$$\text{Lignina (\%)} = \frac{m_f}{m_i} \cdot 100$$

4.6 Cuantificación de holocelulosa

Se pesaron 2,50 g de muestras libres de extractos y secas (m_i), se agregaron a un matraz Erlenmeyer en donde se le añadió 80 mL de agua destilada caliente (70-80°C), la mezcla fue sumergida en un baño termostatzado a 70 °C, agitando periódicamente con una vagueta de vidrio hasta homogenizarla. Posteriormente se añadió cada 60 minutos 0,5 mL de ácido acético glacial y 2,6 mL de clorito sódico al 25%, hasta

completar un total de 6 horas. Una vez transcurrido el tiempo la mezcla se mantuvo en el baño termostatzado durante 12 horas sin nuevas adiciones. Finalmente, el residuo sólido, que corresponde a la holocelulosa se filtró, utilizando un papel filtro N°2 previamente pesado. Una vez filtrado este se secó en una estufa a 105°C durante 24 horas, posteriormente se enfrió en un desecador y una vez frío se determinó la cantidad de holocelulosa mediante la siguiente ecuación (Wise et al., 1946):

$$\text{Holocelulosa (\%)} = \frac{m_f}{m_i} \cdot 100$$

4.7 Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de espectrofotometría

El extracto obtenido en la extracción soxhlet se concentra en rotavapor a 40°C, y se re suspende en etanol.

La cuantificación de fenol se realizó mediante el método de Folín-Ciocalteu, siguiendo la metodología de Rosales-Castro y col., (2009). Se trabajó con una curva de calibración de ácido gálico a cinco concentraciones distintas (0,5; 0,4; 0,3; 0,2 y 0,1) mg mL⁻¹, la cual se leyó en un espectrofotómetro a 760 nm.

A 0,1 mL de extraíbles se le adicionó 6 mL de agua destilada y 1,5 mL de carbonato de sodio al 20%, transcurrido 8 minutos se le agregó 0,5 mL de reactivo comercial de Folín-Ciocalteu, después de un minuto se le volvió a agregar 1,5 mL de carbonato de sodio al 20%, se aforó a 10 mL y se dejó reposar durante 2 horas. Posteriormente se leyó la absorbancia a una longitud de onda de 760 nm y los resultados se expresan como equivalentes de ácido gálico en mg g⁻¹ de extracto seco. Las lecturas de absorbancia se realizaron por triplicado.

4.8 Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de GC/MS

El extracto obtenido en la extracción soxhlet se concentró en rotavapor a 40°C y se re suspende en hexano. Las muestras se analizaron en un GC/MS marca Shimadzu modelo GCMS-QP5050A equipado con una columna HP5 de 30 metros, volumen de inyección 1µL y temperatura de 300°C.

4.9 Análisis elemental

Para este análisis se utilizó la fracción tamizada inferior a 0,212 mm que fue almacenada anteriormente.

Se cuantificó el contenido de carbono (C), hidrógeno (H), azufre (S) y nitrógeno (N) en las muestras de hojas, ramas y corteza de Liquidámbar bajo las condiciones mostradas en la Tabla 1. Para ello se utilizó un Analizador Elemental Eurovector EA 3000. Además, se empleó una muestra de Lignina estándar 300519 Sm (SG, 4x1). El contenido de oxígeno se determinó por diferencia siguiendo la metodología propuesta por Rocha (2016).

Este análisis fue realizado por triplicado para cada muestra. Inicialmente se pesaron las muestras en una microbalanza (Sartorius CP2-P) entre 1,5 y 2,5 mg para cada muestra. Posteriormente se dispuso cada muestra en una cápsula de estaño previamente tarada y se cerró empleando una tenaza de punta recta, cuidando que no quedara aire dentro de esta. Se calibró el analizador elemental mediante la L-Cistina a 5 niveles (0,1; 0,25; 0,5; 1,0 y 2,0 mg) y se cargó la muestra encapsulada en el equipo (Rocha, 2016).

Tabla 1. Condiciones de operación del analizador elemental Eurovector EA 3000.

Parámetro	Valor
Gas carrier [kPa]	120
Gas de purga [mL/min]	200
Oxígeno [mL]	20
ΔPO_2 [kPa]	35
Tiempo de oxidación [s]	11
Retraso de muestreo [s]	12
Tiempo de corrida [s]	44
Temperatura del reactor [°C]	1000
Horno GC [°C]	90

4.10 Análisis proximal mediante TGA

Se cuantificó el contenido de humedad, volátiles, carbón fijo y cenizas en las muestras. Se utilizó un analizador termogravimétrico (TGA) (Perkin Elmer STA 6000), siguiendo la metodología propuesta por García y col., (2013) y adaptada por Azócar y col., (2019). Este análisis se aplicó a las 9 muestras totales obtenidas.

La muestra se cargó en el TGA (20 μg) y se configuró el análisis con un flujo de gas de 40 mLmin^{-1} bajo las siguientes condiciones de operación (Tabla 2).

En la Tabla 3 se muestra una descripción más detallada de la metodología.

Tabla 2. Rampas de temperatura en análisis proximal por TGA

Rampa	Temperatura inicial [°C]	Tasa de calentamiento [°C/min]	Temperatura final [°C]	Tiempo a T° final (Hold time) [min]	Gas
1	20	50	120	3	Nitrógeno
2	120	100	950	0	Nitrógeno
3	950	-100	450	0	Nitrógeno
4	450	100	800	3	Oxígeno

Tabla 3. Composición proximal de las muestras analizadas en analizador termogravimétrico (TGA).

Proximal [%]	Descripción
Humedad	Pérdida de peso entre la temperatura ambiente y los 120°C (rampa 1)
Sólidos volátiles	Pérdida de peso entre 120°C y 950°C (rampa 2)
Carbón fijo	Pérdida de peso entre 450°C y 800°C (rampa 4)
Ceniza	Remanente luego de combustión a 800°C (rampa 4)

4.11 Análisis de Pirólisis en TGA/GC-MS

El análisis de pirólisis fue realizado utilizando un analizador termogravimétrico (TGA/GC-MS) (Perkin Elmer STA 6000), acoplado a un analizador GS-MS (Perkin Elmer STA 6000 – Software Pyris Manager). El cromatógrafo de gases estuvo equipado con una columna capilar ELITE – SMS II 30m largo y 250 µm de diámetro. Los datos fueron analizados utilizando un computador con el software (TurboMass Ver6.1.0) y la base de datos de la biblioteca de espectros de masas (NIST MS Search 2.2).

4.12 Análisis Estadístico

A partir del análisis químico de las materias primas se realizó estadística descriptiva considerando 3 réplicas por materia prima.

También se realizó un ANOVA de una vía para determinar si existen diferencias significativas entre las medias de hojas, ramas y corteza para cada análisis realizado, por lo que se considera como Hipótesis nula (H_0) que las medias de los grupos son iguales, y como Hipótesis alternativa (H_1) que alguna de las medias es distinta. Se usó un $\alpha = 0,05$ y $F_{\text{critico}} = 5,143$. Al encontrar diferencia entre los grupos y rechazar la hipótesis nula, se realizó el test de Tuckey, el cual nos indicó que grupo difiere.

5. RESULTADOS Y DISCUSION

A continuación, se presentan los resultados del análisis de humedad, contenido de extraíbles, holocelulosa y lignina de las diferentes muestras de Liquidámbar tomadas en la ciudad de Concepción.

5.1 Contenido de Humedad

Los porcentajes de humedad más altos se obtuvieron en las muestras de hojas, y los más bajos se obtuvieron en las muestras de corteza (Tabla 4). Esto se podría atribuir a la forma del árbol, ya que las hojas, son las más expuestas a lluvia y humedad, en cambio la corteza del árbol se encuentra de cierta forma cubierta por las hojas y ramas. También se podría atribuir a la capacidad de retención de agua que tienen los tejidos estructurales de estos residuos (Kim *et al*, 2015).

Tabla 4. Humedad y extraíbles de las diferentes muestras analizadas correspondientes a los tres ejemplares de *Liquidambar styraciflua* muestreados.

Muestras	Lugar	Humedad (%)	Extraíbles (%)
Hojas	Plaza Perú	67,60	17,86
Hojas	Chacabuco	61,14	12,45
Hojas	Freire	69,84	12,12
Ramas	Plaza Perú	55,01	9,53
Ramas	Chacabuco	53,67	7,14
Ramas	Freire	55,63	-
Corteza	Plaza Perú	23,43	8,91
Corteza	Chacabuco	20,55	8,76
Corteza	Freire	30,83	8,09

De acuerdo al análisis estadístico ANOVA de una vía se detectó una diferencia estadísticamente significativa entre los grupos ($F(2,6) = 82,45$, $p = 0,000$), al aplicar la prueba a posteriori de Tuckey (HSD) arroja que las tres medias son significativamente diferentes entre sí.

5.2 Contenido de Extraíbles en acetona

Los extraíbles corresponden a compuestos orgánicos encontrados en la biomasa, pero estos no forman parte de la estructura de la pared celular de la madera. Principalmente se encuentran ácidos grasos, ácidos resínicos, taninos, flavonoides y fenoles (Rowell 1983).

El porcentaje de extraíbles fue variable dependiendo del tipo de muestra (Tabla 4), obteniendo la mayor concentración de extraíbles en hojas (12,12% a 17,86%), lo cual coincide con lo expresado por Rosales-Castro y col. (2016), al igual que el menor porcentaje se encontró en las ramas (7,14% a 9,53%) y corteza (8,09% a 8,91%). Si bien no corresponden a la misma especie, la metodología utilizada es la misma. En cambio lo reportado por Mancarz y col. (2019) en hojas y tallo utilizando acetona como disolvente de extracción obtuvo resultados mayores y sin diferencias significativas entre muestras.

5.3 Contenido de Lignina

Los porcentajes de lignina obtenidos en hojas (28,95% a 34,45%) (Fig. 5; Tabla A1, Anexo 2) fueron muy cercanos a los reportados por Rosales-Castro y col. (2016) con la especie *Cedrela odorata* ya que sus valores variaron de 26,57% a 33,49%. En cuanto a los valores obtenidos para las muestras de ramas (9,55% a 14,53%) variaron, siendo

mayores los reportados por Rosales-Castro (27,07% a 32, 24%). Los porcentajes de lignina en corteza obtenido fueron los más altos (43,16% a 47,31%), esta especie es muy utilizada en plantaciones debido a la buena madera que se obtiene y también es un árbol ornamental muy usado en México. En general, se aprecia el mayor contenido de lignina en corteza y el más bajo en ramas (Fig. 5).

En comparación a los porcentajes de ramas de *Liquidambar styraciflua* reportados por Kim y colaboradores (2015) varían un poco, ya que tanto las muestras expuestas a CO₂ y las que no estaban expuestas presentaron porcentajes cercanos al 25% de lignina, y las muestras de Concepción presentan un porcentaje entre 9,55% y 14,53% de lignina. Por otro lado, Mosquera y colaboradores (2015) cuantificaron los porcentajes de lignina ácida insoluble en los culmos (tallos) de *Guadua angustifolia* siendo muestreada en 4 sitios diferentes, siendo porcentajes más altos que los obtenidos en las muestras de ramas de *Liquidambar styraciflua*, pero inferiores a los porcentajes obtenidos de corteza.

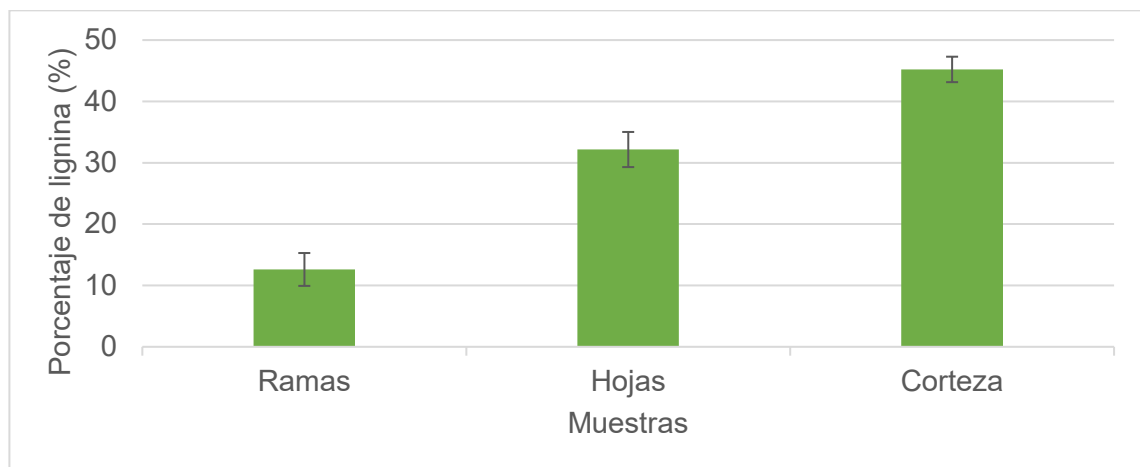


Fig. 5. Contenido de Lignina en Ramas, Hojas y Corteza de *L. styraciflua*.
(R= C; H= B; C= A)

De acuerdo al análisis estadístico ANOVA de una vía se detectó una diferencia estadísticamente significativa entre los grupos ($F(2,6) = 123,17, p=0,000$), al aplicar la

prueba a posteriori de Tuckey (HSD) arroja que las tres medias son significativamente diferentes entre sí.

5.4 Contenido de Holocelulosa

El contenido de holocelulosa fue mayor en las muestras de ramas (15,97% a 20,70%) (Fig. 6; Tabla A1, Anexo 2) y el menor se encontró en las hojas (6,26% a 11,84%). Esto discrepa con lo reportado por Rosales-Castro y *col.* (2016), ya que los porcentajes registrados son más altos y similares hojas (60,36% a 67,11%) con ramas (69,74% a 78,46%), en cambio los obtenidos en este trabajo son notablemente menores y a la vez se presenta una diferencia entre hojas y ramas. En cuanto al contenido de holocelulosa en corteza, se registró de 11,06% a 18,60%. Por otro lado, Torres y *colaboradores* (2002) estudiaron la composición lignocelulósica a través de la normativa TAPPI de ciprés, encino y castaño, obteniendo porcentajes de holocelulosa de 68,8%, 74,9% y 71,3% los cuales son mucho más altos que los obtenidos de *L. styraciflua*.

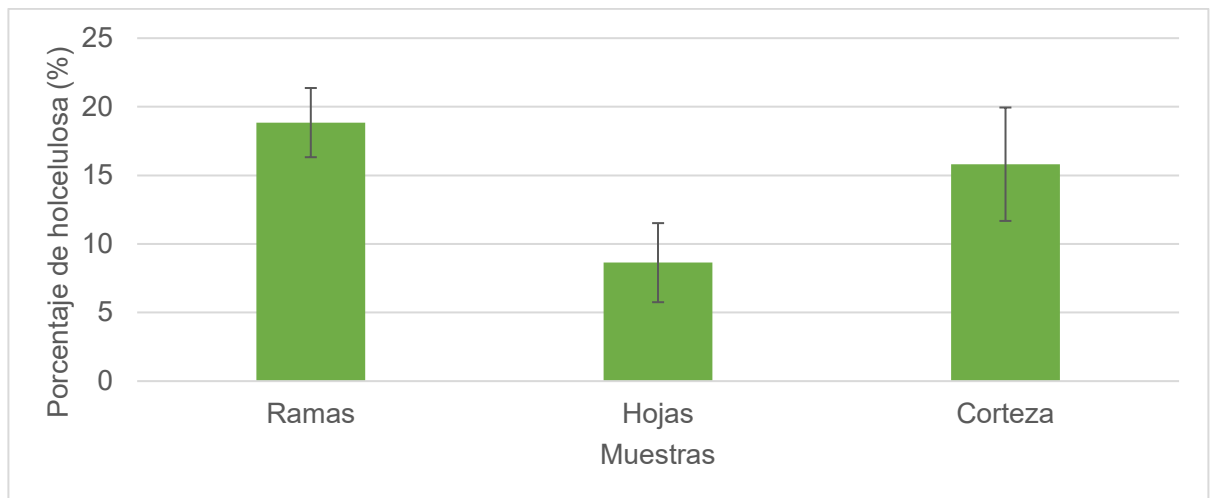


Fig. 6. Contenido de Holocelulosa en Ramas, Hojas y Corteza de *L. styraciflua*.
(R= A; H=B; C= AB)

De acuerdo al análisis estadístico ANOVA de una vía se detectó una diferencia estadísticamente significativa entre los grupos ($F(2,6) = 7,29$, $p = 0,0215$), al aplicar la prueba a posteriori de Tuckey (HSD) arroja que hay dos grupos (hojas y ramas) en los que las medias son significativamente diferentes entre sí.

5.5 Cuantificación de compuestos fenólicos en extraíbles a través de espectrofotometría.

La concentración de fenoles fue mayor en la corteza, y la menor concentración fue encontrada en las ramas (Tabla 5). De acuerdo al análisis estadístico ANOVA de una vía no se detectó una diferencia estadísticamente significativa entre los grupos ($F(2,6) = 4,89$, $p = 0,0551$). (Anexo Figura A1).

Tabla 5. Concentración de compuestos fenólicos expresadas en como equivalentes de ácido gálico (EAG) en mg g^{-1} de extracto.

Muestras	Lugar	Compuestos fenólicos (mg g^{-1})
Ramas	Plaza Perú	$0,842 \pm 0,019$
Ramas	Chacabuco	$1,388 \pm 0,096$
Ramas	Freire	$0,761 \pm 0,015$
Hojas	Plaza Perú	$2,274 \pm 0,017$
Hojas	Chacabuco	$1,922 \pm 0,004$
Hojas	Freire	$0,537 \pm 0,018$
Corteza	Plaza Perú	$3,169 \pm 0,011$
Corteza	Chacabuco	$5,234 \pm 0,011$
Corteza	Freire	$2,247 \pm 0,020$

Los valores de fenoles obtenidos tanto de ramas como de hojas varían bastante con los obtenidos por Rosales-Castro y colaboradores (2016), ya que los datos reportados en su trabajo son mucho más altos y también obtuvo mayor cantidad de fenoles en las ramas

que en las hojas. Esta diferencia en los resultados se puede atribuir a la diferencia de especies analizadas, a pesar de que se utilizó la misma metodología. Los fenoles totales reportados por Eid y colaboradores (2015) para hojas de *Liquidambar styraciflua* también son mayores, ya que reportó 111,5 EAG g⁻¹.

El bajo contenido de fenoles encontrados, se puede atribuir a la estación en la que el árbol *Liquidambar styraciflua* fue muestreado, ya que se ha reportado que el porcentaje de compuestos químicos encontrados en periodo de lluvia (otoño – invierno) es considerablemente menor a los periodos de sequía (primavera – verano). Considerando que el muestreo de *Liquidambar styraciflua* en Concepción se realizó en el mes de mayo, sería en estación otoñal (Rasgado-Bonilla *et al.*, 2016).

5.6 Cuantificación de compuestos fenólicos en biomasa a través de GC/MS

En las figuras 7, 8 y 9 se muestran los cromatogramas (GC/MS) obtenidos para los extraíbles de las muestras de corteza, hojas y ramas de *L. styraciflua*, respectivamente.

Comparando los tres perfiles de las muestras se logra observar que varían en la zona de tiempo de retención mayor a los 18 min. Por ejemplo, el máximo en corteza corresponde al compuesto con TR de 22,98, compuesto que no se repite en el cromatograma de hojas y ramas. En el cromatograma de hojas se observan tres compuestos mayoritarios con un TR de 22,8993; 26,6768 y 27,9834, los cuales tampoco se observan en los cromatogramas de las otras partes del árbol. Finalmente, el cromatograma correspondiente a ramas también presenta un compuesto dominante con un TR de 23,2207 el cual solo se registra en esta parte del árbol.

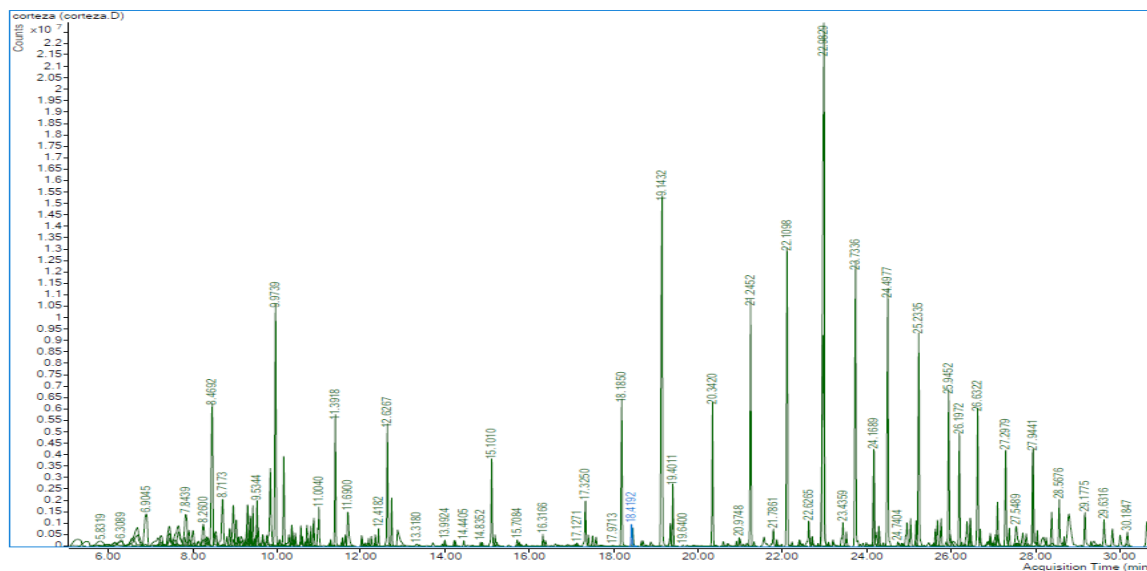


Fig. 7. Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en corteza de *L. styraciflua*.

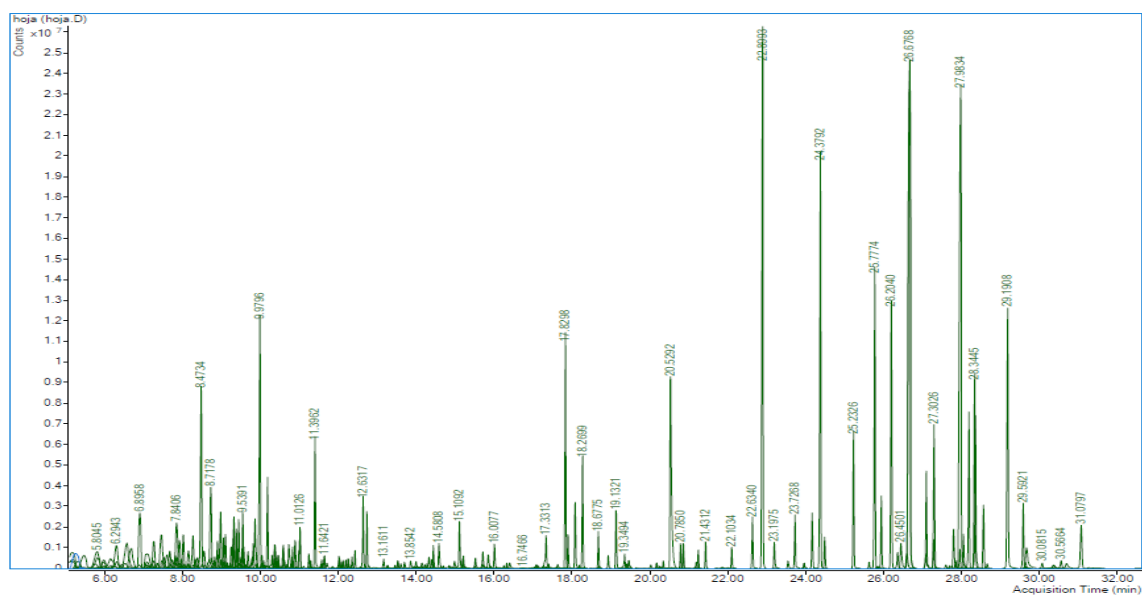


Fig. 8. Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en hojas de *L. styraciflua*.

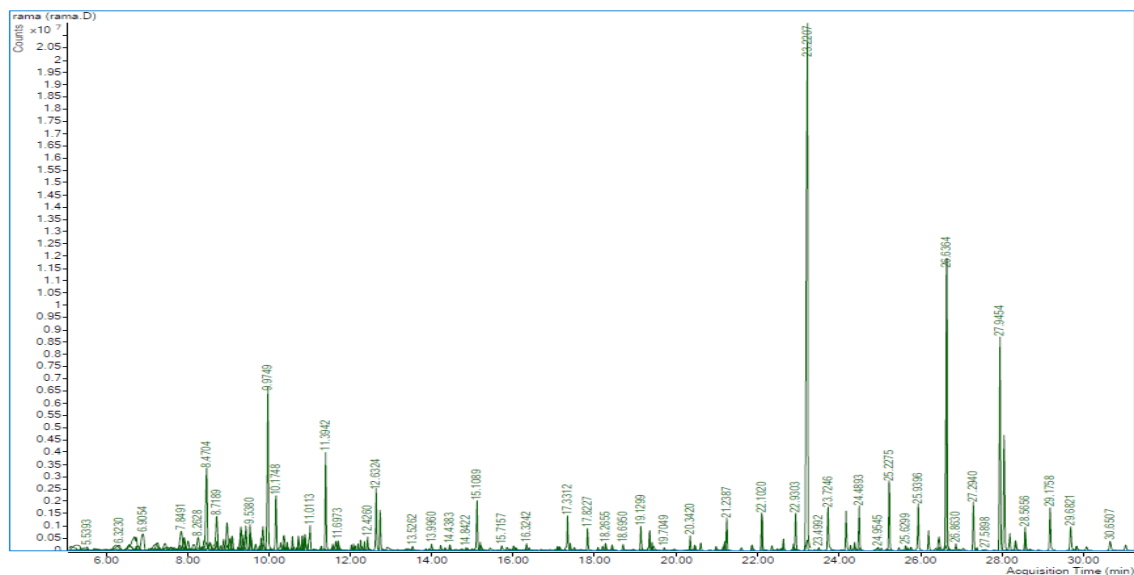


Fig. 9. Cromatograma (GC/MS) de extraíbles en ramas de *Liquidambar styraciflua*.

La Tabla 9 muestra la identificación a través de espectrometría de masa (método deconvolución) de los compuestos más importantes encontrados en los extraíbles de corteza de *Liquidambar styraciflua*, que fueron muy similares a los encontrados en las muestras de ramas y hojas. En su mayoría corresponden a alcanos, también se encontraron ésteres, cetonas, ácidos y compuestos aromáticos. Se encontró bajo contenido de compuestos fenólicos en los extraíbles debido a que por requerimientos técnicos del equipo (GC-MS) las muestras fueron suspendidas en hexano y no en etanol como lo dictaba la metodología, por lo tanto, la mayoría de los compuestos detectados fueron apolares o de baja polaridad.

Tabla 6. Identificación de compuestos principales a través de GC/MS en muestra de corteza de ***Liquidambar styraciflua***

Tiempo de retención (min)	Compuesto	Probabilidad identificación MS (%NIST)
8.96	undecano	95.5
9.97	dodecano	95.5
11.39	tridecano	95.5
19.14	Dibutil ftalato	97.5
21.24	docosano	97.5
22.10	tetracosano	97.5

Como proyección de este trabajo sería bueno re suspender las muestras de extraíbles en etanol para su lectura directa en el GC-MS de acuerdo a lo recomendado en la literatura (Rosales-Castro *et al.*, 2016).

5.7 Análisis elemental

Los resultados obtenidos indicaron un bajo contenido de nitrógeno para todas las muestras, encontrando un menor porcentaje en las muestras de corteza, mientras que el valor más alto se obtuvo en hojas (Fig. 11). Del análisis ANOVA se indica que hay diferencias significativas ($F(2,6) = 1911,65$; $p = 0,0000$), lo que se comprobó con el análisis a posteriori de Tuckey que indica que hay dos grupos, siendo las hojas diferentes a las ramas y corteza.

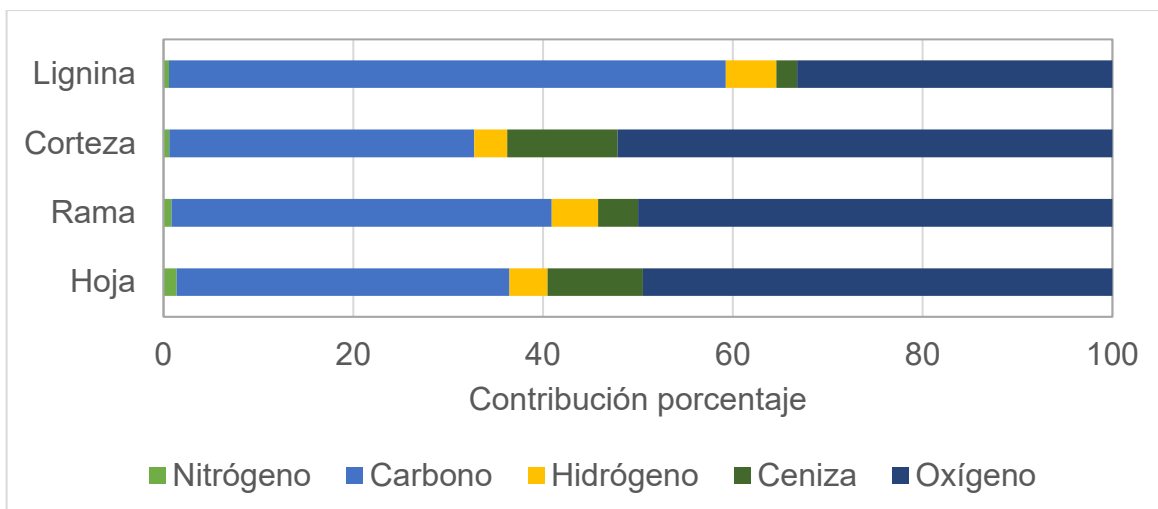


Fig. 10. Análisis elemental mediante TGA realizado en muestras de biomasa residual de *Liquidambar styraciflua*.

Las ramas mostraron mayor contenido de Carbono (C) e Hidrógeno (H), esto puede atribuirse a que al ser un árbol ornamental en una zona urbana está más expuesto al CO₂, lo cual coincide con lo reportado por Kim y colaboradores (2015) ya que al presentar una elevada exposición al CO₂ se produce un ensanchamiento de las células del xilema en las ramas. El análisis ANOVA para el Carbono ($p < 0,05$) indica que existe diferencia significativa entre muestras. El análisis a posteriori de Tuckey indicó que las tres muestras son significativamente diferentes. Lo mismo se reportó para el ANOVA de hidrógeno ($p < 0,05$), y del análisis a posteriori de Tuckey se concluye que también las tres muestras son significativamente diferentes.

El contenido de oxígeno (O) representa casi el 50% de la composición de las muestras. Del análisis ANOVA ($p < 0,05$) se indica que hay diferencias significativas, lo que se comprobó con el análisis a posteriori de Tuckey el que indica que todas las muestras son significativamente diferentes.

No se detectó azufre (S), lo cual se puede atribuir a la sensibilidad del equipo y a que posiblemente la cantidad de azufre en las muestras sea inferior a 0,5%, (Rocha, 2016). Para una muestra de lignina kraft, Lazaridis y colaboradores (2018) reportaron

porcentajes de C, H y O normales para ese tipo de lignina, y un porcentaje pequeño de azufre (1,50%), atribuido al proceso de pulpa kraft.

5.8 Análisis proximal mediante TGA

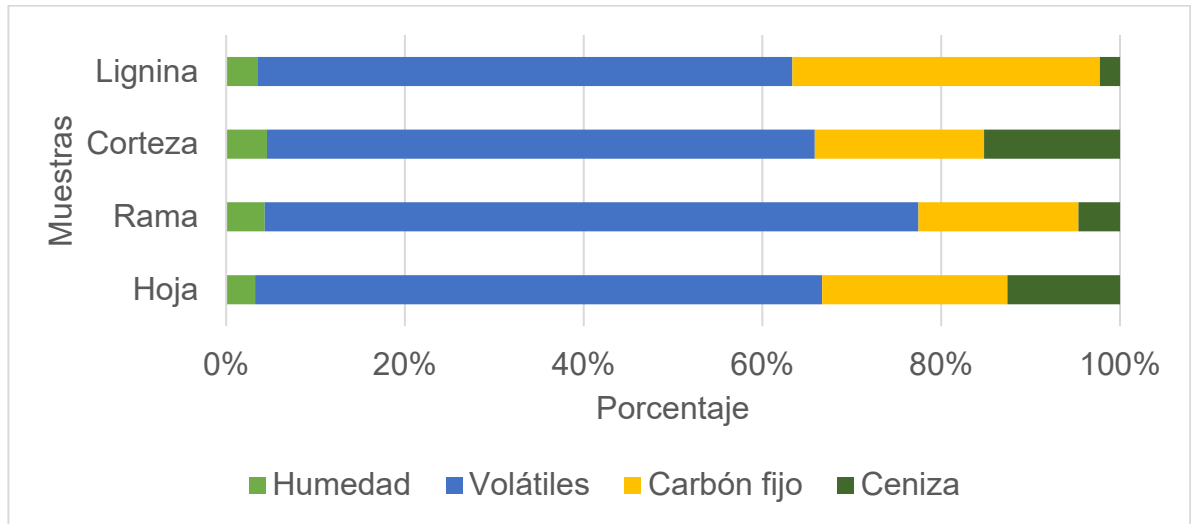


Fig. 11. Análisis proximal mediante TGA realizado en muestras de biomasa residual de *Liquidambar styraciflua*.

Se obtuvieron altos porcentajes de volátiles y carbón fijo en las tres muestras analizadas, destacando las ramas (73,2% y 17,9% respectivamente) sobre las muestras de corteza (61,3% y 18,9% respectivamente) y hojas (63,4% y 20,7% respectivamente). Lo cual es de suma importancia, ya que los volátiles y el carbón fijo están directamente relacionados con el poder calorífico de la biomasa (Parikh *et al.*, 2007). El carbón fijo presentó un ($p > 0,05$), por lo que no hay diferencias significativas, en cambio los volátiles presentaron un ($p < 0,05$), por lo que sí hay diferencias significativas, lo que se confirmó con el test de Tuckey que las ramas difieren de las muestras de corteza y hojas.

En cuanto al porcentaje de cenizas, nuevamente destaca la muestra de ramas al ser la biomasa que posee el menor porcentaje (4,7%) en comparación a las muestras de corteza (15,2%) y hojas (12,6%). Estos altos valores de cenizas encontrados en hojas

y corteza se pueden atribuir a la alta exposición de contaminación ambiental, ya que, los individuos muestreados se encuentran ubicados en avenidas con alta congestión vehicular, lo cual coincide con lo reportado por Kim y colaboradores (2015), ya que, los individuos de *L. styraciflua* expuestos a CO₂ presentaron altos valores de ceniza en hojas y corteza en comparación a los obtenidos en ramas. Según el ANOVA las cenizas presentaron un ($p < 0,05$), por lo que hay diferencias significativas, confirmando con el test de Tuckey que las ramas son significativamente diferentes de las muestras de corteza y hojas.

En cuanto al ámbito energético, la muestra de ramas son las que presentaron mejores propiedades proximales, ya que presentan un mayor contenido de volátiles y menor contenido de cenizas, sabiendo que las cenizas son sustancias inorgánicas no combustibles que provocan corrosión y ensuciamiento en los reactores en las plantas de conversión (Valdebenito, 2017).

Respecto a los porcentajes de humedad reportados, estos fueron bajos para todas las muestras analizadas, lo cual se podría atribuir al pre tratamiento que tuvieron las muestras, al ser secadas en estufa. Según el ANOVA la humedad presentó un ($p < 0,05$), por lo que hay diferencias significativas, confirmando con el test de Tuckey que las hojas son significativamente diferentes de las muestras de corteza y ramas.

5.9 Pirólisis en TGA/ GC-MS

A partir del cromatograma de la Figura 12 podemos observar a través de la comparación de una muestra de lignina estándar con las muestras analizadas la identificación de compuestos fenólicos, encontrando un mayor contenido de fenol puro en las hojas con respecto a las ramas y la corteza

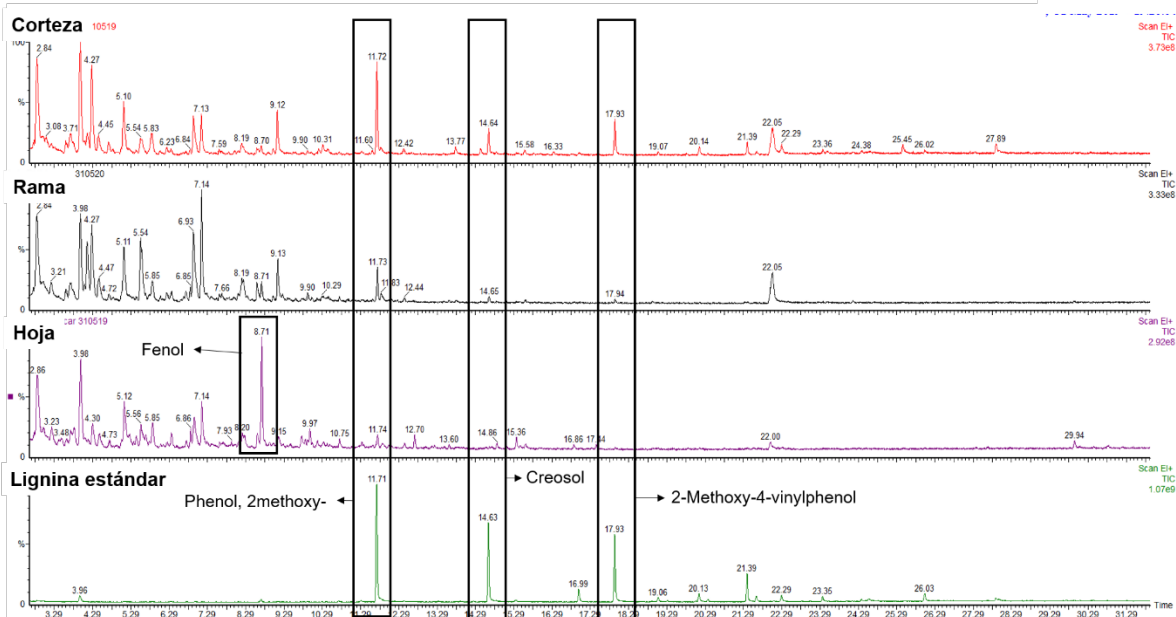


Fig. 12. Fenoles encontrados en las muestras de *Liquidambar styraciflua* a través de pirólisis rápida (50 – 500 °C) en TGA/GC-MS

El alto contenido de fenol obtenido en las hojas, podría estar relacionado a las altas concentraciones de extraíbles en éstas (Rowell et al., 2005). La mayor variedad de compuestos fenólicos (alquil y metoxy) en la corteza analizada del árbol *Liquidambar styraciflua*, podría deberse a su mayor contenido de lignina. Los compuestos 2-metoxifenol (phenol, 2methoxy-) y 2-metoxi-4-vinilfenol (2-Methoxy-4-vinylphenol) son producidos por el craqueo de la lignina.

5.9.1 Abundancia relativa

Se realizaron pruebas de pirólisis rápida de lignina y algunos de los compuestos fenólicos que se obtuvieron en la fracción condensable fueron fenol, 2-metoxifenol y 2-metoxi-4-vinilfenol, ya que la fracción condensable de la pirólisis de lignina se compone principalmente de alcoxi-fenoles con un solo grupo alcoxi (Lazaridis et al., 2018).

Se reportó un mayor contenido de fenol sin sustituyentes en las hojas (8,98%), con respecto a las ramas (0,4%) y la corteza (0,21%). No obstante, se obtuvo más variedad de compuestos fenólicos derivados de la lignina a partir de la corteza, a diferencia de las hojas y ramas (Figura 13).

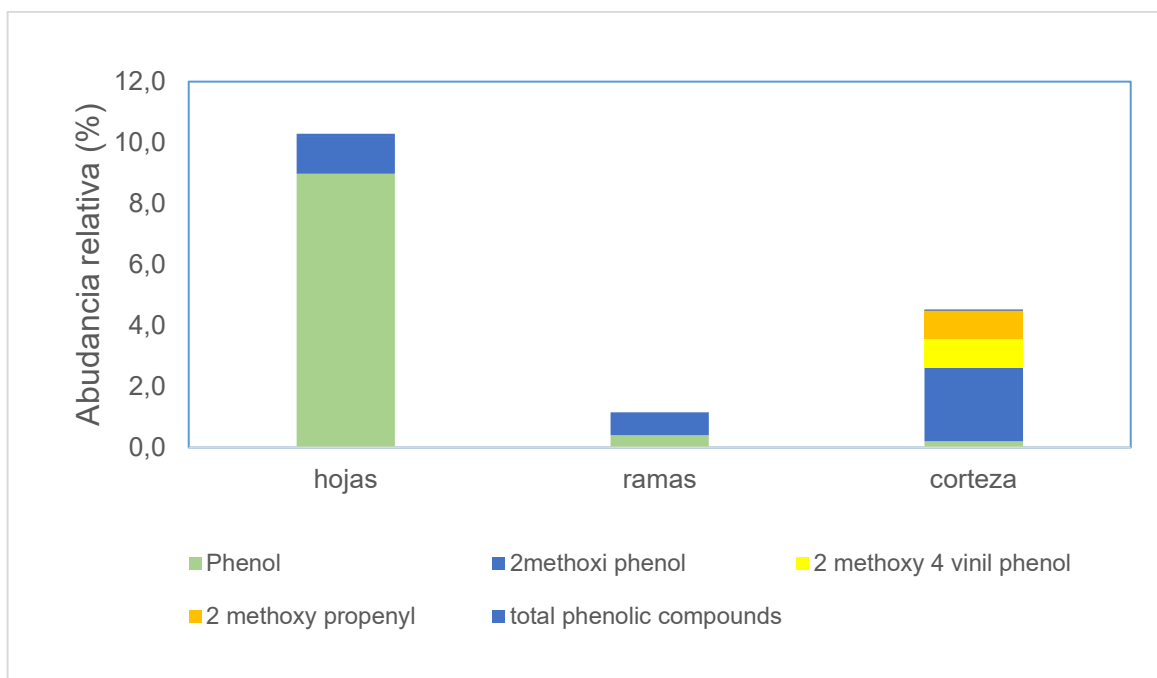


Fig. 13. Abundancias relativas estimadas a partir de las áreas de los picos de GC-MS a partir de muestras de biomasa residual de *L. styraciflua*.

Estos resultados concuerdan con los reportados por Wang y colaboradores (2011), los cuales identificaron compuestos tales como 2,6-dimetoxifenol, y 2,6-dimetoxi-4-(2-propenil)-fenol mediante pirólisis de lignina.

Los fenoles constituyen parte de las sustancias denominadas extraíbles de la planta, fracción que es formada por metabolitos secundarios y son las responsables del

sistema de protección de estas, ya que presentan características repelentes, antibacterianas y antioxidantes (Rosales-Castro *et al.*, 2016).

Se ha demostrado que la interacción entre lignina y celulosa afecta el proceso de pirolisis y los productos derivados (Worasuwannarak *et al.*, 2007).

Observaciones finales

Existen diversos métodos para obtener fenol, pero los más utilizados actualmente en la industria son a base de petróleo el cual es una fuente de combustible fósil limitada y agotable. La oxidación directa del benceno es el método más sencillo, aunque si bien el benceno se oxida rápido, el producto de fenol obtenido también se oxida rápido y a medida que aumenta la conversión, disminuye el rendimiento del fenol. También se utilizan métodos que generan un intermediario para producir fenol, como por ejemplo la hidrólisis de sulfonato, la cual se realiza en un medio alcalino, pero se obtiene como resultado grandes cantidades de subproductos.

Si se comparan los métodos de obtención de fenol en base a la materia prima utilizada, la biomasa residual de podas urbanas es una fuente de productos de alto valor y energía renovable, la cual tiene un bajo costo asociado, ya que son considerados desechos. Su utilización presenta la ventaja principal de disminuir daños medioambientales, la dependencia de los combustibles fósiles, darle valor a un residuo, contribuyendo a la economía circular.

Esta tesis enmarcada dentro del proyecto Núcleo Milenio en Procesos Catalíticos hacia la Química Sustentable (NM CSC) dió origen a dos presentaciones destacadas en los concursos, II Concurso de divulgación científica "Ciencia y Tecnología de la Universidad a la Comunidad" (segundo lugar, ver anexo 4) y en la "Muestra de poster científicos y

tecnológicos” en el marco de la semana de la Ciencia, la Tecnología el Conocimiento e Innovación (tercer lugar, ver anexo 5).

Esta tesis sentó las bases para la confección de un artículo científico titulado “Urban pruning pyrolysis (*Liquidambar styraciflua*) to generate phenol as a catalytic precursor” el que se encuentra en estado de preparación.

6. CONCLUSIONES

1) Se encontró un mayor contenido de lignina (45,22%) en la corteza de *Liquiaámbur styraciflua* con respecto a sus ramas (12,61%) y hojas (32,16%), lo cual está relacionado directamente con la mayor variedad de compuestos fenólicos encontrados en la corteza, a través del proceso de pirólisis, producto del craqueo de la lignina. Por otra parte, se encontró un mayor contenido de holocelulosa en ramas (18,85%) con respecto a su corteza y hojas, lo cual es concordante con el análisis sumativo realizado por metodología TAPPI.

2) Se encontró un mayor contenido de extraíbles (14,14%) en las hojas de *Liquidambar styraciflua* con respecto a sus ramas y corteza, sin embargo, la corteza tuvo los mayores contenidos de compuestos fenólicos (3,55 mg g⁻¹), respecto a ramas y hojas, determinados a través de análisis directo de los extraíbles mediante espectrofotometría.

3) El estudio de pirólisis en TGA/GC-MS de *Liquidambar styraciflua* a 350 °C reportó un mayor contenido de fenol sin sustituyentes en las hojas (8,89%), con respecto a las ramas (0,4%) y la corteza (0,21%). No obstante, se obtuvo más variedad de compuestos fenólicos a partir de la corteza, lo cual estaría asociado al mayor contenido de lignina de la corteza.

4) Se encontró otra molécula bloque (2-metoxifenol) en el estudio de pirólisis en TGA/GC-MS de *Liquidambar styraciflua* a 350 °C, por lo que se recomienda realizar pirólisis a diferentes temperaturas para hacer un barrido de especies químicas de interés.

8. Bibliografía

1. Azócar L., Hermosilla L., Gay A., Rocha S., Díaz J., Jara P. (2019). Brown pellet production using wheat straw from southern cities in Chile. *Fuel*, **237**, 823-232.
2. Barroso M. (2010). Pretratamiento de biomasa celulósica para la obtención de etanol en el marco de una biorrefinería, Universidad Politécnica de Madrid, Escuela Universitaria de Ingeniería Técnica Forestal, Madrid.
3. Chamy R. y Vivanco E. (2017). *Potencial de biogás Identificación y clasificación de los distintos tipos de biomasa disponibles en Chile para la generación de biogás*. Proyecto energías renovables no convencionales en Chile (CNE/GTZ). Santiago de Chile.
4. Chávez-Sifontes M. y Domine M. (2013). Lignina, estructura y aplicaciones: métodos de despolimerización para la obtención de derivados aromáticos de interés industria. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, **4**(4), 15-46.
5. Chowdhury Z., Pal K., Yehye W., Suresh S., Shah S., Adebisi A., Marlina E., Rafique R. y Johan R. (2017). Pyrolysis: A Sustainable Way to Generate Energy from Waste. 10.5772/intechopen.69036.
6. Entrevista personal a Jorge Silva (Director del Departamento de Aseo y Ornato de la Municipalidad de Concepción) el 22- 04 - 2019, Concepción.
7. Escalante H., Orduz J., Zapata H., Cardona M. C. y Duarte M. (2011). *Atlas del Potencial Energético de la Biomasa Residual en Colombia*. Universidad Industrial de Santander. Centro de Estudios e Investigaciones Ambientales Unidad de Planeación Minero Energética Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales. Ideam. Colombia.
8. Eid H., Labib R., Hamid N., Hamed M. y Ross S. (2015). Hepatoprotective and antioxidant polyphenols from a standardized methanolic extract of the leaves of

- Liquidambar styraciflua* L. Bulletin of Faculty of Pharmacy, Cairo University, **53**, 117-127 .
9. García R, Pizarro C, Lavín AG, Bueno JL, (2013). Biomass proximate analysis using thermogravimetry. *Biores Tech.* **139**, 1-4.
 10. Garrido G, Ortiz M. y Pozo P. (2013). Fenoles y flavonoides totales y actividad antioxidante de extractos de hojas de *Lampaya medicinalis* F. Phil. *Journal of Pharmacy & Pharmacognosy Research*, **1**(1), 30-38.
 11. Gomez A., Klose W., Rincón S. y Wiest W. (2004). Transformación termoquímica de la biomasa residual del proceso de extracción del aceite de palma: tecnologías y perspectivas. *Palmas*, **25**(2), 388 - 397.
 12. Hergueds A. y Taranco C. (2012). *Biomasa, biocombustible y sostenibilidad*. Centro tecnológico Agrario y Agroalimentario. ITAGRA.CT. Palencia, España.
 13. Kim K., Labbé N., Warren J., Elder T. y Rials T. (2015). Chemical and anatomical changes in *Liquidambar styraciflua* L. xylem after long term exposure to elevated CO₂. *Environmental Pollution*, **198**, 179-185.
 14. Klug M. (2012). Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa. *Revista de Química*, **26**(1-2), 37-40 .
 15. Lattanzio V., Kroon, P., Quideau, S. y Treutter, D. (2008). Plant phenolics-secondary metabolites with diverse functions. En F. Daayf y V. Lattanzio (Eds.), *Recent Advances in Polyphenol Research*, *Blackwell Publishing Ltd*, **1** ,1-35 p.
 16. Lazaridis P., Fotopoulos A., Karakoulia S. y Triantafyllidis K. (2018). Catalytic Fast Pyrolysis of Kraft Lignin with Conventional, Mesoporous and Nanosized ZSM-5 Zeolite for the Production of Alkyl-Phenols and Aromatics. *Frontiers in Chemistry*, **6**, 295. Publicado en línea el 18 de Julio de 2018 doi: 10.3389 / fchem.2018.00295.
 17. Ley N° 18695. Diario Oficial de la República de Chile, Santiago, Chile, 31 de marzo de 1988.

18. Mancarz G., Laba L. C., da Silva E., Prado M., de Souza L. M., de Souza D., Nakashima T. y Mello R. G. (2019). *Liquidambar styraciflua* L.: A new potential source for therapeutic uses. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*. **174**, 422–431. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2019.06.003>
19. Martínez S. (2009). Evaluación de la biomasa como recurso energético renovable en Cataluña, Tesis Doctoral, Universidad de Girona, Girona.
20. Montes-Valencia N. (2015). La Industria Química: Importancia y Retos. *Lámpsakos*, **14**, 72-85.
21. Mosquera O., González L., Cortes Y. y Camargo J. (2015). Caracterización fitoquímica, determinación del contenido de lignina y la actividad antioxidante de los culmos de *Guadua angustifolia* Kunth. Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Militar Nueva Granada, **11**(2), 124 – 135.
22. Ocampo D., Valverde C., Colmenares A y Isaza J. (2014). Fenoles totales y actividad antioxidante en hojas de dos especies colombianas del género *Meriania* (melastomataceae). *Revista Colombiana de Química*, **43**(2), 41-46.
23. Pandey M. y Kim C. (2011). Lignin Depolymerization and Conversion: A Review of Thermochemical Methods. *Chemical Engineering & Technology*, **34**(1), 29-41.
24. Parikh J., Channiwala S. y Ghosal G. (2007). A correlation for calculating elemental composition from proximate analysis of biomass materials. *Fuel*, **86**, 1710-1719.
25. Pérez- Pérez E., Ettiene G., Marín M., Casassa-Padron A., Silva N., Raga J., González C., Sandoval L. y Medina D. (2014). Determinación de fenoles y flavonoides totales en hojas de guayabo (*Psidium guajava* L.). *Revista de la Facultad de Agronomía. (LUZ)*. **31**(1), 60-77.
26. Quintero J. y Quintero L. (2015). Biomasa: métodos de producción, potencial energético y medio ambiente. *Revista 13+*, **2**(2), 28-44.

27. Rasgado-Bonilla F., Soto-Hernández R., Conde-Martínez V., Vibrans H. y Cibrián-Tovar D. (2016). Variación estacional en la composición de resinas y aceites esenciales de *Liquidambar styraciflua* de Hidalgo, México. *Botanical Sciences*, **94**(2), 331-344.
28. Rocha S. (2016). Desarrollo de un índice de calidad de la biomasa para ser torrefactada. Tesis para optar al título o grado de Ingeniero Civil Ambiental Universidad de la Frontera, Temuco.
29. Romanelli G., Ruiz D. y Pasquiale G. (2017). *Química de la biomasa y los combustibles*. Editorial de la Universidad de La Plata. Buenos Aires, Argentina.
30. Romero A. (2010). Aprovechamiento de la biomasa como fuente de energía alternativa a los combustibles fósiles. *Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (España)*. **104**(2), 331-345.
31. Rosales-Castro M., González-Laredo R., Rocha-Guzmán N., Gallegos-Infante J., Peralta-Cruz J. y Karchesy, J. (2009). Evaluación química y capacidad antioxidante de extractos polifenólicos de cortezas de *Pinus cooperi*, *P. engelmannii*, *P. leiophylla* y *P. teocote*. *Madera y Bosques*, **15**, (3), 87-105.
32. Rosales-Castro M, Honorato-Salazar J. A, Santos-García A. B, Pérez-López M. A, Colotl-Hernández G y Sánchez-Monsalvo V. (2016). Chemical composition of leaves and branches of *Cedrela odorata* L. from two forest plantations as a source of lignocellulosic feedstock. *Madera y Bosques*, **22**(2), 131-146.
33. Rowell R. (1983). The Chemistry of Solid Wood. Based on short course and symposium sponsored by the Division of Cellulose, Paper, and Textile Chemistry. En 185th meeting of the American Chemical Society. Seattle, Washington, 70-72 p.
34. Rowell R., Pettersen R., Han J., Rowell J. y Tshabalala M. (2005). Cell Wall Chemistry. En R. M. Rowell (Ed.), *Handbook of wood chemistry and wood composites*. Boca Raton, Florida, EUA: CRC Press, 35-74 p.

35. Sierra A., Meléndez L., Ramírez-Monroy A. y Arroyo M. (2014). La química verde y el desarrollo sustentable. RIDE Revista Iberoamericana para la Investigación y el Desarrollo Educativo [en línea] 2014, [Fecha de consulta: 21 de mayo de 2019] Disponible en: <<http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=498150317001>> ISSN
36. TAPPI Standards, (2007). TAPPI Test Methods, Atlanta.
37. Taiz L. y Zeiger E. (2006). Fisiología vegetal. Volumen 1. Castellón de la Plana: Universitat Jaume.
38. Torres U., Juacida P. y Rodríguez S. (2002). Composición química, obtención de pulpa Kraft y su evaluación papelera en castaño, ciprés y encino. *BOSQUE*, **23**(1), 125-130.
39. Valdebenito F. (2017). Agricultural-Waste Cellulose Nanofibrils to develop a CO₂ adsorbent material. Tesis para optar al grado de Doctor en 2017, Universidad de la Frontera.
40. Vidal J., Iborra S. y Climent M. (2017). Valoración de moléculas plataforma derivadas de biomasa mediante aminación reductiva utilizando nanopartículas metálicas como catalizadores heterogéneos. Universidad Politécnica de Valencia, Valencia.
41. Wang S., Guo X., Wang K. y Luo Z. (2011). Influence of the interaction of components on the pyrolysis behavior of biomass. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, **91**, 83–189.
42. Wetzel S., Duchesne L. C. y Laporte M. (2006). Bioproducts from Canada's forests. *New Partnerships in the Bioeconomy*. Dordrecht, Países Bajos: Springer. 257 p.
43. Wise L.E., Murphy M. y D'Adieco A. (1946). Chlorite holocellulose, its fractionation and bearing on summative wood analysis and on studies on the hemicelluloses, *Paper Trade Journal*. **122**(2), 35–43.

44. Worasuwanarak N., Sonobe T. y Tanthapanichakoon W. (2007). Pyrolysis behaviors of rice straw, rice husk, and corncob by TG-MS technique. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, **78**, 265-271.

9. ANEXOS

ANEXO 1

Entrevista personal a Sr. Jorge Silva, Director de Aseo y Ornato de la Municipalidad de Concepción.

Especies arbóreas de importancia urbana en el municipio.

- a) ¿Cuáles son los principales residuos urbanos de origen vegetal que se generan en concepción?

Principalmente se generan residuos de ramas y hojas, troncos y cortezas.

- b) ¿Dentro de las especies arbóreas cual representa un problema para la municipalidad según estos criterios?

- Rapidez de crecimiento
- Problemática estacional de especies arbóreas

La principal especie que presenta problemas es el Liquidámbar, ya que este posee hojas caducas, es de un rápido crecimiento y es considerado de madera blanda, por lo que presenta muchos problemas de desganche de sus ramas.

- c) Tipos de residuos según estación

Principalmente en otoño, se registran muchas hojas, las cuales podrían ser un problema ya que estas pueden llegar a tapar las rejillas de alcantarillado.

Por lo tanto, la especie *Liquidambar styraciflua*, es una de las especies de árbol ornamentales más abundante en Concepción, debido a su llamativo follaje que cambia de color en la estación otoñal, también es el que provoca más residuos de podas urbanas, ya sea por sus hojas caducifolias o por ser considerado un árbol de madera blanda.

ANEXO 2

Tabla A1. Contenido de lignina y holocelulosa en las diferentes muestras analizadas correspondientes a los tres ejemplares de *Liquidambar styraciflua* de la ciudad de Concepción.

Muestras	Lugar	Lignina (%)	Holocelulosa (%)
Ramas	Plaza Perú	9,55	19,86
Ramas	Chacabuco	13,75	15,97
Ramas	Freire	14,53	20,70
Hojas	Plaza Perú	34,45	6,26
Hojas	Chacabuco	33,08	7,81
Hojas	Freire	28,95	11,84
Corteza	Plaza Perú	45,18	18,60
Corteza	Chacabuco	47,31	11,06
Corteza	Freire	43,16	17,77

ANEXO 3

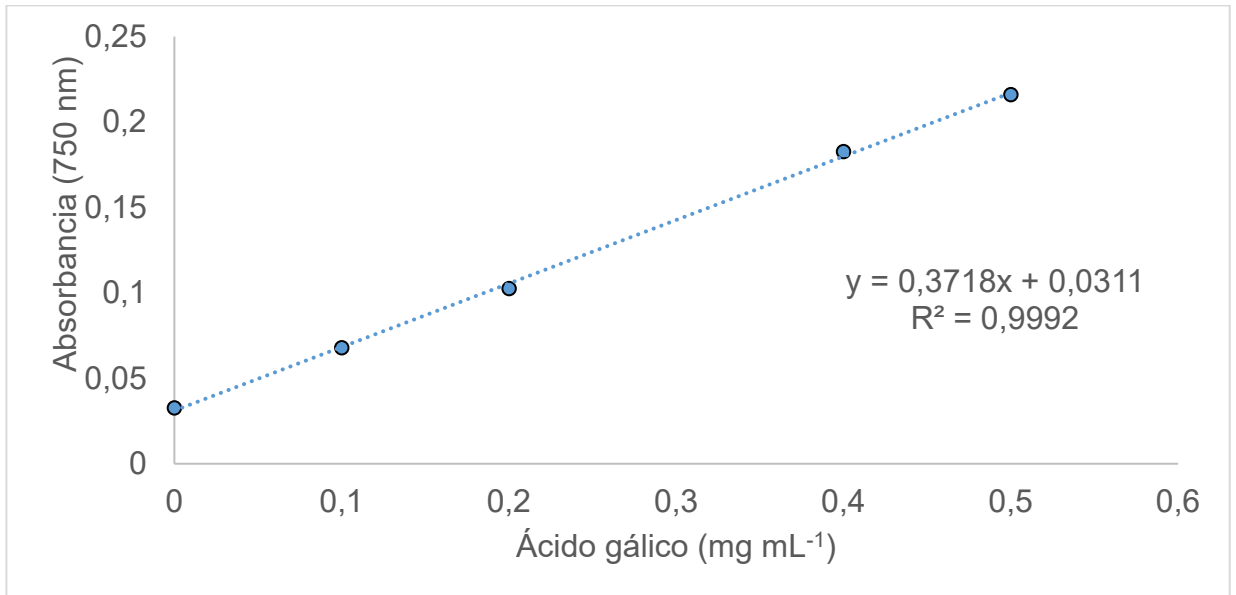


Fig. A1. Curva de calibración de Ácido gálico mg mL⁻¹

ANEXO 4

Análisis estadísticos:

- Humedad:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Humedad by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	74,810	24,937	5,3030	28,122
H	3	198,58	66,193	4,5174	20,407
R	3	164,31	54,770	1,0018	1,0036

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Humedad by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	2722,63	1361,32	82,45	0,0000
Error	6	99,06	16,51		
Total	8	2821,70			

Grand Mean 48,633 CV 8,36

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	1,94	0,2241
O'Brien's Test	0,86	0,4688
Brown and Forsythe Test	0,78	0,5010

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	46,05	0,0065
Error	2,9		

Component of variance for between groups 448,269
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	24,937
H	66,193
R	54,770
Observations per Mean	3
Standard Error of a Mean	2,3460
Std Error (Diff of 2 Means)	3,3177

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Humedad by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
H	66,193	A
R	54,770	B
C	24,937	C

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 3,3177
 Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 10,185
 All 3 means are significantly different from one another.

- Lignina:

 Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Lignina by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	135,65	45,217	2,0752	4,3066
H	3	96,480	32,160	2,8631	8,1973
R	3	37,830	12,610	2,6786	7,1748

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Lignina by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	1615,87	807,937	123,17	0,0000
Error	6	39,36	6,560		
Total	8	1655,23			

Grand Mean 29,996 CV 8,54

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	0,36	0,7145
O'Brien's Test	0,16	0,8572
Brown and Forsythe Test	0,04	0,9585

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	118,77	0,0003
Error	3,9		

Component of variance for between groups 267,126
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	45,217
H	32,160
R	12,610

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 1,4787
Std Error (Diff of 2 Means) 2,0912

Statistix 10,0 (30-day Trial)

22-01-

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Lignina by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
C	45,217	A
H	32,160	B
R	12,610	C

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 2,0912
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 6,4196
All 3 means are significantly different from one another.

- Holocelulosa:

|Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Holocelul by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	47,430	15,810	4,1345	17,094
H	3	25,910	8,6367	2,8804	8,2966
R	3	56,530	18,843	2,5236	6,3684

|Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Holocelul by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	164,834	82,4169	7,79	0,0215
Error	6	63,518	10,5864		
Total	8	228,352			

Grand Mean 14,430 CV 22,55

Homogeneity of Variances		F	P
Levene's Test		0,98	0,4293
O'Brien's Test		0,43	0,6667
Brown and Forsythe Test		0,10	0,9101

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	9,21	0,0337
Error	3,9		

Component of variance for between groups 23,9435
 Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	15,810
H	8,637
R	18,843
Observations per Mean	3
Standard Error of a Mean	1,8785
Std Error (Diff of 2 Means)	2,6566

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Holocelul by Muestras

Muestras Mean Homogeneous Groups

R	18,843	A
C	15,810	AB
H	8,6367	B

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 2,6566

Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 8,1554

There are 2 groups (A and B) in which the means are not significantly different from one another.

Fenoles en extraíbles por espectrofotometría:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Fenoles by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	10,650	3,5500	1,5295	2,3394
H	3	4,7330	1,5777	0,9183	0,8432
R	3	2,9910	0,9970	0,3410	0,1163

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Fenoles by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	10,7451	5,37254	4,89	0,0551
Error	6	6,5979	1,09964		
Total	8	17,3429			

Grand Mean 2,0416 CV 51,36

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	2,49	0,1634
O'Brien's Test	1,11	0,3901
Brown and Forsythe Test	0,83	0,4798

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	3,55	0,1582
Error	3,1		

Component of variance for between groups 1,42430
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	3,5500
H	1,5777
R	0,9970

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 0,6054
Std Error (Diff of 2 Means) 0,8562

Statistix 10,0 (30-day Trial)

22-01

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Fenoles by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
C	3,5500	A
H	1,5777	A
R	0,9970	A

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,8562
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 2,6284
There are no significant pairwise differences among the means.

- Análisis elemental:

Carbono:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Carbono by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	116,31	38,770	0,1993	0,0397
H	3	127,58	42,527	0,3549	0,1260
R	3	133,54	44,512	0,1334	0,0178

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Carbono by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	51,0247	25,5123	417,10	0,0000
Error	6	0,3670	0,0612		
Total	8	51,3917			

Grand Mean 41,936 CV 0,59

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	2,21	0,1910
O'Brien's Test	0,98	0,4277
Brown and Forsythe Test	0,39	0,6924

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	725,64	0,0000
Error	3,6		

Component of variance for between groups 8,48372
 Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	38,770
H	42,527
R	44,512
Observations per Mean	3
Standard Error of a Mean	0,1428
Std Error (Diff of 2 Means)	0,2019

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Carbono by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
R	44,512	A
H	42,527	B
C	38,770	C

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,2019
 Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 0,6199
 All 3 means are significantly different from one another.

Hidrogeno:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Hidrogeno by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	13,711	4,5703	0,1677	0,0281
H	3	16,476	5,4920	0,1496	0,0224
R	3	17,976	5,9920	0,0339	1,147E-03

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Hidrogeno by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	3,12061	1,56030	90,60	0,0000
Error	6	0,10333	0,01722		
Total	8	3,22393			

Grand Mean 5,3514 CV 2,45

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	1,87	0,2332
O'Brien's Test	0,83	0,4796
Brown and Forsythe Test	0,65	0,5552

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	94,43	0,0023
Error	2,9		

Component of variance for between groups 0,51436
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	4,5703
H	5,4920
R	5,9920

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 0,0758
Std Error (Diff of 2 Means) 0,1071

Statistix 10,0 (30-day Trial)

22-01

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Hidrogeno by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
R	5,9920	A
H	5,4920	B
C	4,5703	C

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,1071
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 0,3289
All 3 means are significantly different from one another.

Nitrógeno:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Nitrogeno by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	2,1960	0,7320	0,0178	3,160E-04
H	3	5,3060	1,7687	0,0234	5,453E-04
R	3	2,3640	0,7880	0,0272	7,390E-04

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Nitrogeno by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	2,03952	1,01976	1911,65	0,0000
Error	6	0,00320	0,00053		
Total	8	2,04272			

Grand Mean 1,0962 CV 2,11

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	0,57	0,5932
O'Brien's Test	0,25	0,7840
Brown and Forsythe Test	0,12	0,8859

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	1740,05	0,0000
Error	3,9		

Component of variance for between groups 0,33974
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	0,7320
H	1,7687
R	0,7880
Observations per Mean	3
Standard Error of a Mean	0,0133
Std Error (Diff of 2 Means)	0,0189

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Nitrogeno by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
H	1,7687	A
R	0,7880	B
C	0,7320	B

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,0189
 Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 0,0579
 There are 2 groups (A and B) in which the means are not significantly different from one another.

Oxígeno:

Descriptive Statistics of Oxigeno by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	167,78	55,928	0,2172	0,0472
H	3	150,64	50,213	0,3699	0,1369
R	3	146,12	48,708	0,1314	0,0173

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Oxigeno by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	87,0488	43,5244	648,61	0,0000
Error	6	0,4026	0,0671		
Total	8	87,4515			

Grand Mean 51,616 CV 0,50

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	2,19	0,1935
O'Brien's Test	0,97	0,4309
Brown and Forsythe Test	0,38	0,6985

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	1021,26	0,0000
Error	3,5		

Component of variance for between groups 14,4858
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	55,928
H	50,213
R	48,708

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 0,1496
Std Error (Diff of 2 Means) 0,2115

Statistix 10,0 (30-day Trial)

22-01

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Oxigeno by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
C	55,928	A
H	50,213	B
R	48,708	C

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,2115
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 0,6493
All 3 means are significantly different from one another.

- Análisis proximal:

Carbón Fijo:

```

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Cfijo by Muestras

Muestras  N      Sum      Mean      SD      Variance
C          3  56,830  18,943  0,4908  0,2409
H          3  62,210  20,737  2,6100  6,8121
R          3  53,660  17,887  1,4609  2,1342

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Cfijo by Muestras

Source      DF      SS      MS      F      P
Muestras    2  12,4551  6,22754  2,03  0,2117
Error       6  18,3746  3,06243
Total       8  30,8297

Grand Mean 19,189      CV 9,12

Homogeneity of Variances      F      P
Levene's Test                  2,69  0,1465
O'Brien's Test                  1,20  0,3655
Brown and Forsythe Test        0,85  0,4733

Welch's Test for Mean Differences
Source      DF      F      P
Muestras    2,0  1,21  0,4117
Error       3,0

Component of variance for between groups  1,05504
Effective cell size                          3,0

Muestras  Mean
C          18,943
H          20,737
R          17,887
Observations per Mean                    3
Standard Error of a Mean                  1,0104
Std Error (Diff of 2 Means)              1,4289

```

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Cfijo by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
H	20,737	A
C	18,943	A
R	17,887	A

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 1,4289
 Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 4,3863
 There are no significant pairwise differences among the means.

Ceniza:

Descriptive Statistics of Ceniza by Muestra

Muestra	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	45,590	15,197	2,6489	7,0166
H	3	37,770	12,590	1,9512	3,8073
R	3	13,950	4,6500	1,4404	2,0748

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Ceniza by Muestra

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestra	2	181,070	90,5352	21,06	0,0019
Error	6	25,797	4,2996		
Total	8	206,868			

Grand Mean 10,812 CV 19,18

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	1,11	0,3892
O'Brien's Test	0,49	0,6336
Brown and Forsythe Test	0,15	0,8645

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestra	2,0	22,82	0,0077
Error	3,8		

Component of variance for between groups 28,7452
Effective cell size 3,0

Muestra	Mean
C	15,197
H	12,590
R	4,650

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 1,1972
Std Error (Diff of 2 Means) 1,6930

Statistix 10,0 (30-day Trial)

19-01-

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Ceniza by Muestra

Muestra	Mean	Homogeneous Groups
C	15,197	A
H	12,590	A
R	4,6500	B

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 1,6930
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 5,1974
There are 2 groups (A and B) in which the means
are not significantly different from one another.

Humedad:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Humedad by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance	Median
C	3	13,670	4,5567	0,1620	0,0262	4,6400
H	3	9,7100	3,2367	0,2050	0,0420	3,3500
R	3	12,920	4,3067	0,5543	0,3072	4,1900

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Humedad by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	2,94980	1,47490	11,78	0,0084
Error	6	0,75100	0,12517		
Total	8	3,70080			

Grand Mean 4,0333 CV 8,77

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	3,09	0,1196
O'Brien's Test	1,37	0,3230
Brown and Forsythe Test	1,02	0,4148

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	32,57	0,0049
Error	3,6		

Component of variance for between groups 0,44991
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	4,5567
H	3,2367
R	4,3067

Observations per Mean 3
Standard Error of a Mean 0,2043
Std Error (Diff of 2 Means) 0,2889

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Humedad by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
C	4,5567	A
R	4,3067	A
H	3,2367	B

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 0,2889
 Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 0,8868
 There are 2 groups (A and B) in which the means are not significantly different from one another.

Volátiles:

Statistix 10,0 (30-day Trial)

Descriptive Statistics of Volatiles by Muestras

Muestras	N	Sum	Mean	SD	Variance
C	3	183,91	61,303	2,2441	5,0358
H	3	190,30	63,433	0,9981	0,9962
R	3	219,46	73,153	1,9779	3,9121

Statistix 10,0 (30-day Trial)

One-Way AOV for Volatiles by Muestras

Source	DF	SS	MS	F	P
Muestras	2	239,438	119,719	36,12	0,0005
Error	6	19,888	3,315		
Total	8	259,326			

Grand Mean 65,963 CV 2,76

Homogeneity of Variances	F	P
Levene's Test	1,25	0,3511
O'Brien's Test	0,56	0,6002
Brown and Forsythe Test	0,24	0,7964

Welch's Test for Mean Differences

Source	DF	F	P
Muestras	2,0	27,89	0,0071
Error	3,5		

Component of variance for between groups 38,8014
Effective cell size 3,0

Muestras	Mean
C	61,303
H	63,433
R	73,153
Observations per Mean	3
Standard Error of a Mean	1,0511
Std Error (Diff of 2 Means)	1,4865

Statistix 10,0 (30-day Trial)

19-01-

Tukey HSD All-Pairwise Comparisons Test of Volatiles by Muestras

Muestras	Mean	Homogeneous Groups
R	73,153	A
H	63,433	B
C	61,303	B

Alpha 0,05 Standard Error for Comparison 1,4865
Critical Q Value 4,341 Critical Value for Comparison 4,5635
There are 2 groups (A and B) in which the means
are not significantly different from one another.

ANEXO 5

Certificado II Concurso de divulgación científica.



U.P Nº 08/2019

CONSTANCIA



MONICA TERESA LADINO, Vicerrectora de Investigación y Postgrado de la Universidad Católica de la Santísima Concepción deja constancia que:

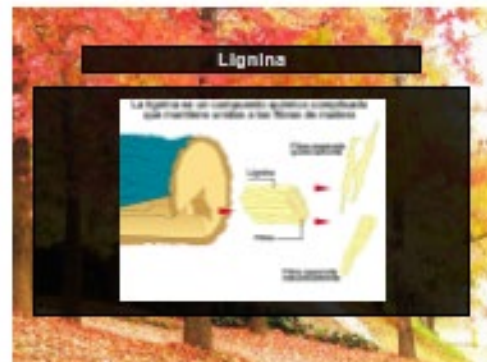
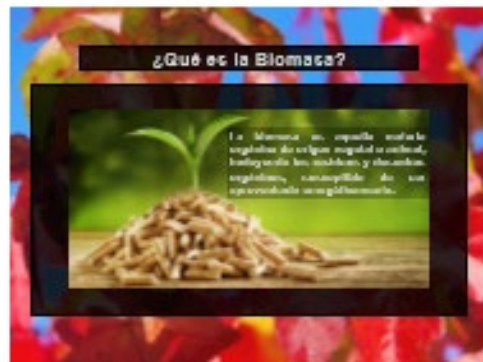
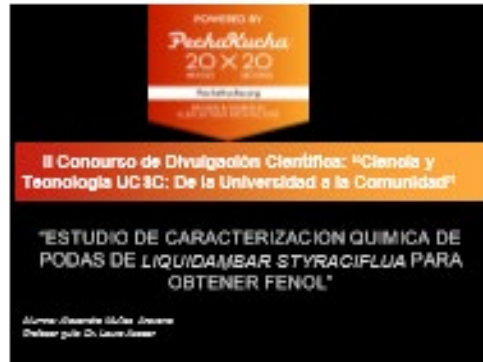
La Estudiante de Pregrado **María Muñoz Aravena**, RUT **19.174.413-6** participó como Expositora en el II Concurso de Divulgación Científica: "Ciencia y Tecnología, de la Universidad a la comunidad" ejecutado 9 de octubre de 2019, obteniendo el **Segundo** lugar en la categoría Pregrado.

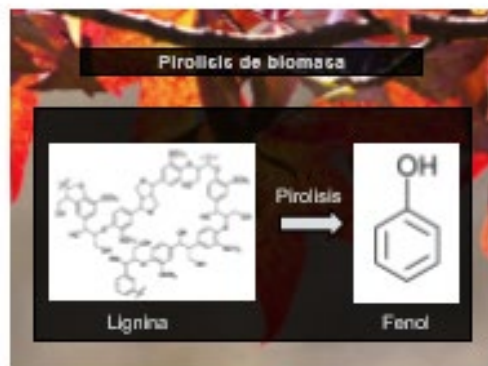
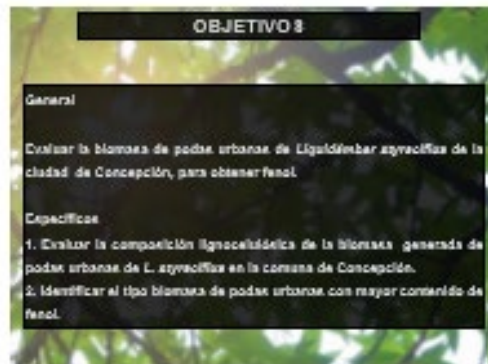
Se extiende el presente documento a petición del interesado, para los fines que estime conveniente.

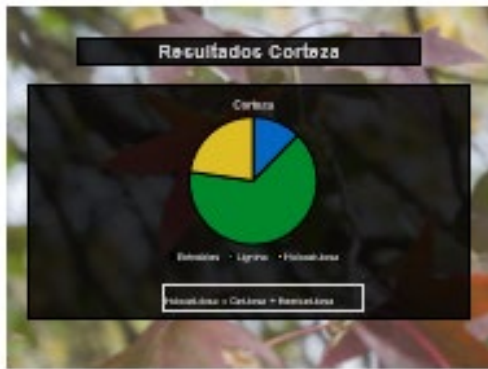
Concepción, 11 octubre de 2019
VSL/ngj
c.c.: Archivo

ANEXO 6

Presentación PowerPoint II Concurso de divulgación científica









AGRADECIMIENTOS


A la Universidad Católica de la Santísima Concepción, Facultad de Ciencias.

Al Núcleo Milenio en procesos catalíticos hacia la química sostenible (NMI CSC).

A la dirección de ases y ensayo de la Municipalidad de Concepción.

POWERED BY
PechaKucha
20 X 20
Presentación
20/11/2013

II Concurso de Divulgación Científica: "Ciencia y Tecnología UCBC: De la Universidad a la Comunidad"



PIROLISIS DE PODAS URBANAS DE CONCEPCIÓN (*LIQUIDÁMBAR STYRACIFLUA*) PARA GENERAR FENOL COMO PRECURSOR CATALITICO

Rodrigo Ramírez, Fabiola Valdebenito, Alexandra Muñoz, Laura Azocar
Facultad De Ciencias UCSC


INTRODUCCIÓN

El modelo actual de producción y consumo no resulta sostenible al fundamentarse en el empleo masivo de materias primas fósiles (Ghatak, 2011)

La búsqueda de nuevas tecnologías orientadas a remplazar el uso de los hidrocarburos, brindan una alternativa que conlleva a la interdependencia entre economía, medioambiente y sociedad (Lopez et al, 2010)

El uso de la biomasa como materia prima para procesos energéticos, generación de biocombustibles y precursores de químicos, se revela como una alternativa sustentable y ecológicamente amigable

La biorrefinería son un conjunto de procesos interconectados donde se procesa biomasa para obtener diversos productos valor




OBJETIVO

Evaluar la biomasa de podas urbanas de *Liquidámbar styraciflua* de la comuna de Concepción, para generar fenol como precursor de productos químicos de alto valor.

MATERIALES Y MÉTODOS

Ciudad de Concepción

Extracción de residuos de podas urbanas (*L. styraciflua*)



Tipos de residuos
1. Hojas
2. Ramas
3. Corteza

Biomasa lignocelulósica

Análisis experimental


1. Análisis elemental
2. Análisis proximal
3. Pirolisis en TGA GC-MS

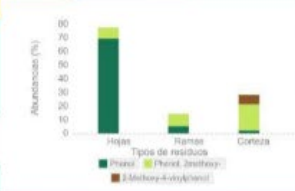
Análisis proximal:

Tabla I. Resultados del análisis proximal de muestras de biomasa residual de *L. styraciflua*.

	Humedad %	Volátiles %	Carbón fijo %	Ceniza %
Hoja	3,24	63,44	20,74	12,59
Rama	4,31	73,16	17,89	4,65*
Corteza	4,56	61,30	18,94	15,20

Pirolisis en TGA GC-MS:





RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Análisis elemental: Concentraciones de C, H, O **< 50**

Conclusiones

Los resultados preliminares obtenidos en este estudio sugieren la utilización de estos tipos de residuos bajo el concepto de biorrefinería, donde se emplearán las hojas y las cortezas para la producción de fenol (precursor químico de alto valor) y las ramas para la generación de energía.

Agradecimientos

A la Universidad Católica de la Santísima Concepción y particularmente a la Facultad de Ciencias, Doctorado en Ciencias mención Biodiversidad y Biorecursos.
Al Núcleo milenio en procesos catalíticos hacia la química sustentable (NM CSC).
A la Dirección de Aseo y Ornamento de la municipalidad de Concepción.

CONTACTOS

Rodrigo Ramírez Álvarez (rramirez@doctorado.ucsc.cl)
Fabiola Valdebenito Escobar (fvaldebenito@ucsc.cl)
Laura Andácar Ulloa (lazocar@ucsc.cl)

ANEXO 8

Entrevista:

<https://quimicasustentable.cl/estudiante-tesista-del-nucleo-obtiene-segundo-lugar-en-concurso-universitario-pechakucha-20x20/>

NOTICIAS

DIC. 3, 2019

Estudiante tesista del Núcleo obtiene segundo lugar en Concurso Universitario PechaKucha 20x20

NOV. 29, 2019

Estudiante de pregrado se suma al Núcleo con proyecto sobre obtención de moléculas plataforma a partir de biomasa

OCT. 30, 2019

Estudiantes del Núcleo reciben beca para realizar sus tesis de doctorado en la industria

OCT. 17, 2019

Escolares del Bio Bio descubren en la Química una aliada para enfrentar la crisis climática

OCT. 10, 2019

¡A bailar la ciencia se ha dicho!



Estudiante tesista del Núcleo obtiene segundo lugar en Concurso Universitario PechaKucha 20x20



DIC. 3, 2019

La competencia organizada por la Universidad Católica de la Santísima Concepción (UCSC) busca presentar a la comunidad temas de investigación e innovación en un lenguaje ágil y sencillo.

Con el estudio de caracterización de podas de *Liquidambar styraciflua* para desarrollar precursores químicos de alto valor, la estudiante tesista integrante del Núcleo Milenio en Procesos Catalíticos hacia la Química Sustentable (CSC), Alexandra Muñoz, dirigida por su profesora Dra. Laura Azócar y apoyada por la Dra Fabiola Valdebenito, obtuvo el segundo lugar en el concurso universitario PechaKucha 20x20 "Ciencia y Tecnología UCSC: De la Universidad a la Comunidad", impulsado por la Dirección de Innovación UCSC.

Alexandra es estudiante de la carrera de Química Ambiental de la UCSC y participó en este concurso de su casa de estudios que busca que tanto académicos como estudiantes difundan sus trabajos de investigación e innovación desarrolladas durante el presente año, de una forma ágil y sencilla, utilizando el formato de presentación Pecha Kucha. Este formato consiste en presentar 20 diapositivas por 20 segundos cada una, con un total de 6 minutos y 40 segundos de presentación, con el objetivo de maximizar el intercambio de ideas y al mismo tiempo, mantener la atención del público. En este contexto, la presentación debería incluir contenido creativo, sencillo e informal para atraer y cautivar al público asistente, el cual no necesariamente maneja el tema a exponer.

Mediante este proyecto, explicó Muñoz, "se quiere conocer la composición lignocelulósica de muestras de ramas, hojas y corteza del árbol *Liquidambar styraciflua* y a partir de eso, someter la lignina obtenida a procesos químicos a altas temperaturas para conseguir fenol. También se conocerá la composición química y la obtención de moléculas de fenol de manera directa".

En ese sentido, Alejandra Muñoz, explicó que el aporte de su trabajo para el Núcleo Milenio CSC es que "esta investigación (tesis de pregrado) se enmarca en la primera etapa del proyecto, es decir, se enfoca en la caracterización química de la biomasa y su utilización de manera directa, sin procesos de fraccionamiento, para la obtención de precursores catalíticos a través de un proceso de pirólisis".

En este contexto, la estudiante tesista, indicó que "para haber sido mi primera experiencia en esta clase de concursos, fue un gran logro. La temática del proyecto resultó interesante, novedosa para los evaluadores y tiene un componente de difusión importante, esto es acercar la ciencia a la comunidad. En el caso específico de mi investigación fue destacado el que le queramos dar valor a residuos abundantes, disponibles como son las podas de liquidámbar como fuente de obtención de productos químicos de alto valor", concluyó.

Información: Monserrat Chávez, periodista del Núcleo Milenio CSC en Concepción.

ANEXO 9

Fenoles por GC/MS

Corteza:

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
5.1850	1H-Imidazole-4-ethanamine, 1-methyl-	72.0	C6H11N3	25.0	
5.2710	p-Xylene	96.8	C8H10	200.0	
5.5132	3,5-Dimethyl-3-heptene	81.4	C9H18	50.0	
5.7083	1-(2-Thienyl)-1-propanone	76.6	C7H8OS	25.0	
5.7445	4-tert-Butylcyclohexyl methyl ethylphosphonate	73.4	C13H27O3P	25.0	
5.8319	2-Acetyl-3,4,5,6-tetrahydropyridine	83.4	C7H11NO	100.0	
5.9804	3-Aminopyrazine 1-oxide	77.5	C4H5N3O	25.0	
5.9815	1-(2-Thienyl)-1-propanone	80.5	C7H8OS	50.0	
6.1631	2-Pyrazoline, 1-isopropyl-3,4-dimethyl-	75.9	C8H16N2	100.0	
6.1633	2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-isopropyl-	81.8	C8H16N2	50.0	
6.3089	5-Hexen-3-one	83.5	C6H10O	25.0	
6.3195	1-(2-Thienyl)-1-propanone	72.6	C7H8OS	25.0	
6.5192	Dimethylphosphinic fluoride	74.0	C2H6FOP	25.0	
6.5701	1-[1,2,4]Triazol-1-ylethanone	81.7	C4H5N3O	25.0	
6.6694	Pentanoic acid	74.5	C5H10O2	25.0	
6.6929	Ethanone, 1-(1-methylcyclohexyl)-	78.8	C9H16O	50.0	
6.6936	Cyclohexane, 1-methyl-3-propyl-	84.7	C10H20	200.0	
6.8933	Creatinine, 1-trifluoroacetyl-	78.4	C6H6F3N3O2	25.0	
6.9045	Decane	90.6	C10H22	100.0	
7.0935	Methanamine, N,N-difluoro-	71.2	CH3F2N	25.0	
7.1819	Cyclohexene, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	82.5	C10H18	200.0	
7.1987	1,3,5-Triazine, 2,4,6-trimethyl-	85.0	C6H9N3	50.0	
7.2464	Trimethylaluminum	74.7	C3H9Al	25.0	
7.2538	Octane, 3-ethyl-	81.9	C10H22	50.0	
7.3113	2-Butynamide, N,N-dimethyl-	74.3	C6H9NO	25.0	
7.4447	Cyclohexane, butyl-	89.0	C10H20	100.0	
7.4534	Cyclohexane, (1-methylpropyl)-	82.0	C10H20	200.0	
7.4708	Cyclopropanebutanoic acid, 2,4-dioxo-, methyl ester	78.4	C8H10O4	25.0	
7.4730	1,3,5-Triazine-2-carboxylic acid, 4,6-diamino-	74.5	C4H5N5O2	50.0	
7.5951	3-Cyclohexen-1-one, 2,5,5-trimethyl-	81.8	C9H14O	100.0	
7.5983	Fomepizole	78.4	C4H6N2	25.0	
7.6385	Ethanone, 1-(2-furanyl)-	75.7	C6H6O2	25.0	
7.6662	1H-Indene, octahydro-5-methyl-	85.0	C10H18	200.0	
7.6729	Cyclohexane, 1-ethyl-2-propyl-	77.2	C11H22	200.0	
7.8127	Heptane, 4-ethyl-	85.7	C9H20	50.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
7.8439	Naphthalene, decahydro-, trans-	94.4	C10H18	100.0	
7.9157	Decane, 2-methyl-	94.4	C11H24	100.0	
7.9345	Cyclohexane, 1-ethyl-2-propyl-	74.2	C11H22	50.0	
7.9661	Ethanone, 1-(1-ethyl-3-methyl-1H-pyrazol-4-yl)-	72.4	C8H12N2O	25.0	
8.0144	Decane, 3-methyl-	89.1	C11H24	25.0	
8.0485	Oxazole, 4-ethyl-2,5-dimethyl-	84.4	C7H11NO	25.0	
8.1445	Cyclopentane, 1-hydroxymethyl-1,3-dimethyl-	76.2	C8H16O	25.0	
8.1458	Cyclohexane, 1-bromo-4-methyl-	77.4	C7H13Br	25.0	
8.1973	Pentanoic acid	84.3	C5H10O2	25.0	
8.2600	Cyclohexanone, 3-butyl-	87.5	C10H18O	200.0	
8.2619	Aminoacetonitrile	82.4	C2H4N2	25.0	
8.3469	2-Propanamine, N,N-methanetetraylbis-	71.6	C7H14N2	50.0	
8.3745	2-Cyclohexen-1-one, 4-ethyl-3,4-dimethyl-	81.5	C10H16O	100.0	
8.3775	1-Propanone, 1-(2-furanyl)-	74.6	C7H8O2	25.0	
8.4692	Undecane	95.5	C11H24	200.0	
8.5496	Cyclohexene, 1-butyl-	83.6	C10H18	100.0	
8.5512	Naphthalene, decahydro-, cis-	81.2	C10H18	200.0	
8.6829	1,3-Cyclopentanedione, 2-isopentyl-	72.9	C10H16O2	25.0	
8.7173	1-Methylbicyclo(4.4.0)decane(trans)	92.3	C11H20	50.0	
8.7346	Creatinine	78.6	C4H7N3O	25.0	
8.7543	1-Aminocyclopentanecarboxylic acid, n-propargyloxycarbonyl-, nonyl ester	79.6	C19H31NO4	25.0	
8.8221	Decane, 3,7-dimethyl-	80.0	C12H26	50.0	
8.8865	Decane, 3,7-dimethyl-	87.9	C12H26	50.0	
8.9708	1-Methylbicyclo(4.4.0)decane(trans)	92.4	C11H20	100.0	
8.9807	Undecane, 4,4-dimethyl-	83.1	C13H28	50.0	
9.0233	2-Pyrazoline, 1-isopropyl-5-methyl-	74.7	C7H14N2	50.0	
9.0394	Cyclohexane, pentyl-	87.3	C11H22	200.0	
9.0935	2-Octen-4-one	81.8	C8H14O	25.0	
9.1475	L-Alanine, N-(trifluoroacetyl)-, 1-methylpropyl ester, (S)-	71.6	C9H14F3NO3	100.0	
9.1527	Butanal, 3-methyl-2-methylene-, diethylhydrazone	70.2	C10H20N2	200.0	
9.2014	Ethanone, 1-[1-methyl-3-(1-methylethyl)-1H-pyrazol-5-yl]-	71.5	C9H14N2O	50.0	
9.2245	Thiazole, 2,5-diethyl-	71.2	C7H11NS	50.0	
9.2426	Cyclohexane, 1-ethyl-1-methyl-	71.8	C9H18	25.0	
9.2936	Furazan, dimethyl-	79.7	C4H6N2O	50.0	
9.3017	Acetonitrile, hydroxy-	80.4	C2H3NO	25.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	CA
9.3072	Borane, ethylisopropylmethyl-	71.5	C6H15B	25.0	
9.3104	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	78.3	C11H20	200.0	
9.3698	Undecane, 4-methyl-	92.1	C12H26	100.0	
9.3893	Cyclohexanone, 5-methyl-2-(1-methylethylidene)-	71.1	C10H16O	25.0	
9.3900	cis-Decalin, 2-syn-methyl-	70.4	C11H20	100.0	
9.3989	2-Thiophenecarboxylic acid, 4-nitrophenyl ester	77.0	C11H7NO4S	25.0	
9.4339	Undecane, 2-methyl-	88.5	C12H26	25.0	
9.4687	Alpha-pyrone-6-carboxylic acid	72.4	C6H4O4	50.0	
9.4690	1-Methylbicyclo(4.4.0)decane(trans)	74.5	C11H20	100.0	
9.4702	1-Adamantanol	72.8	C10H16O	50.0	
9.5344	Undecane, 3-methyl-	96.2	C12H26	200.0	
9.5567	Naphthalene, decahydro-1,5-dimethyl-	85.6	C12H22	200.0	
9.5886	N-Cyclopropanecarbonylcyclopropanecarbohydrazide	84.6	C8H12N2O2	25.0	
9.6110	Sulfurous acid, butyl propyl ester	73.7	C7H16O3S	25.0	
9.6700	Norbornane, 2-isobutyl-	83.9	C11H20	25.0	
9.6704	Spiro[5.5]undecane	81.0	C11H20	200.0	
9.7619	1,4-Benzodioxan-6-amine	71.2	C8H9NO2	25.0	
9.7693	Borane, diethyl(decyloxy)-	86.4	C14H31BO	25.0	
9.7949	1,2,4,5-Tetrazine	85.9	C2H2N4	25.0	
9.8484	Cyclopropane, nonyl-	94.4	C12H24	50.0	
9.8747	Naphtho[2,1-b]furan	90.0	C12H8O	50.0	
9.8906	1,3-Dioxane, 2-methyl-	81.7	C5H10O2	25.0	
9.9125	Ethanone, 1-(2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	70.9	C9H10O3	25.0	
9.9739	Dodecane	98.2	C12H26	50.0	
9.9952	Pyridine, 3-phenyl-	75.6	C11H9N	25.0	
10.0264	2,5-Dihydroxypropiophenone	72.7	C9H10O3	50.0	
10.0703	trans,cis-1,7-Dimethylspiro[4.5]decane	73.9	C12H22	100.0	
10.0703	2H-Pyran-2-one, 6-pentyl-	73.9	C10H14O2	50.0	
10.1223	Octa-3,5-diene-2,7-dione, 4,5-dihydroxy-	71.9	C8H10O4	25.0	
10.1461	Oxazole, 4-hexyl-2,5-dimethyl-	79.6	C11H19NO	25.0	
10.1550	Isoxazole, 5-methyl-	75.1	C4H5NO	25.0	
10.1696	Undecane, 2,5-dimethyl-	93.1	C13H28	200.0	
10.1767	Succinic acid, 2,4,6-trichlorophenyl 2-naphthylmethyl ester	75.5	C21H15Cl3O4	25.0	
10.2027	Silane, trimethyl(2-methylphenyl)-	71.4	C10H16Si	25.0	
10.2858	Undecane, 3,7-dimethyl-	85.6	C13H28	50.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
10.3563	cis,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	81.0	C12H22	100.0	
10.3593	Cyclohexane, 2-butyl-1,1,3-trimethyl-	83.9	C13H26	200.0	
10.3602	N-Methyl-2-furohydroxamic acid	81.9	C6H7NO3	25.0	
10.3691	Tridecane, 6-propyl-	74.9	C16H34	100.0	
10.3789	Nonane, 1-iodo-	79.1	C9H19I	50.0	
10.4417	1-Ethyl-5-methylcyclopentene	76.0	C8H14	25.0	
10.4426	cis,trans-3-Ethylbicyclo[4.4.0]decane	87.3	C12H22	100.0	
10.4736	5-(Sec-butylamino-methyl)-furan-2-carboxylic acid methyl ester	76.9	C11H17NO3	25.0	
10.5734	Cyclohexane, hexyl-	82.7	C12H24	50.0	
10.5981	cis,trans-3-Ethylbicyclo[4.4.0]decane	70.1	C12H22	50.0	
10.6071	N-Guanylproline	73.9	C6H11N3O2	50.0	
10.6077	1H-Pyrolo[1,2-c]imidazole-1,3(2H)-dione, tetrahydro-	80.4	C6H8N2O2	25.0	
10.6817	cis,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	78.6	C12H22	50.0	
10.7194	Dodecane, 6-methyl-	85.2	C13H28	50.0	
10.7219	Propanedinitrile, cyclohexyl(2-methylcyclohexyl)-	79.0	C16H24N2	25.0	
10.7425	Alanine, N-methyl-n-propargyloxycarbonyl-, decyl ester	80.6	C18H31NO4	25.0	
10.7480	1,3,5-Triazine-2,4,6-triamine	70.1	C3H6N6	25.0	
10.7624	2-Amino-4-acetamino anisole	74.7	C9H12N2O2	50.0	
10.8026	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	75.3	C14H22	25.0	
10.8130	Dodecane, 4-methyl-	95.3	C13H28	25.0	
10.8794	Dodecane, 2-methyl-	94.0	C13H28	200.0	
10.9010	2-Fluoro-5-methylaniline	72.6	C7H8FN	25.0	
10.9089	Pyridine, 3-phenyl-	75.4	C11H9N	25.0	
10.9473	Methylphosphonic acid, 2TMS derivative	74.5	C7H21O3PSi2	25.0	
11.0040	Undecane, 6,6-dimethyl-	91.6	C13H28	50.0	
11.1177	2',4'-Dihydroxypropiophenone	82.3	C9H10O3	25.0	
11.2301	2',4'-Dihydroxy-3'-methylpropiophenone	71.7	C10H12O3	25.0	
11.2609	2-Hydroxy-iso-butyrophenone	85.0	C10H12O2	50.0	
11.2674	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	76.6	C5H9N	25.0	
11.2829	Cyclopentane, 1-hydroxymethyl-1,3-dimethyl-	78.7	C8H16O	50.0	
11.3145	1,2-Benzisothiazol-5-amine, 3-methoxy-	70.3	C8H8N2OS	25.0	
11.3677	1H-Imidazole-4-ethanamine, 1-methyl-	74.0	C6H11N3	25.0	
11.3918	Tridecane	98.2	C13H28	200.0	
11.4515	3-Ethoxy-4-methoxybenzaldehyde	70.2	C10H12O3	25.0	
11.5273	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	82.4	C8H24O4Si4	25.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor
11.5419	Undecane, 6,6-dimethyl-	80.5	C13H28	25.0
11.5558	4-Formyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carbonitrile	75.3	C8H8N2O	25.0
11.5624	1,1'-Bicyclohexyl	91.7	C12H22	50.0
11.6335	Nonane, 2-methyl-	86.4	C10H22	25.0
11.6335	Undecane, 3,5-dimethyl-	86.9	C13H28	25.0
11.6900	2-Methoxy-4-vinylphenol	95.7	C9H10O2	50.0
11.7575	Pyridine, 3-phenyl-	78.7	C11H9N	25.0
11.7857	Bis(1,3-dimethylbutyl) methylphosphonate	72.8	C13H29O3P	25.0
12.0191	(Z)-(Z)-Hex-3-en-1-yl 2-methylbut-2-enoate	83.6	C11H18O2	25.0
12.0194	Heptylcyclohexane	77.6	C13H26	200.0
12.0572	1,3-Diacetin	88.4	C7H12O5	50.0
12.0746	4,6-Dihydroxy-2-methylpyrimidine	74.1	C5H6N2O2	25.0
12.1110	Cyclobutene-3,4-dione, 1-dimethylamino-2-hydroxy-	73.7	C6H7NO3	25.0
12.1772	Tridecane, 4-methyl-	86.7	C14H30	200.0
12.2450	Tridecane, 2-methyl-	86.8	C14H30	50.0
12.3115	2(1H)-Quinoxalinone, 3-methyl-	72.1	C9H8N2O	25.0
12.3404	Tridecane, 3-methyl-	91.3	C14H30	100.0
12.3475	4-Methyl-2-hexene,c&t	80.0	C7H14	25.0
12.4182	Dodecane, 2,7,10-trimethyl-	89.9	C15H32	200.0
12.6036	Propanoic acid, 3-chloro-, 4-formylphenyl ester	81.8	C10H9ClO3	25.0
12.6267	1-Tetradecene	98.9	C14H28	100.0
12.6301	L-Leucine, N-methyl-N-(but-3-yn-1-yloxy-carbonyl)-, hexadecyl ester	72.3	C28H51NO4	25.0
12.7282	Tetradecane	97.8	C14H30	100.0
12.8410	Hexasiloxane, tetradecamethyl-	90.8	C14H42O5Si6	50.0
12.8729	Vanillin	96.8	C8H8O3	200.0
12.9095	2,2'-Isopropylidenedifuran	77.8	C11H12O2	25.0
12.9683	Ethane, 1,2-dibromo-	71.9	C2H4Br2	25.0
13.1488	Phosphonofluoridothioic hydrazide, P,2,2-trimethyl-	70.8	C3H10FN2PS	25.0
13.3180	Ethanone, 1,1'-(1,4-phenylene)bis-	95.3	C10H10O2	100.0
13.3849	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	76.9	C5H9N	25.0
13.5631	Ethanone, 1,1'-(1,4-phenylene)bis-	81.1	C10H10O2	50.0
13.6231	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	72.6	C10H30O5Si5	25.0
13.7070	2,6-Di-tert-butyl-4-hydroxy-4-methylcyclohexa-2,5-dien-1-one	73.2	C15H24O2	200.0
13.8147	4H-1-Benzothiopyran-4-one, 2,3-dihydro-3-methyl-	74.1	C10H10OS	25.0
13.9296	Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl-	77.3	C14H42O7Si7	100.0

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
13.9876	Sulfurous acid, 2-ethylhexyl hexyl ester	79.2	C14H30O3S	25.0	
13.9924	3,5-Heptanedione, 4-ethyl-2,2,6,6-tetramethyl-	80.0	C13H24O2	100.0	
14.0098	Ethanone, 1-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	92.2	C9H10O3	50.0	
14.2136	2,4-Di-tert-butylphenol	89.0	C14H22O	100.0	
14.2353	Tributyl phosphate	73.1	C12H27O4P	25.0	
14.4405	Octane, 3,3-dimethyl-	70.4	C10H22	50.0	
14.5253	2-Propanone, 1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-	86.2	C10H12O3	25.0	
14.6511	4-Bromoguaiacol	72.2	C7H7BrO2	25.0	
14.8352	2-Methyl-2-octene	75.0	C9H18	25.0	
14.8623	Heptasiloxane, hexadecamethyl-	74.1	C16H48O6Si7	50.0	
14.8689	4-Methylbenzylamine, N-tert-butyl(dimethylsilyl)-	74.5	C14H25NSi	25.0	
14.8753	1-Hexyn-3-ol	80.2	C6H10O	25.0	
14.8754	Cyclobutanone, 3-ethyl-	73.1	C6H10O	50.0	
14.9584	1-Adamantanecarboxylic acid, 4-nitrophenyl ester	75.1	C17H19NO4	25.0	
15.0124	Hexestrol	74.6	C18H22O2	25.0	
15.1010	Cetene	98.8	C16H32	100.0	
15.1821	Hexadecane	90.5	C16H34	100.0	
15.2097	Pyrolo[3,2-d]pyrimidin-2,4(1H,3H)-dione	82.7	C6H5N3O2	25.0	
15.2254	Diethyl Phthalate	93.5	C12H14O4	100.0	
15.5019	Dodecanoic acid, 1-methylethyl ester	72.8	C15H30O2	50.0	
15.7084	Benzophenone	97.2	C13H10O	100.0	
15.7101	8-Methyl-5H-pyrido[4,3-b]indole	75.8	C12H10N2	25.0	
15.7556	1,4-Methanobenzocyclodecene, 1,2,3,4,4a,5,8,9,12,12a-decahydro-	78.0	C15H22	100.0	
15.8018	Tributyl phosphate	79.4	C12H27O4P	50.0	
15.9114	p-(Benzylideneamino)phenol	78.1	C13H11NO	25.0	
15.9225	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	90.1	C16H48O8Si8	100.0	
15.9980	N-(4-Methoxybenzylidene)aniline	72.1	C14H13NO	25.0	
16.0623	8-Methyl-5H-pyrido[4,3-b]indole	82.4	C12H10N2	25.0	
16.1032	p-Cyanophenyl p-(2-methylbutoxy)benzoate	74.5	C19H19NO3	25.0	
16.1644	Adipic acid, butyl isobutyl ester	79.8	C14H26O4	25.0	
16.1906	n-Hexyl salicylate	87.4	C13H18O3	25.0	
16.2652	Sebacic acid, nonyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	72.1	C34H50O4	25.0	
16.3166	Undecane, 3,5-dimethyl-	88.5	C13H28	25.0	
16.3781	Undecane, 6,6-dimethyl-	82.4	C13H28	25.0	
16.5147	1,2-Benzenediol, O-(4-methoxybenzoyl)-O'-(2-furoyl)-	78.8	C19H14O6	25.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor
16.5269	Phenylglyoxylic acid, pentyl ester	92.1	C13H16O3	25.0
16.6125	Benzoic acid, 2,4-dihydroxy-3,6-dimethyl-, methyl ester	89.8	C10H12O4	50.0
16.6727	Heptasiloxane, hexadecamethyl-	74.9	C16H48O6Si7	100.0
16.6944	Sebacic acid, ethyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	72.0	C27H36O4	50.0
16.7750	1-Acetyl-4,6,8-trimethylazulene	74.5	C15H16O	50.0
16.9089	2-Oxetanone, 3,3-dimethyl-	77.6	C5H8O2	25.0
16.9268	Phthalic acid, ethyl 2-propylphenyl ester	75.8	C19H20O4	25.0
17.0070	1H-Purin-6-amine, N-phenyl-	71.9	C11H9N5	25.0
17.0203	Benzamide, 4-methoxy-N-allyl-N-propyl-	72.5	C14H19NO2	25.0
17.0667	4-(6-Methoxy-3-methyl-2-benzofuranyl)-2-butanone	76.5	C14H16O3	25.0
17.0920	Benzothiazole, 2-(m-tolyl)-	72.9	C14H11NS	25.0
17.1184	2-Propyn-1-ol, acetate	92.1	C5H6O2	25.0
17.1271	Methanone, (4-methylphenyl)phenyl-	92.6	C14H12O	50.0
17.1288	L-Leucine, N-methyl-N-(but-3-yn-1-yloxy-carbonyl)-, hexadecyl ester	71.5	C28H51NO4	25.0
17.1740	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	85.9	C15H22O2	25.0
17.3250	1-Octadecene	97.7	C18H36	100.0
17.3935	Octadecane	88.6	C18H38	100.0
17.4605	Diphenylacetylene	82.0	C14H10	25.0
17.4947	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	85.5	C19H40	50.0
17.5080	Pimpinellin	73.9	C13H10O5	25.0
17.5775	2-Ethylhexyl salicylate	87.5	C15H22O3	100.0
17.6492	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	87.7	C18H54O9Si9	50.0
17.6647	Thietane, 2,4-dimethyl-	73.3	C5H10S	25.0
17.7008	Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyanophenyl ester	76.7	C21H23NO2	25.0
17.7152	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyacetophenone	78.9	C16H24O2	50.0
17.9713	2-Propenoic acid, 3-[4-(acetyloxy)-3-methoxyphenyl]-, methyl ester	77.8	C13H14O5	25.0
17.9766	2H,8H-Benzo[1,2-b:5,4-b']dipyran-2-one, 8,8-dimethyl-	73.2	C14H12O3	25.0
17.9939	N-Phenyl-5,6,7,8-tetrahydroquinazolin-2-amine	72.3	C14H15N3	25.0
18.0310	Naphtho[2,3-c]furan-1(3H)-one, 6-hydroxy-5,7-dimethoxy-	71.4	C14H12O5	25.0
18.1367	N-(Benzo[1,3]dioxol-5-yl(methylene)-p-tolyl)-amine	76.1	C15H13NO2	25.0
18.1850	1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	98.9	C16H22O4	50.0
18.2618	Etixeridine	75.8	C18H27NO4	25.0
18.2768	L-Valine, N-(3-methoxy-2,4,5-trifluorobenzoyl)-, isohexyl ester	72.1	C19H26F3NO4	25.0
18.4192	Nonadecane	91.3	C19H40	100.0
18.4523	Homosalate	92.3	C16H22O3	50.0

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
18.4655	2-Propanamine	85.8	C3H9N	25.0	
18.6549	Phthalic acid, butyl 2-pentyl ester	94.5	C17H24O4	50.0	
18.6895	Hexadecanoic acid, methyl ester	75.8	C17H34O2	200.0	
18.7716	Benzene, 1,1'-(1,1,2,2-tetramethyl-1,2-ethanediyloxy)bis-	71.0	C18H22	50.0	
18.8772	Diphenyl sulfone	88.8	C12H10O2S	100.0	
18.8790	Benzimidazo[2,1-a]isoquinoline	78.6	C15H10N2	25.0	
18.9276	Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	74.2	C18H28O3	50.0	
19.0535	N-(Benzo[1,3]dioxol-5-yl(methylene)-p-tolyl)-amine	70.2	C15H13NO2	25.0	
19.0902	Isophthalic acid, di(2-fluorophenyl) ester	74.6	C20H12F2O4	25.0	
19.1357	1,3-Diphenyl-4H-1,2,4-triazoline-5-thione	70.1	C14H11N3S	25.0	
19.1432	Dibutyl phthalate	97.2	C16H22O4	100.0	
19.2636	Isophthalic acid, di(2-fluorophenyl) ester	76.3	C20H12F2O4	25.0	
19.3428	1-Tetradecene	95.2	C14H28	25.0	
19.3428	1-Octadecanol	93.5	C18H38O	50.0	
19.4011	Eicosane	98.9	C20H42	100.0	
19.4112	Benzoic acid, pentyl ester	83.6	C12H16O2	25.0	
19.6400	Propane, 1-(ethenylthio)-	75.1	C5H10S	25.0	
19.7397	1,5-Dihydroxy-6-methoxyxanthone	70.6	C14H10O5	25.0	
19.8732	Methyl (3,4,5-trinitro-1H-pyrazol-1-yl)acetate	73.0	C6H5N5O8	25.0	
19.8870	9,10-Anthracenedione, 1-amino-4-hydroxy-	71.1	C14H9NO3	25.0	
19.8944	Palmitic Acid, TMS derivative	77.6	C19H40O2Si	50.0	
19.9098	Oxybenzone	76.8	C14H12O3	25.0	
20.0005	1,3-Diphenyl-4H-1,2,4-triazoline-5-thione	70.8	C14H11N3S	25.0	
20.0853	5H-Naphtho[2,3-b]carbazole	79.8	C20H13N	25.0	
20.3008	Pyrene	84.4	C16H10	50.0	
20.3420	Heneicosane	99.1	C21H44	50.0	
20.4131	2-Propanamine	85.3	C3H9N	25.0	
20.5970	Methyl stearate	78.5	C19H38O2	100.0	
20.6027	Propenoic acid, 2-cyano-3-(1-methyl-5-phenylthio-2-pyrrolyl)-, methyl ester	72.9	C16H14N2O2S	25.0	
20.7017	3H-1,2,4-Triazol-3-one, 1,2-dihydro-	86.2	C2H3N3O	25.0	
20.7054	N-(2-Methyl-2H-tetrazol-5-yl)-acetamide	73.9	C4H7N5O	25.0	
20.8670	Benzo(a)pyren-6-amine	77.9	C20H13N	25.0	
20.8670	4'-Amino-6-methoxyaurone	70.8	C16H13NO3	25.0	
20.9093	4-Methylheneicosane	70.1	C22H46	50.0	
20.9748	Z,E-7,11-Hexadecadien-1-yl acetate	82.8	C18H32O2	100.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor	C
20.9930	Heneicosane, 3-methyl-	72.3	C22H46	100.0	
21.0786	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	75.8	C5H9N	25.0	
21.1507	1,2-Dimethoxy-4-(adamantyl-1)benzene	78.1	C18H24O2	25.0	
21.1571	Isopropyl Alcohol	89.4	C3H8O	25.0	
21.2452	Docosane	98.8	C22H46	100.0	
21.3268	Benzoic acid, pentyl ester	77.9	C12H16O2	25.0	
21.5637	Tetracosane	74.3	C24H50	100.0	
21.7861	Heneicosane, 3-methyl-	82.0	C22H46	50.0	
21.8564	Dibutyl phthalate	83.4	C16H22O4	50.0	
21.8684	Dodecane, 1-iodo-	79.8	C12H25I	25.0	
21.9825	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	72.7	C5H9N	25.0	
22.1098	Tetracosane	96.3	C24H50	50.0	
22.2008	Methylamine, N,N-dimethyl-	71.1	C3H9N	25.0	
22.2280	Benzoic acid, 2-methylpropyl ester	88.1	C11H14O2	50.0	
22.3779	2-Ethylhexyl trans-4-methoxycinnamate	80.2	C18H26O3	50.0	
22.4038	Tetracosane	72.5	C24H50	100.0	
22.4047	Hexadecane, 2-methyl-	73.2	C17H36	100.0	
22.4828	Pyrollidine, 2,5-bis(imino)-	76.6	C4H7N3	25.0	
22.6265	Tricosane, 2-methyl-	88.8	C24H50	200.0	
22.7063	Octane, 2,7-dimethyl-	86.2	C10H22	25.0	
22.7064	Tridecane, 2-methyl-	76.8	C14H30	50.0	
22.7226	Ethanol, 2-ethoxy-	78.3	C4H10O2	25.0	
22.8472	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	74.8	C5H9N	25.0	
22.8652	Propenoic acid, 2-cyano-3-(1-methyl-5-phenylthio-2-pyrrolyl)-, methyl ester	74.1	C16H14N2O2S	25.0	
22.9340	Propenoic acid, 2-cyano-3-(1-methyl-5-phenylthio-2-pyrrolyl)-, methyl ester	80.6	C16H14N2O2S	25.0	
22.9608	Tetracosane	84.9	C24H50	200.0	
22.9829	Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	86.1	C22H42O4	100.0	
23.0159	Silane, methyltriphenoxy-	71.0	C19H18O3Si	25.0	
23.0489	Propenoic acid, 2-cyano-3-(1-methyl-5-phenylthio-2-pyrrolyl)-, methyl ester	75.4	C16H14N2O2S	25.0	
23.0965	Benzoic acid, 2-methylpropyl ester	84.7	C11H14O2	25.0	
23.2015	Cinnamyl cinnamate	95.1	C18H16O2	50.0	
23.2150	threo-2,5-Dimethyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	72.0	C11H20O2	25.0	
23.4359	2-Methyltetracosane	88.7	C25H52	200.0	
23.5183	3-Methyltetracosane	78.8	C25H52	100.0	
23.7336	Pentacosane	98.1	C25H52	100.0	

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor
23.8412	Formamide, N-formyl-N-methyl-	89.0	C3H5NO2	25.0
23.9113	1,2-Ethandiol, monobenzoate	83.8	C9H10O3	25.0
23.9907	Fumaric acid, ethyl tetrahydrofurfuryl ester	75.1	C11H16O5	25.0
24.0512	Dicyclohexyl phthalate	72.1	C20H26O4	50.0
24.0859	Berbine, 13,13a-didehydro-9,10-dimethoxy-2,3-(methylenedioxy)-	73.9	C20H19NO4	25.0
24.1175	5-Methyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	87.0	C10H18O2	25.0
24.1689	Phthalic acid, di(2-propylpentyl) ester	97.3	C24H38O4	50.0
24.1689	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	97.3	C24H38O4	100.0
24.2121	Triphenylphosphine oxide	82.4	C18H15OP	25.0
24.2810	Propanedioic acid, [methyl(phenylmethyl)amino]-, diethyl ester	71.1	C15H21NO4	25.0
24.2895	Dodecane, 1-iodo-	90.1	C12H25I	25.0
24.2895	Octadecane, 1-iodo-	89.7	C18H37I	25.0
24.3938	2-Butyl-1,2-azaborolidine	76.9	C7H16BN	25.0
24.4977	Hexacosane	95.9	C26H54	100.0
24.7404	Hexadecane, 2-methyl-	75.9	C17H36	50.0
24.7630	1H-1,2,3-Triazole-4-carboxaldehyde	72.4	C3H3N3O	50.0
24.8284	4-Heptanone, 5,5-diethyl-2,2,3,3-tetramethyl-	73.0	C15H30O	25.0
24.8677	5-Methyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	81.8	C10H18O2	25.0
24.9560	Decane, 2,4-dimethyl-	88.2	C12H26	25.0
25.0424	3-Methylhexacosane	96.1	C27H56	100.0
25.1572	1H-Pyrrole, 2,5-dihydro-	75.5	C4H7N	25.0
25.1712	Octocrylene	90.8	C24H27NO2	200.0
25.2335	Pentacosane	96.3	C25H52	100.0
25.2816	Silane, diphenyldodecyloxy(2-methoxyethoxy)-	70.2	C27H42O3Si	25.0
25.3626	Methylamine, N,N-dimethyl-	77.9	C3H9N	25.0
25.4727	1,5-Pentanediol, O,O'-di(3-methylbut-2-enyl)-	70.0	C15H24O4	25.0
25.5584	Silane, methyltriphenoxy-	70.8	C19H18O3Si	25.0
25.5935	3-Butenamide	76.4	C4H7NO	25.0
25.5935	5-Methyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	81.5	C10H18O2	25.0
25.6047	2-Butyl-3,4,5,6-tetrahydropyridine	76.4	C9H17N	25.0
25.6304	1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	88.2	C24H38O4	100.0
25.6778	Dodecane, 1-iodo-	90.5	C12H25I	50.0
25.7101	Silane, dimethyl(4-methoxyphenoxy)dodecyloxy-	70.2	C21H38O3Si	25.0
25.7640	3-Methylheptacosane	89.1	C28H58	100.0
25.8842	Ethanol, 2-ethoxy-	73.6	C4H10O2	25.0

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor
25.9452	Octacosane	96.3	C28H58	200.0
25.9803	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	77.2	C5H9N	50.0
26.0609	Avobenzene	74.5	C20H22O3	200.0
26.1972	Squalene	95.5	C30H50	100.0
26.2323	Silane, methyltriphenoxy-	73.3	C19H18O3Si	25.0
26.2550	Furazan, dimethyl-	81.6	C4H6N2O	25.0
26.2980	.alpha.-Pyridone, 4,6-dimethyl-1,3,5-triphenyl-	71.0	C25H21NO	50.0
26.3301	5-Methyl-4-hexene-1-yl acetate	71.2	C9H16O2	25.0
26.3801	Octacosane, 2-methyl-	85.9	C29H60	200.0
26.4567	1H-1,2,3-Triazole-4-carboxaldehyde	72.0	C3H3N3O	25.0
26.4594	3-Methyloctacosane	93.1	C29H60	100.0
26.4594	3-Methyloctacosane	92.8	C29H60	100.0
26.6322	Tetratriacontane	95.9	C34H70	200.0
26.6929	Cyclohexane, octyl-	81.1	C14H28	50.0
26.7784	Formamide, N-formyl-N-methyl-	78.9	C3H5NO2	25.0
26.8874	1,5-Dicyano-2,4-dimethyl-2,4-diazapentane	70.4	C7H12N4	25.0
26.9327	1H-1,2,3-Triazole-4-carboxaldehyde	78.6	C3H3N3O	25.0
26.9330	3-Butene-1,2-diol, 1-(2-furanyl)-	75.1	C8H10O3	50.0
26.9335	3-Heptanone, 5-methylene-	75.8	C8H14O	25.0
26.9689	5-Iodopentan-2-one	70.3	C5H9IO	25.0
27.0243	2-Fluoropyridine	71.9	C5H4FN	25.0
27.0510	Dodecane, 1-iodo-	79.4	C12H25I	25.0
27.0964	Borane, ethylisopropylmethyl-	71.5	C6H15B	25.0
27.1031	Hexadecanoic acid, dodecyl ester	70.5	C28H56O2	200.0
27.1235	1,4-Butanediol	86.5	C4H10O2	25.0
27.2979	Triacontane	95.9	C30H62	200.0
27.3807	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	83.5	C5H9N	25.0
27.5452	Ropivacaine	72.3	C17H26N2O	25.0
27.5489	Pentyl triacontyl ether	77.7	C35H72O	200.0
27.5543	1-Nitropyrazole	70.6	C3H3N3O2	25.0
27.5911	Propanoic acid, anhydride	93.7	C6H10O3	50.0
27.6230	5-Methyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	86.1	C10H18O2	25.0
27.7033	Triacontane, 1-iodo-	78.8	C30H61I	100.0
27.7611	2-Pyrazoline, 1-isobutyl-3-methyl-	73.0	C8H16N2	25.0
27.7856	3-Methyltriacontane	89.6	C31H64	100.0

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula	Window Size Factor
27.8248	5-Amino-3-methylpyrazole	70.4	C4H7N3	25.0
27.9440	Hentriacontane	97.1	C31H64	50.0
27.9441	Tetratriacontane	96.4	C34H70	100.0
28.0284	4,5-Dimethyl-2-isobutylloxazole	71.0	C9H15NO	25.0
28.0461	Cyclohexane, octyl-	79.8	C14H28	50.0
28.1910	1,4-Butanediol	76.4	C4H10O2	25.0
28.2566	4-Bromo-1,2-epoxy-2-methylbutane	83.4	C5H9BrO	25.0
28.2587	2-(1-Methylcyclohexyloxy)-tetrahydropyran	72.4	C12H22O2	50.0
28.3879	Hexadecanoic acid, tetradecyl ester	79.4	C30H60O2	200.0
28.4038	N-(1,1-Dimethyl-2-propynyl)-N,N-dimethylamine	73.1	C7H13N	25.0
28.5676	Tetratriacontane	95.2	C34H70	200.0
28.6641	(+/-)-.alpha.-Tocopherol acetate	82.1	C31H52O3	100.0
28.6883	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	82.2	C5H9N	25.0
28.7959	Triacontane	74.6	C30H62	200.0
29.0903	4,5-Dimethyl-2-isobutylloxazole	70.9	C9H15NO	25.0
29.1775	Tetratriacontane	94.3	C34H70	200.0
29.3224	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	76.9	C5H9N	25.0
29.3924	3,4-Hexanedione, 2,2,5-trimethyl-	79.0	C9H16O2	25.0
29.5321	5-Amino-3-methylpyrazole	71.4	C4H7N3	25.0
29.5466	Acetic acid, [3-hydroxy-4-(1-oxopropyl)phenyl] ester	73.6	C11H12O4	25.0
29.6316	Myristyl stearate	83.7	C32H64O2	100.0
29.8306	Tetratriacontane	90.1	C34H70	200.0
30.0147	Stigmastane, 3-oxo-	74.7	C29H50O	100.0
30.1639	Silane, diethylheptyloxyoctadecyloxy-	72.9	C29H62O2Si	50.0
30.1847	Stigmasterone	78.5	C29H46O	200.0
30.6477	.gamma.-Sitosterone	90.1	C29H48O	100.0

Hojas:

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
5.1263	Thymine	75.8	C5H6N2O2
5.1591	1-Ethyl-4-methylcyclohexane	81.8	C9H18
5.1644	1H-1,2,3-Triazole-4-carboxaldehyde	72.5	C3H3N3O
5.2534	p-Xylene	98.2	C8H10
5.3077	4-Heptanone, 2-methyl-	87.4	C8H16O
5.3568	Aziridine, 1-propyl-	80.5	C5H11N
5.4665	1-Ethyl-4-methylcyclohexane	88.9	C9H18
5.7522	2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-isopropyl-	77.6	C8H16N2
5.8045	Cyclohexanone, 3-ethyl-	81.0	C8H14O
5.8087	Borane, ethyldipropyl-	83.4	C8H19B
5.8421	Thiazole, 2,4-dimethyl-	73.3	C5H7NS
5.9636	Cyclopropanebutanoic acid, 2,4-dioxo-, methyl ester	77.3	C8H10O4
5.9641	Trans-1,4-diethylcyclohexane	81.7	C10H20
5.9796	Alanine, N-methyl-n-propargyloxycarbonyl-, heptyl ester	76.3	C15H25NO4
5.9817	L-Proline, N-pentyl-, pentyl ester	74.4	C15H29NO2
6.1480	2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-isopropyl-	78.1	C8H16N2
6.1503	1-(2-Thienyl)-1-propanone	73.4	C7H8OS
6.2329	1-(4-Methyl-1H-pyrazol-1-yl)ethanone	72.1	C6H8N2O
6.2593	Bicyclo[3.2.0]heptane, cis-	70.1	C7H12
6.2943	2-(Butyliden-2-one)tetrahydrofuran	78.0	C8H12O2
6.3040	2,2-Dimethyl-3-octanone	70.7	C10H20O
6.4310	Undecane, 6,6-dimethyl-	82.3	C13H28
6.5160	Glycine, furfuryl ester	76.2	C7H9NO3
6.5627	Cyclohexane, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	86.1	C10H20
6.6284	Pentanoic acid	84.1	C5H10O2
6.6795	Ethanone, 1-(1-methylcyclohexyl)-	77.4	C9H16O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
6.7711	3,5-Dimethyl-4-heptanone	92.0	C9H18O
6.8818	Creatinine, 1-trifluoroacetyl-	74.3	C6H6F3N3O2
6.8958	Decane	91.4	C10H22
7.0374	4-Octene, 2,6-dimethyl-, [S-(E)]-	79.7	C10H20
7.0792	2-Pentyn-4-one	73.3	C5H6O
7.0828	Cyclopentene, 3-pentyl-	73.3	C10H18
7.0849	(Z)-Dec-4-en-1-yl 2-methylbutanoate	75.1	C15H28O2
7.1330	1H-Tetrazol-5-amine	75.3	CH3N5
7.2049	1,3,5-Triazine, 2,4,6-trimethyl-	85.2	C6H9N3
7.2393	Octa-3,5-diene-2,7-dione, 4,5-dihydroxy-	83.5	C8H10O4
7.2511	Oxalic acid, allyl ethyl ester	74.4	C7H10O4
7.2573	Nonane, 2,6-dimethyl-	88.2	C11H24
7.2894	3,4-Dimethoxyphenol, 2-methylpropionate	75.5	C12H16O4
7.3079	1-Pentanone, 1-(2-furanyl)-	72.7	C9H12O2
7.3455	Octane, 3,3-dimethyl-	82.7	C10H22
7.4499	Decane, 2-cyclohexyl-	85.4	C16H32
7.4684	Difluoroisocyanatophosphine	70.5	CF2NOP
7.5146	Nonane, 3,7-dimethyl-	72.4	C11H24
7.5792	2-Propynal	81.6	C3H2O
7.5951	1H-Indene, octahydro-5-methyl-	85.3	C10H18
7.6385	Benzeneacetaldehyde	88.3	C8H8O
7.6656	Cyclohexane, 1-ethyl-2-propyl-	80.3	C11H22
7.6756	Oxazole, 4-hexyl-2,5-dimethyl-	74.9	C11H19NO
7.7305	Nonane, 3,7-dimethyl-	75.9	C11H24
7.7464	2H-Imidazole, 2,2,4,5-tetramethyl-	77.8	C7H12N2
7.8062	Heptane, 4-ethyl-	82.4	C9H20

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
7.8406	Naphthalene, decahydro-, trans-	91.8	C10H18
7.8539	4-Piperidinone, 1-methyl-	71.4	C6H11NO
7.9128	Decane, 2-methyl-	89.2	C11H24
7.9399	3-Butenoic acid, ethyl ester	74.6	C6H10O2
7.9542	3-Isoxazolecarboxylic acid, 5-methyl-, ethyl ester	76.0	C7H9NO3
7.9598	Pulegone	77.3	C10H16O
7.9680	Fumaric acid, dipropargyl ester	74.9	C10H8O4
8.0142	Decane, 3-methyl-	92.1	C11H24
8.0324	1,2,4,5-Tetrazine	82.7	C2H2N4
8.0429	Phosphorocyanidous difluoride	71.2	CF2NP
8.0587	2-Thiophenecarboxylic acid, 4-nitrophenyl ester	78.0	C11H7NO4S
8.0911	p-Mentha-1,5-dien-8-ol	84.8	C10H16O
8.1212	Benzofuran	86.9	C8H6O
8.1393	1H-1,2,4-Triazole, 3-ethyl-	78.6	C4H7N3
8.1434	Cyclobutane, methyl-	80.7	C5H10
8.1460	1-Azabicyclo[2.2.2]octan-3-one	79.2	C7H11NO
8.1987	Acetic acid, anhydride with formic acid	70.6	C3H4O3
8.2241	Ethanone, 1-(2,4-dihydroxyphenyl)-	74.9	C8H8O3
8.2241	2',6'-Dihydroxyacetophenone, acetate	77.9	C10H10O4
8.2600	Cyclohexanone, 3-butyl-	84.7	C10H18O
8.2734	1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-5-propyl-	86.4	C6H12N2
8.3191	1-Ethyl-4-methylcyclohexane	75.6	C9H18
8.3199	4H-1,2,4-Triazole, 4-ethyl-	74.2	C4H7N3
8.3635	p-(1-Propenyl)-toluene	77.1	C10H12
8.3715	3-Thiatricyclo[3.1.1.0(2,4)]heptane	77.3	C6H8S
8.3798	Carvenone	78.1	C10H16O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
8.4734	Undecane	97.8	C11H24
8.5002	2-Butyl-4,5-dimethyloxazole	72.1	C9H15NO
8.5453	1H-Indene, octahydro-5-methyl-	83.0	C10H18
8.5617	Ethanone, 1-(2-furanyl)-	81.1	C6H6O2
8.6320	Alanine, N-methyl-n-propargyloxycarbonyl-, decyl ester	77.3	C18H31NO4
8.7178	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	92.4	C11H20
8.7294	Azetidine	92.2	C3H7N
8.7391	Creatinine	80.1	C4H7N3O
8.7578	(5R,8R,8aS)-5,8-Dipropyloctahydroindolizine	83.6	C14H27N
8.7870	1-Phenyl-2-propanol	85.1	C9H12O
8.8250	Undecane, 3,8-dimethyl-	86.1	C13H28
8.8293	2-Butynamide, N-methyl-	72.6	C5H7NO
8.8402	Ethanone, 1-(2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	71.3	C9H10O3
8.8898	Decane, 3,7-dimethyl-	91.2	C12H26
8.9075	2'-Hydroxy-5'-methoxyacetophenone, 2-methylpropionate	71.6	C13H16O4
8.9456	DL-Norleucine, N-propargyloxycarbonyl-, isohexyl ester	80.0	C16H27NO4
8.9726	1-Methylbicyclo(4.4.0)decane(trans)	92.0	C11H20
8.9843	2,2-Dimethyl-3-heptanone	83.2	C9H18O
8.9844	5H-Tetrazol-5-amine	83.1	CH3N5
8.9883	N-(5-Amino-1H-1,2,4-triazol-3-yl)acetamide	77.4	C4H7N5O
9.0308	2-Pyrazoline, 1-isopropyl-5-methyl-	73.3	C7H14N2
9.0421	Cyclohexane, pentyl-	84.6	C11H22
9.0891	3H-1,2,4-Triazol-3-one, 1,2-dihydro-	73.3	C2H3N3O
9.0925	Aminopyrazine	76.4	C4H5N3
9.0961	trans-2-methyl-4-n-pentylthiane, S,S-dioxide	78.5	C11H22O2S
9.1467	5-Ethyldecane	80.0	C12H26

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
9.1733	Isoamyl cyanide	70.8	C6H11N
9.1861	1-Pentanone, 1-(2-furanyl)-	81.0	C9H12O2
9.2281	Thiazole, 2,5-diethyl-	70.6	C7H11NS
9.2420	2-Dodecanol	70.5	C12H26O
9.2971	Furazan, dimethyl-	83.6	C4H6N2O
9.2973	Decane, 2,5-dimethyl-	76.5	C12H26
9.3083	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-acetyl-	79.1	C6H6N2O4
9.3151	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	78.3	C11H20
9.3751	Undecane, 4-methyl-	90.6	C12H26
9.3937	Furan, 2-hexyl-	75.0	C10H16O
9.3971	Benzeneacetic acid, 3,4-dihydroxy-	70.1	C8H8O4
9.4019	1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-5-propyl-	81.9	C6H12N2
9.4382	Undecane, 2-methyl-	87.6	C12H26
9.4742	1-Methylbicyclo[4.4.0]decane(trans)	73.2	C11H20
9.5196	Naphtho[2,1-b]furan	75.6	C12H8O
9.5278	1,2,4,5-Tetrazin-3-amine	73.7	C2H3N5
9.5391	Undecane, 3-methyl-	93.6	C12H26
9.5632	Naphthalene, decahydro-1,5-dimethyl-	80.9	C12H22
9.5648	Silane, difluorodimethyl-	71.8	C2H6F2Si
9.5680	Benzene, (propylthio)-	70.2	C9H12S
9.6174	Hexane, 2,4,4-trimethyl-	74.0	C9H20
9.6541	(+)-Dibenzoyl-L-tartaric acid anhydride	76.0	C18H12O7
9.6740	Spiro[5.5]undecane	90.5	C11H20
9.7759	Borane, diethyl(decyloxy)-	85.2	C14H31BO
9.8109	Cyclohexane, 1-methyl-3-pentyl-	73.4	C12H24
9.8550	1-Undecene, 8-methyl-	88.6	C12H24

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
9.8816	Thiophene-2-carboxamide, N-methyl-N-(hept-2-yl)-	70.4	C13H21NOS
9.9158	Cyclopentene, 3-methyl-	72.3	C6H10
9.9181	L-Valine, N-(2-furoyl)-, undecyl ester	74.6	C21H35NO4
9.9372	Ethanone, 1-(3-hydroxyphenyl)-	72.5	C8H8O2
9.9796	Dodecane	98.1	C12H26
10.0274	1-Propanone, 2-methyl-1-(octahydro-3a-methyl-1H-inden-1-yl)-	71.0	C14H24O
10.0299	2-(3-methyl-2-cyclopenten-1-yl)-2-methylpropionaldehyde	70.2	C10H16O
10.0305	1-Propanone, 1-(1-cyclohexen-1-yl)-	79.1	C9H14O
10.0319	1H-Indene-1,6(2H)-dione, hexahydro-3a-methyl-	71.3	C10H14O2
10.0766	trans,cis-1,8-Dimethylspiro[4.5]decane	73.6	C12H22
10.1288	Octa-3,5-diene-2,7-dione, 4,5-dihydroxy-	72.7	C8H10O4
10.1388	Dimethylphosphinic fluoride	73.2	C2H6FOP
10.1722	Ethanone, 1-(2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	75.3	C9H10O3
10.1771	Undecane, 3,6-dimethyl-	92.5	C13H28
10.2320	2-Pyrrolidinone	70.3	C4H7NO
10.2916	Undecane, 3,7-dimethyl-	91.2	C13H28
10.2975	3-Methyl-thiophene-2-carboxamide	78.9	C6H7NOS
10.3633	cis,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	79.3	C12H22
10.3644	Phytol	75.4	C20H40O
10.3672	1-Propanone, 1-(2-furanyl)-	80.6	C7H8O2
10.3684	Bicyclo[2.2.1]heptane-2,5-dione, 1,7,7-trimethyl-	78.0	C10H14O2
10.3881	Dodecane, 1-iodo-	77.6	C12H25I
10.3888	2,4,7-Octanetrione	71.3	C8H12O3
10.4441	2-Butyl-3,4,5,6-tetrahydropyridine	73.3	C9H17N
10.4496	cis, cis-3-Ethylbicyclo[4.4.0]decane	84.2	C12H22
10.4497	cis,trans-3-Ethylbicyclo[4.4.0]decane	84.2	C12H22

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
10.4569	m-Cresol, TMS derivative	74.8	C10H16OSi
10.4682	1-Iodoundecane	78.4	C11H23I
10.5796	1-Azabicyclo[3.1.0]hexane	82.3	C5H9N
10.5797	Cyclohexane, hexyl-	81.5	C12H24
10.5812	DL-Norleucine, N-propargyloxycarbonyl-, hexyl ester	77.5	C16H27NO4
10.6131	N-Guanylproline	76.8	C6H11N3O2
10.6883	trans,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	74.7	C12H22
10.6884	cis,cis- and cis,trans-1,9-dimethylspiro[4.5]decane	76.0	C12H22
10.7256	Dodecane, 6-methyl-	85.6	C13H28
10.7421	cis-2-Dimethylamino-2-oxo-4-methyl-1,3,2-dioxaphosphorinane	73.0	C6H14NO3P
10.7500	2-Hexyl-5-pentylpyrrolidine	70.8	C15H31N
10.8096	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	78.0	C14H22
10.8208	Dodecane, 4-methyl-	93.1	C13H28
10.8862	Dodecane, 2-methyl-	91.1	C13H28
10.9084	Heptyl methyl ethylphosphonate	71.2	C10H23O3P
10.9154	Pyridine, 3-phenyl-	74.7	C11H9N
10.9212	1H-Pyrrole-2,5-dione, 3-ethenyl-4-methyl-	77.1	C7H7NO2
10.9747	Phenol, 2-methoxy-4-propyl-	70.0	C10H14O2
11.0126	Hexane, 2,2,5-trimethyl-	92.8	C9H20
11.0126	Undecane, 6,6-dimethyl-	90.2	C13H28
11.1049	Sulfurous acid, 2-ethylhexyl hexyl ester	79.7	C14H30O3S
11.2369	Ionone	77.1	C13H20O
11.2678	Tetramethyl orthocarbonate	74.4	C5H12O4
11.2877	Sulfurous acid, di(cyclohexylmethyl) ester	72.7	C14H26O3S
11.3060	4,5-Dimethoxy-2-hydroxyacetophenone	78.7	C10H12O4
11.3741	Furfural	77.3	C5H4O2

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
11.3962	Tridecane	98.5	C13H28
11.4160	Pentanoic acid, 5-hydroxy-, p-t-butylphenyl ester	71.3	C15H22O3
11.5225	3H-1,2,4-Triazol-3-one, 1,2-dihydro-	73.6	C2H3N3O
11.5504	Undecane, 6,6-dimethyl-	77.3	C13H28
11.5673	1,1'-Bicyclohexyl	89.5	C12H22
11.5826	Thiophene, 2-heptyl-	71.2	C11H18S
11.6421	Decane, 2,6,6-trimethyl-	85.1	C13H28
11.6421	3,5-Dimethyldodecane	84.1	C14H30
11.7003	2-Methoxy-4-vinylphenol	82.1	C9H10O2
11.8447	1-Aminocyclopentanecarboxylic acid, n-propargyloxycarbonyl-, nonyl ester	76.9	C19H31NO4
11.8461	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2-hydroxy-3,5,6-trimethyl-	72.5	C9H10O3
12.0109	Cyclohexene, 4-ethenyl-4-methyl-3-(1-methylethenyl)-1-(1-methylethyl)-, (3R-trans)-	90.5	C15H24
12.0274	1-Azabicyclo[3.1.0]hexane	77.4	C5H9N
12.0276	Heptylcyclohexane	80.2	C13H26
12.0359	(2S,5S)-2-Heptyl-5-hexylpyrrolidine	75.6	C17H35N
12.0578	Glycerol 1,2-diacetate	86.7	C7H12O5
12.0714	1,2,4,5-Tetrazine-3,6-diamine	75.9	C2H4N6
12.0773	Propanoic acid, ethenyl ester	74.7	C5H8O2
12.1195	Undecane, 4,4-dimethyl-	87.7	C13H28
12.1195	Tridecane, 5-methyl-	84.5	C14H30
12.1603	5-Amino-2-(4-cyanophenyl)pyrimidine	70.6	C11H8N4
12.1623	L-Leucine, N-methyl-N-(but-3-yn-1-yloxycarbonyl)-, hexadecyl ester	72.0	C28H51NO4
12.1856	Tridecane, 4-methyl-	84.9	C14H30
12.2521	Octane, 2,7-dimethyl-	84.8	C10H22
12.2522	Dodecane, 3-methyl-	84.2	C13H28
12.2628	1, 1, 5-Trimethyl-1, 2-dihydronaphthalene	78.0	C13H16

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
12.3048	Toluene, 4-(1,1-dimethyl-2-propynoxy)-	74.7	C12H14O
12.3473	Tridecane, 3-methyl-	91.2	C14H30
12.4263	Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	90.7	C15H32
12.5618	1,2-Benzenediol, o-(4-butylbenzoyl)-o'-(2-methylbenzoyl)-	74.5	C25H24O4
12.5664	5,6-Decadien-3-yne, 5,7-diethyl-	71.5	C14H22
12.6317	1-Tetradecene	98.7	C14H28
12.6973	(-)-beta.-Bourbonene	88.8	C15H24
12.7319	Tetradecane	99.0	C14H30
12.8511	Hexasiloxane, tetradecamethyl-	70.6	C14H42O5Si6
12.9033	Pyrolo[3,2-d]pyrimidin-2,4(1H,3H)-dione	88.0	C6H5N3O2
12.9724	1,1,5-Trimethyl-1,2-dihydronaphthalene	74.2	C13H16
13.1611	Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-	92.1	C15H24
13.2210	Hydrazine, (1-methylethyl)-	73.5	C3H10N2
13.2574	6,7-Dimethoxyquinoxaline	72.5	C10H10N2O2
13.2599	1-(4-tert-Butylphenyl)propan-2-one	84.5	C13H18O
13.2599	4-(2,6,6-Trimethylcyclohexa-1,3-dienyl)but-3-en-2-one	81.8	C13H18O
13.2741	D-Alanine, N-(4-butylbenzoyl)-, hexyl ester	81.7	C20H31NO3
13.4124	1,3-Indandione, 2-acetyl-	74.0	C11H8O3
13.4526	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	80.0	C13H22O
13.4754	3,5-Dimethyl-4-nitropyridine n-oxide	72.3	C7H8N2O3
13.5255	3-Ethyl-2,6,10-trimethylundecane	87.1	C16H34
13.5255	2,6,10-Trimethyltridecane	87.3	C16H34
13.6016	1,4,7-Cycloundecatriene, 1,5,9,9-tetramethyl-, Z,Z,Z-	83.6	C15H24
13.6974	Naphthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,8a-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a.alpha.)]-	90.7	C15H24
13.7011	D-Alanine, N-(4-butylbenzoyl)-, heptyl ester	85.1	C21H33NO3
13.8542	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)-	90.2	C15H24

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
13.9361	6-Methyl-6-(5-methylfuran-2-yl)heptan-2-one	72.7	C13H20O2
13.9422	1,2-Benzenediol, o-(4-butylbenzoyl)-o'-(2-methylbenzoyl)-	77.7	C25H24O4
13.9951	Undecane, 3,5-dimethyl-	85.3	C13H28
14.0127	Carbonyl sulfide	94.2	COS
14.0347	Ethanone, 1,1',1''-(1,3,5-benzenetriyl)tris-	76.1	C12H12O3
14.0844	1,5-Dimethyl-2-pyrrolicarbonitrile	80.7	C7H8N2
14.1447	isolekene	87.5	C15H24
14.1560	1,3-Benzenediol, o-(4-butylbenzoyl)-o'-methoxycarbonyl-	79.8	C19H20O5
14.2194	Pentanoic acid, 5-hydroxy-, 2,4-di-t-butylphenyl esters	83.7	C19H30O3
14.2785	5,7-Dimethyl-8-hydroxyquinoline, 2-methylpropionate	79.6	C15H17NO2
14.3270	(+)-epi-Bicyclosesquiphellandrene	81.3	C15H24
14.3956	1,3-Dioxolan-2-one, 3-methyl-3-(4,8-dimethylnona-3,7-dienyl)-4-methylene-	70.5	C16H24O3
14.4386	trans-Calamenene	85.5	C15H22
14.4489	Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	74.5	C15H32
14.5383	Pipecolic acid, N-propargyloxycarbonyl-, propargyl ester	80.0	C13H15NO4
14.5808	2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-, (R)-	93.9	C11H16O2
14.6265	.alpha.-Dehydro-ar-himachalene	75.6	C15H20
14.6951	Cadala-1(10),3,8-triene	87.6	C15H22
14.8415	4-Octene, 2,3,7-trimethyl-, [S-(E)]-	82.9	C11H22
14.8760	Heptasiloxane, hexadecamethyl-	73.0	C16H48O6Si7
14.8817	2H-Pyran-2,6(3H)-dione, dihydro-4,4-dimethyl-	79.1	C7H10O3
14.9394	.alpha.-Calacorene	81.4	C15H20
14.9394	4-Isopropyl-6-methyl-1-methylene-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	77.9	C15H20
14.9802	Acetyl iodide	78.8	C2H3IO
14.9906	Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	79.0	C13H14
15.0989	3-Butanone, 1-(2,3,6-trimethylphenyl)-	73.0	C13H18O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
15.1092	Cetene	97.6	C16H32
15.1909	Hexadecane	85.5	C16H34
15.2023	Pyrolo[3,2-d]pyrimidin-2,4(1H,3H)-dione	74.2	C6H5N3O2
15.2094	Caryophyllene oxide	78.3	C15H24O
15.2276	Phthalic acid, 2-chloropropyl hexyl ester	71.9	C17H23ClO4
15.3286	Trimethylsilylmethanol	74.7	C4H12OSi
15.5017	1,1,4,5,6-Pentamethyl-2,3-dihydro-1H-indene	75.9	C14H20
15.5189	2(5H)-Furanone, 4,5,5-trimethyl-3-(3-methyl-2-methylenebutyl)-	76.6	C13H20O2
15.5804	Succinic acid, 4-cyanophenyl 2-methoxyethyl ester	76.0	C14H15NO5
15.6210	2-Acetyl-6-methoxynaphthalene	78.4	C13H12O2
15.6726	4',6'-Dimethoxy-2',3'-dimethylacetophenone	76.8	C12H16O3
15.7100	Isospathulenol	79.8	C15H24O
15.7115	Benzenecarbothioic acid, S-methyl ester	83.4	C8H8OS
15.7849	1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-methyl-	74.5	C11H8O3
15.8475	.tau.-Cadinol	88.9	C15H26O
15.8983	1,2-Benzenediol, o-(4-butylbenzoyl)-o'-(2-methylbenzoyl)-	75.6	C25H24O4
15.9326	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	81.3	C16H48O8Si8
16.0077	.alpha.-Cadinol	90.0	C15H26O
16.0607	8-Methyl-5H-pyrido[4,3-b]indole	81.9	C12H10N2
16.0936	2-t-Butyl-1-methyl-3-phenylimidazolidin-4-one	73.7	C14H20N2O
16.1366	2H-1-Benzopyran-2-one, 3,7-dimethoxy-	71.5	C11H10O4
16.1954	n-Hexyl salicylate	86.5	C13H18O3
16.2075	Thiophene-3-carbonitrile, 5-acetyl-4-amino-2-methylthio-	70.6	C8H8N2OS2
16.2469	Naphthalene, 1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	80.5	C15H18
16.3244	Heptadecane	78.9	C17H36
16.3361	2-Propanamine	86.0	C3H9N

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
16.3962	(1R,7S,E)-7-Isopropyl-4,10-dimethylenecyclodec-5-enol	71.6	C15H24O
16.6993	Sebacic acid, ethyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	73.5	C27H36O4
16.7466	Methanol, [4-(1,1-dimethylethyl)phenoxy]-, acetate	70.8	C13H18O3
16.7810	Sebacic acid, nonyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	74.4	C34H50O4
16.9780	6-Acetamido-2-methylbenzothiazole	72.7	C10H10N2OS
17.0222	D-Alanine, N-(4-anisoyl)-, decyl ester	77.1	C21H33NO4
17.0846	Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	77.6	C9H18
17.0848	Cyclopentane, 1,1,3,4-tetramethyl-, trans-	77.9	C9H18
17.1003	Benzothiazole, 2-(m-tolyl)-	78.8	C14H11NS
17.1290	Methanone, (4-methylphenyl)phenyl-	88.4	C14H12O
17.1385	Methanamine, N-methoxy-N-nitroso-	93.6	C2H6N2O2
17.1793	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	80.9	C15H22O2
17.2452	1,4-Naphthalenedione, 2,3,6-trimethyl-	84.4	C13H12O2
17.3116	D-Alanine, N-(4-anisoyl)-, undecyl ester	75.5	C22H35NO4
17.3274	2-Trifluoromethylbenzoic acid, 2-formyl-4,6-dichlorophenyl ester	78.9	C15H7Cl2F3O3
17.3313	1-Octadecanol	97.1	C18H38O
17.4004	Dodecane, 1-iodo-	80.1	C12H25I
17.4602	9H-Fluorene, 9-methylene-	88.8	C14H10
17.5820	Salicylic acid, tert-butyl ester	76.2	C11H14O3
17.6299	1-Naphthalenol, 5,6,7,8-tetrahydro-2,5-dimethyl-8-(1-methylethyl)-	92.5	C15H22O
17.6618	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	81.4	C18H54O9Si9
17.7217	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyacetophenone	86.3	C16H24O2
17.7444	1H-Benzimidazole, 5,6-dimethyl-	70.4	C9H10N2
17.7633	4H-1-Benzopyran-4-one, 7-hydroxy-2,5-dimethyl-	75.4	C11H10O3
17.8236	Diglycolic acid, di(pentafluorobenzyl) ester	75.5	C18H8F10O5
17.8298	2-Hexadecen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, [R-[R*(R*(E))]]-	96.6	C22H42O2

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
17.8970	2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	94.0	C18H36O
17.9144	L-Alanine, N-(2-trifluoromethylbenzoyl)-, methyl ester	71.7	C12H12F3NO3
18.0807	2-Hexadecen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, [R-[R*,R*-(E)]]-	96.0	C22H42O2
18.1286	Cyclopenta[g]-2-benzopyran, 1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethyl-	79.8	C18H26O
18.1537	Naphthalene, 2-(phenylmethyl)-	84.3	C17H14
18.1914	Phthalic acid, butyl 2-pentyl ester	92.2	C17H24O4
18.2699	2-Hexadecen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, [R-[R*,R*-(E)]]-	95.8	C22H42O2
18.3109	4-Benzyloxybenzoic acid	87.8	C14H12O3
18.4723	2-Propanamine	88.9	C3H9N
18.5964	Benzene, (1-methyldodecyl)-	77.3	C19H32
18.6661	1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl cyclohexyl ester	83.0	C18H24O4
18.6775	1-Hexadecyn-3-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-	87.0	C20H38O
18.6964	Hexadecanoic acid, methyl ester	77.1	C17H34O2
18.9294	1-Hexadecen-3-ol, 3,5,11,15-tetramethyl-	79.7	C20H40O
19.1321	Dibutyl phthalate	98.1	C16H22O4
19.1998	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	73.7	C24H72O12Si12
19.2911	L-Leucine, n-propargyloxycarbonyl-, octyl ester	78.1	C18H31NO4
19.3494	1-Octadecanol	95.6	C18H38O
19.3864	Naphthalene, 2-phenyl-	85.5	C16H12
19.4072	Octadecane	76.9	C18H38
19.4615	2,6,10,14-Hexadecatetraen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, (E,E,E)-	86.3	C22H36O2
19.4615	(2E,6E,10E)-3,7,11,15-Tetramethylhexadeca-2,6,10,14-tetraen-1-yl formate	86.5	C21H34O2
19.6480	Propane, 1-(ethenylthio)-	75.2	C5H10S
19.7336	Benzaldehyde, 2-hydroxy-3,6-dimethyl-4-(phenylmethoxy)-	76.6	C16H16O3
19.9110	Oxybenzone	80.9	C14H12O3
20.0236	Verimol K	87.7	C14H12O4

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
20.1752	(2E,6E,10E)-3,7,11,15-Tetramethylhexadeca-2,6,10,14-tetraen-1-yl formate	76.3	C21H34O2
20.1752	Squalene	78.1	C30H50
20.2521	Silicon tetrafluoride	78.9	F4Si
20.2985	Pyrene	92.5	C16H10
20.3444	Heneicosane	87.5	C21H44
20.4398	Diallyl isophthalate	77.6	C14H14O4
20.5292	Phytol	98.4	C20H40O
20.5573	2-Benzyloxy-4,5-methylenedioxybenzyl alcohol	71.4	C15H14O4
20.5743	Methanone, (2,3-dihydro-5-benzofuryl)(4-morpholyl)-	73.3	C13H15NO3
20.6038	1,2-Propanediol, 1-acetate	70.8	C5H10O3
20.7850	1-Hexadecyn-3-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-	81.8	C20H38O
20.8080	Pyrene	88.0	C16H10
20.8585	1-Hexadecen-3-ol, 3,5,11,15-tetramethyl-	74.5	C20H40O
20.8592	2-Hexadecen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, [R-[R*,R*-(E)]]-	93.5	C22H42O2
21.0151	Benzo(b)naphtho(1,2-d)furan	78.9	C16H10O
21.0151	Benzimidazo[2,1-a]isoquinoline	72.1	C15H10N2
21.1658	Ethanol, 2-ethoxy-	81.2	C4H10O2
21.1938	Hexadecanedinitrile	75.1	C16H28N2
21.2429	Docosane	96.7	C22H46
21.2949	1-Tripropylsilyloxynonane	74.9	C18H40OSi
21.4312	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	96.4	C22H42O2
21.7179	Phthalic acid, di(3-methylphenyl) ester	71.4	C22H18O4
21.8582	Cinnamyl cinnamate	77.5	C18H16O2
21.8944	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	75.4	C24H72O12Si12
22.0038	N,N-Dimethyl-2-isopropoxyethylamine	72.0	C7H17NO
22.1034	Hexane, 3,3-dimethyl-	90.8	C8H18

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
22.1190	11H-Benzo[b]fluorene	75.1	C17H12
22.6340	4,8,12,16-Tetramethylheptadecan-4-olide	96.0	C21H40O2
22.8993	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	97.1	C22H42O2
23.1975	Cinnamyl cinnamate	97.9	C18H16O2
23.2267	1-Ethyl-1-nonyloxy-1-silacylopentane	81.2	C15H32OSi
23.5505	2,6,10,14-Hexadecatetraen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, (E,E,E)-	86.3	C22H36O2
23.7268	Pentacosane	97.9	C25H52
23.9651	Squalene	83.1	C30H50
23.9652	Supraene	83.3	C30H50
24.1701	Phthalic acid, di(2-propylpentyl) ester	98.3	C24H38O4
24.2821	1-(2-Benzyloxy-1-phenylethyl)-3,4-piperidinediol	72.5	C20H25NO3
24.3792	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	94.2	C22H42O2
24.4914	Octacosane	94.3	C28H58
25.2326	Pentacosane	96.4	C25H52
25.3646	Methylamine, N,N-dimethyl-	71.9	C3H9N
25.6313	1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	85.8	C24H38O4
25.7774	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	92.9	C22H42O2
25.8270	1(4H)-naphthalenone, 4-[[4-(diphenylamino)phenyl]imino]-	74.3	C28H20N2O
25.8842	Nonanamide	77.3	C9H19NO
25.9455	Octacosane	97.1	C28H58
26.2040	Squalene	97.5	C30H50
26.3645	2,6,10,14-Hexadecatetraen-1-ol, 3,7,11,15-tetramethyl-, acetate, (E,E,E)-	88.7	C22H36O2
26.4501	.alpha.-Tocospiro A	92.3	C29H50O4
26.6029	.alpha.-Tocospiro A	75.3	C29H50O4
26.6765	Heneicosane	97.1	C21H44
26.6768	Nonacosane	98.2	C29H60

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
26.7901	Methylamine, N,N-dimethyl-	82.0	C3H9N
27.0987	.delta.-Tocopherol	71.4	C27H46O2
27.1020	Phytol decanoate	94.7	C30H58O2
27.2931	.beta.-Sitosterol acetate	76.9	C31H52O2
27.3026	Triacontane	94.4	C30H62
27.3503	Benzenecarbothioic acid, 2,4,6-triethyl-, S-(2-phenylethyl) ester	71.0	C21H26OS
27.6077	Campesterol, propionate	80.2	C31H52O2
27.6523	Silane, dimethyl(2-naphthoxy)heptadecyloxy-	74.2	C29H48O2Si
27.7028	.beta.-Tocopherol	89.8	C28H48O2
27.8010	.gamma.-Tocopherol	93.6	C28H48O2
27.8382	2-Amino-4-(2-cyclohexyl-ethyl)-7-methyl-5-oxo-4H,5H-pyrano[4,3-b]pyran-3-carbonitrile	78.6	C18H22N2O3
27.8560	Stigmastanol, 2-ethylbutyrate	74.9	C35H62O2
27.9217	3',5'-Di(trimethylsilyloxy)flavone	72.2	C21H26O4Si2
27.9613	Stigmasta-3,5-diene	80.7	C29H48
27.9834	Tetratriacontane	96.1	C34H70
28.0380	Anthracene, 9,10-dihydro-9-(1-methylpropyl)-	83.5	C18H20
28.0560	Stigmastan-3,5,22-trien	70.7	C29H46
28.1144	Formamide, N-formyl-N-methyl-	80.7	C3H5NO2
28.1976	.beta.-Sitosterol acetate	96.0	C31H52O2
28.2227	l-Alanine, n-pentadecafluorooctanoyl-, hexyl ester	74.5	C17H18F15NO3
28.2227	l-Alanine, n-pentadecafluorooctanoyl-, butyl ester	72.2	C15H14F15NO3
28.3445	Vitamin E	94.5	C29H50O2
28.3652	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	89.5	C22H42O2
28.3874	1-Trisopropylsilyloxynonane	71.2	C18H40OSi
28.5428	Glycine, methyl ester	83.2	C3H7NO2
28.5698	Tetratriacontane	96.1	C34H70

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
28.6660	(+/-)-.alpha.-Tocopherol acetate	75.7	C31H52O3
29.0893	9,10-anthracenedione, 1-amino-4-[(9,10-dihydro-9,10-dioxo-1-anthracenyl)amino]-	70.6	C28H16N2O4
29.1908	Tetratriacontane	96.8	C34H70
29.3632	Formamide, N-formyl-N-methyl-	74.4	C3H5NO2
29.5921	Phytyl tetradecanoate	93.9	C34H66O2
29.6472	Phytonadione	72.7	C31H46O2
29.6518	Silane, diethylhexadecyloxy(4-methoxyphenoxy)-	70.9	C27H50O3Si
29.6757	.gamma.-Sitosterol	86.4	C29H50O
30.0815	.beta.-Sitosterol, propionate	83.3	C32H54O2
30.1250	Silane, dimethyl(2-naphthoxy)heptadecyloxy-	75.1	C29H48O2Si
30.2870	1,4-benzenediol, 2-dodecyl-	75.8	C18H30O2
30.2989	1,2-Benzenedicarboxylic acid, diphenyl ester	74.9	C20H14O4
30.3747	dl.-alpha.-Tocopherol	82.8	C29H50O2
30.3747	.alpha.-Tocopherol. beta.-D-mannoside	81.7	C35H60O7
30.5664	Triacontane	74.8	C30H62
30.7048	9,19-Cyclolanostan-3-ol, 24-methylene-, (3.beta.)-	76.5	C31H52O
31.0797	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	93.3	C22H42O2
31.2728	Isoquinoline, 1-butyl-3,4-dihydro-	70.2	C13H17N
31.3844	Ethane, 1,1,1-trimethoxy-	71.3	C5H12O3
31.5203	Silane, dimethyl(2-naphthoxy)octadecyloxy-	79.4	C30H50O2Si
32.5435	Chrysophanol, 2TMS derivative	86.8	C21H26O4Si2

Ramas:

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
5.1163	Acetaldehyde semicarbazone	70.8	C3H7N3O
5.1387	4-Octen-3-one	77.8	C8H14O
5.2687	Ethanamine, N-chloro-N,1,1-trifluoro-	74.0	C2H3ClF3N
5.2859	p-Xylene	92.8	C8H10
5.3218	Propanal, butylhydrazone	84.4	C7H16N2
5.4783	2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-isopropyl-	75.3	C8H16N2
5.5393	1-Ethyl-3-methylcyclohexane (c,t)	74.4	C9H18
5.5416	Uracil, 1-methyl-	82.8	C5H6N2O2
5.7158	di-n-Propylaminoacetonitrile	78.8	C8H16N2
5.7177	2-Pyrazoline, 4-ethyl-1-isopropyl-	72.9	C8H16N2
5.8216	Propennitrile, 3-ethoxy-2-(2-thienylmethylsulfonyl)-	72.4	C10H11NO3S2
5.9994	2-Thiophenecarboxylic acid, 4-nitrophenyl ester	76.6	C11H7NO4S
6.1599	2-Pyrazoline, 1-isopropyl-3,4-dimethyl-	84.1	C8H16N2
6.2471	Cyclohexanecarboxaldehyde	79.0	C7H12O
6.2500	Cyclobutaneacetonitrile, 1-methyl-2-(1-methylethenyl)-	75.7	C10H15N
6.3230	2-(Butyliden-2-one)tetrahydrofuran	82.8	C8H12O2
6.5245	Dimethylphosphinic fluoride	74.0	C2H6FOP
6.5771	Cytosine	79.8	C4H5N3O
6.5784	1-[1,2,4]Triazol-1-ylethanone	79.0	C4H5N3O
6.6729	Butanoic acid	82.9	C4H8O2
6.7014	Cyclohexane, 1-methyl-3-propyl-	80.9	C10H20
6.7460	Decane	89.0	C10H22
6.7630	Fomepizole	74.1	C4H6N2
6.7849	Furan, 2-pentyl-	78.0	C9H14O
6.8341	Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	85.5	C8H24O4Si4
6.9054	Decane	94.9	C10H22

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
7.0984	Acetonitrile,2-(methylimino)	71.8	C3H4N2
7.1007	5-Diazouracil	70.5	C4H2N4O2
7.1302	Heptane, 3-ethyl-5-methyl-	83.3	C10H22
7.2034	1,3,5-Triazine, 2,4,6-trimethyl-	77.1	C6H9N3
7.2361	Cyclopentene, 1,3-dimethyl-2-(1-methylethyl)-	74.4	C10H18
7.2648	Nonane, 2,6-dimethyl-	83.5	C11H24
7.2747	1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-3,5,5-trimethyl-	78.9	C6H12N2
7.3115	Cyclohexane, butyl-	70.3	C10H20
7.4503	Cyclohexane, butyl-	86.9	C10H20
7.4748	6-Isopropyl-2,3-dihydropyran-2,4-dione	75.0	C8H10O3
7.5217	Nonane, 3,7-dimethyl-	84.0	C11H24
7.5714	p-Cresol	75.5	C7H8O
7.5967	Dimethylphosphinic fluoride	88.9	C2H6FOP
7.5981	3-Cyclohexen-1-one, 2,5,5-trimethyl-	78.9	C9H14O
7.6449	Ethanone, 1-(2-furanyl)-	74.4	C6H6O2
7.6746	Diphosphorous tetrafluoride	82.8	F4OP2
7.7618	Hydrazine, 1,1-di-2-propenyl-	76.6	C6H12N2
7.8184	Propanoic acid, anhydride	93.2	C6H10O3
7.8419	Cyclopropanebutanoic acid, 2,4-dioxo-, methyl ester	74.7	C8H10O4
7.8491	Naphthalene, decahydro-	91.6	C10H18
7.9199	Decane, 2-methyl-	92.0	C11H24
7.9237	Undecane, 6-ethyl-	83.5	C13H28
7.9386	Cyclohexane, 2,4-diethyl-1-methyl-	79.6	C11H22
8.0169	Decane, 3-methyl-	85.7	C11H24
8.0191	Clindamycin	74.7	C18H33ClN2O5S
8.0567	Oxazole, 4-ethyl-2,5-dimethyl-	72.4	C7H11NO

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
8.0637	1-Butanone, 1-(2-thienyl)-	72.7	C8H10OS
8.1323	Benzofuran	70.2	C8H6O
8.1478	Dimethylphosphinic fluoride	71.1	C2H6FOP
8.1530	Bicyclo[3.1.1]heptan-3-one, 6,6-dimethyl-2-(2-methylpropyl)-	75.5	C13H22O
8.1768	2-Cyclohexen-3-ol-1-one, 2-[1-iminoethyl]-	74.1	C8H11NO2
8.2628	Cyclohexanone, 3-butyl-	83.5	C10H18O
8.2789	1H-Pyrazole, 4,5-dihydro-5-propyl-	86.0	C6H12N2
8.3291	Cyclopentane, 1-acetyl-1,2-epoxy-	72.9	C7H10O2
8.3538	Cyclopropanebutanoic acid, 2,4-dioxo-, methyl ester	75.1	C8H10O4
8.3811	cis,cis- and cis,trans-1,9-dimethylspiro[4.5]decane	82.1	C12H22
8.4652	Ethanone, 1-(2-methylcyclopropyl)-	86.6	C6H10O
8.4704	Undecane	97.0	C11H24
8.4969	2-Butyl-4,5-dimethylloxazole	72.1	C9H15NO
8.5567	Cyclohexene, 1-butyl-	77.7	C10H18
8.5581	Naphthalene, decahydro-, cis-	76.1	C10H18
8.7189	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	92.4	C11H20
8.7203	Ethanone, 1-(2,4-dihydroxyphenyl)-	70.4	C8H8O3
8.7297	Pentane, 2,2,4-trimethyl-	95.1	C8H18
8.7308	Decane, 6-ethyl-2-methyl-	82.4	C13H28
8.7385	Creatine	79.5	C4H9N3O2
8.7967	Phthalic acid, hexyl 2-propylphenyl ester	74.0	C23H28O4
8.8281	Undecane, 4,8-dimethyl-	78.0	C13H28
8.8906	Decane, 3,7-dimethyl-	90.4	C12H26
8.9030	acetamide, N-(3,5-dihydroxyphenyl)-	70.1	C8H9NO3
8.9741	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	90.5	C11H20
8.9835	Heptane, 2,2,3,3,5,6,6-heptamethyl-	78.5	C14H30

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
9.0314	N-Cyclopropanecarbonylcyclopropanecarbohydrazide	82.6	C8H12N2O2
9.0432	Cyclohexane, pentyl-	87.5	C11H22
9.0971	1-Eicosanol	79.1	C20H42O
9.0971	trans-2-methyl-4-n-pentylthiane, S,S-dioxide	80.0	C11H22O2S
9.1033	2-Hexynyl aldehyde diethyl acetal	72.0	C10H18O2
9.1053	Naphtho[2,1-b]furan	81.2	C12H8O
9.2482	N-Cyclopropanecarbonylcyclopropanecarbohydrazide	81.5	C8H12N2O2
9.2514	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	72.9	C10H30O5Si5
9.2970	Furazan, dimethyl-	84.6	C4H6N2O
9.3095	1-Azabicyclo[3.1.0]hexane	74.1	C5H9N
9.3117	3-Cyclobutene-1,2-dione	80.2	C4H2O2
9.3142	Naphthalene, decahydro-2-methyl-	77.5	C11H20
9.3207	Ethanone, 1-(2,3,4-trihydroxyphenyl)-	73.8	C8H8O4
9.3742	Undecane, 4-methyl-	88.9	C12H26
9.4037	4-Allyl-1,6-heptadiene-4-ol	77.7	C10H16O
9.4375	Undecane, 2-methyl-	86.7	C12H26
9.5238	DL-Norleucine, N-propargyloxycarbonyl-, hexyl ester	75.7	C16H27NO4
9.5380	Undecane, 3-methyl-	95.2	C12H26
9.5603	Naphthalene, decahydro-1,5-dimethyl-	78.7	C12H22
9.5619	Naphthalene, decahydro-2,6-dimethyl-	84.5	C12H22
9.6743	Spiro[5.5]undecane	78.6	C11H20
9.7492	2-Vinyl-4,6-diamino-S-triazine	79.5	C5H7N5
9.7746	Borane, diethyl(decyloxy)-	77.6	C14H31BO
9.8111	Sulfurous acid, di(cyclohexylmethyl) ester	71.5	C14H26O3S
9.8540	1-Undecene, 8-methyl-	91.1	C12H24
9.8563	4-Hexen-3-one, 4-methyl-	77.2	C7H12O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
9.9157	Pentalene, octahydro-	73.2	C8H14
9.9179	L-Valine, N-(2-furoyl)-, undecyl ester	79.3	C21H35NO4
9.9749	Dodecane	98.2	C12H26
9.9790	Naphtho[2,1-b]furan	75.3	C12H8O
10.0298	1,2-Diethoxybenzene	74.2	C10H14O2
10.1269	Octa-3,5-diene-2,7-dione, 4,5-dihydroxy-	74.0	C8H10O4
10.1748	Undecane, 2,6-dimethyl-	93.3	C13H28
10.2061	Silane, trimethyl(2-methylphenyl)-	71.8	C10H16Si
10.2526	Methyl methylphosphonofluoridate	74.8	C2H6FO2P
10.2906	Undecane, 3,7-dimethyl-	86.5	C13H28
10.3601	photocitral A	70.4	C10H16O
10.3601	cis,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	85.5	C12H22
10.3615	Furan-2-carboxamide, N-(2-butyl)-N-ethyl-	74.9	C11H17NO2
10.3630	L-Valine, N-(2-furoyl)-, undecyl ester	76.1	C21H35NO4
10.3690	Cyclohexane, 2-butyl-1,1,3-trimethyl-	86.7	C13H26
10.3858	Nonane, 1-iodo-	79.7	C9H19I
10.4486	cis,trans-3-Ethylbicyclo[4.4.0]decane	90.4	C12H22
10.4494	Phenol, 2-methoxy-4-propyl-	75.5	C10H14O2
10.4662	Dodecane, 3-methyl-	81.7	C13H28
10.5522	m-Cresol, TMS derivative	72.9	C10H16OSi
10.5673	1-Iodoundecane	79.1	C11H23I
10.5800	Cyclohexane, hexyl-	81.6	C12H24
10.5817	DL-Norleucine, N-propargyloxycarbonyl-, isoheptyl ester	73.7	C16H27NO4
10.6127	1H-Pyrrolo[1,2-c]imidazole-1,3(2H)-dione, tetrahydro-	80.1	C6H8N2O2
10.6532	Benzamphetamine	71.0	C17H21N
10.6882	2-n-Heptylfuran	72.2	C11H18O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
10.7243	Butane, 2-azido-2,3,3-trimethyl-	75.0	C7H15N3
10.7248	2-Hexene, 5,5-dimethyl-, (Z)-	77.6	C8H16
10.7294	1,2,4,5-Tetrazin-3-amine	72.8	C2H3N5
10.7700	4',6'-Dihydroxy-2',3'-dimethylacetophenone	74.7	C10H12O3
10.8098	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	71.4	C14H22
10.8207	Dodecane, 4-methyl-	92.9	C13H28
10.8207	Decane, 2,3,7-trimethyl-	90.6	C13H28
10.8859	1,3-Dimethyl diazolidine	84.8	C3H8N2
10.8861	Undecane, 3-methyl-	81.8	C12H26
10.9059	Cyclohexane, 1,2-diethyl-3-methyl-	72.0	C11H22
11.0113	Tridecane, 7-methyl-	85.4	C14H30
11.0321	1H-1,3,2-Benzodiazaborole, 2-ethyl-2,3-dihydro-	81.5	C8H11BN2
11.0641	Acetic anhydride	72.2	C4H6O3
11.1041	Octane, 1-iodo-	78.8	C8H17I
11.1041	Sulfurous acid, 2-ethylhexyl isobutyl ester	76.8	C12H26O3S
11.1333	5-Trimethylsilylpent-2-en-4-yne	70.9	C8H14Si
11.1460	4-Pentenoic acid, 2,2-diethyl-3-oxo-5-phenyl-, ethyl ester	85.5	C17H22O3
11.2706	2-Hydroxy-iso-butyrophenone	76.4	C10H12O2
11.2744	5-Cyano-1,2,3-thiadiazole	75.1	C3HN3S
11.2888	1,2,4,5-Tetrazin-3-amine	78.0	C2H3N5
11.3718	1-Propanone, 1-(4-fluorophenyl)-	75.6	C9H9FO
11.3942	Tridecane	97.7	C13H28
11.4242	Ethanone, 1-(2-hydroxy-5-methylphenyl)-	77.2	C9H10O2
11.5495	Undecane, 6,6-dimethyl-	78.3	C13H28
11.5673	1,1'-Bicyclohexyl	86.5	C12H22
11.6403	3,5-Dimethyldodecane	89.9	C14H30

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
11.6971	2,4-Decadienal	70.6	C10H16O
11.6973	2,4-Decadienal, (E,E)-	87.6	C10H16O
11.7053	4-Acetoxy-3-methoxystyrene	76.5	C11H12O3
11.7151	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	84.4	C12H36O6Si6
11.9348	1-Propene, 3-iodo-	70.4	C3H5I
12.0272	(Z)-(Z)-Hex-3-en-1-yl 2-methylbut-2-enoate	82.4	C11H18O2
12.0356	2-p-Tolylpyridine	75.6	C12H11N
12.0472	2(1H)-Pyridinone, 6-hydroxy-	72.5	C5H5NO2
12.0613	Glycerol 1,2-diacetate	82.0	C7H12O5
12.0782	Tridecane, 6-methyl-	72.7	C14H30
12.0816	Thiophene, 2-propyl-	74.7	C7H10S
12.1186	Undecane, 4,4-dimethyl-	86.5	C13H28
12.1257	(S)-(+)-1-Cyclohexylethylamine, N-methyl-, N-trifluoroacetyl-	74.4	C11H18F3NO
12.1859	Tridecane, 4-methyl-	87.6	C14H30
12.2518	Tridecane, 2-methyl-	87.4	C14H30
12.2716	Cyclohexane, 1-bromo-4-methyl-	73.5	C7H13Br
12.2829	Eugenol	92.9	C10H12O2
12.3472	Tridecane, 3-methyl-	90.5	C14H30
12.3535	1-Hexen-3-one	83.1	C6H10O
12.4260	Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	92.7	C15H32
12.4797	Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentyl ester	81.0	C12H24O3
12.6324	1-Tetradecene	99.0	C14H28
12.7320	Tetradecane	98.2	C14H30
12.8047	L-Proline, N-(octanoyl)-, heptyl ester	72.2	C20H37NO3
12.8304	Hexasiloxane, tetradecamethyl-	70.2	C14H42O5Si6
12.8504	Hexasiloxane, tetradecamethyl-	86.5	C14H42O5Si6

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
12.9106	Vanillin	93.0	C8H8O3
12.9820	3,5-Dimethyl-1-dimethylphenylsilyloxybenzene	83.7	C16H20OSi
13.1612	(-)-delta-Panasinsine	79.2	C15H24
13.3928	2-Butyl-1,2-azaborolidine	74.2	C7H16BN
13.4035	Oxaziridine, 2-methyl-3-propyl-	80.5	C5H11NO
13.4781	2-p-Tolylpyridine	70.3	C12H11N
13.5064	Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)-, acetate	72.8	C12H14O3
13.5262	3-Ethyl-2,6,10-trimethylundecane	87.7	C16H34
13.8540	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)-	84.4	C15H24
13.9393	3-Isopropoxy-1,1,1,7,7,7-hexamethyl-3,5,5-tris(trimethylsiloxy)tetrasiloxane	71.7	C18H52O7Si7
13.9960	Decane, 6-ethyl-2-methyl-	92.8	C13H28
14.0195	Ethanone, 1-(2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-	75.9	C9H10O3
14.1441	(+)-epi-Bicyclosesquipellandrene	71.7	C15H24
14.1546	Pentyl N,N-dipropylphosphoramidocyanidate	71.1	C12H25N2O2P
14.2190	2,4-Di-tert-butylphenol	90.3	C14H22O
14.2468	2,4,6-Tris(1,1-dimethylethyl)-4-methylcyclohexa-2,5-dien-1-one	70.1	C19H32O
14.3266	Octane, 3,3-dimethyl-	71.2	C10H22
14.3310	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)-	75.4	C15H24
14.4278	2-Phenylethyl allyl ether	70.2	C11H14O
14.4383	trans-Calamenene	86.1	C15H22
14.4484	Undecane, 5,5-dimethyl-	72.4	C13H28
14.5313	Guaiaol, 4-butyl-	79.7	C11H16O2
14.5879	2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-, (R)-	85.9	C11H16O2
14.6592	2-Oxetanone, 3,3-dimethyl-	81.4	C5H8O2
14.6963	.alpha.-Calacorene	84.5	C15H20
14.7415	Guaiol	76.8	C15H26O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
14.7790	3,5-Dimethyl-1-dimethylphenylsilyloxybenzene	83.2	C16H20OSi
14.7910	2-Propanone, ethylhydrazone	73.1	C5H12N2
14.7910	Succinic anhydride	76.2	C4H4O3
14.8422	Cyclooctane, methyl-	83.6	C9H18
14.8713	Heptasiloxane, hexadecamethyl-	70.8	C16H48O6Si7
14.8818	Cyclobutanone, 3,3-dimethyl-	83.0	C6H10O
14.9394	3,8-Dimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-gamma-carboline	78.0	C13H16N2
14.9870	Acetyl iodide	77.9	C2H3IO
15.1089	Cetene	98.6	C16H32
15.1907	Hexadecane	94.7	C16H34
15.2101	2-Adamantanol, 2-(bromomethyl)-	73.2	C11H17BrO
15.2323	Phthalic acid, 4-bromophenyl ethyl ester	79.8	C16H13BrO4
15.4321	Phenol, 3,4,5-trimethoxy-	84.1	C9H12O4
15.6216	2-Acetyl-6-methoxynaphthalene	78.1	C13H12O2
15.6323	Ethanone, 1,1'-(6-methoxy-2,5-benzofurandiylo)bis-	78.2	C13H12O4
15.7157	Benzophenone	93.6	C13H10O
15.8457	.tau.-Cadinol	85.1	C15H26O
15.8964	1,2-Benzenediol, o-(4-butylbenzoyl)-o'-(2-methylbenzoyl)-	72.4	C25H24O4
15.9298	Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl-	88.0	C16H48O8Si8
15.9920	Acetamide	74.2	C2H5NO
16.0068	.alpha.-Cadinol	84.0	C15H26O
16.0576	5-Methylpyrimido[3,4-a]indole	74.7	C12H10N2
16.0576	Benzaldehyde, 4-hydroxy-3,5-dimethoxy-	78.2	C9H10O4
16.0617	Propane, 2-iodo-	87.3	C3H7I
16.1968	n-Hexyl salicylate	87.4	C13H18O3
16.2077	Sebacic acid, nonyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	73.8	C34H50O4

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
16.2563	Anthracene, 1,2,3,4-tetrahydro-9,10-dimethyl-	76.9	C16H18
16.2565	1,1'-Biphenyl, 2,2',5,5'-tetramethyl-	79.9	C16H18
16.2713	Sebacic acid, nonyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	70.2	C34H50O4
16.2996	2-Iodo-1,3-dihydroxybenzene	71.2	C6H5IO2
16.3242	Tridecane	89.5	C13H28
16.3374	2-Propanamine	83.7	C3H9N
16.3858	3-Ethyl-3-methylheptane	76.2	C10H22
16.4742	3-Acetyl-2,5,6-trimethylhydroquinone	72.7	C11H14O3
16.4742	(p-Decanoylphenoxy)acetic acid	77.1	C18H26O4
16.5809	1,1'-Biphenyl, 2,2',5,5'-tetramethyl-	72.0	C16H18
16.6831	Heptasiloxane, hexadecamethyl-	72.6	C16H48O6Si7
16.7294	Phthalic acid, propyl 2-propylphenyl ester	73.1	C20H22O4
16.7386	1,4-Benzenediol, 2,5-bis(1,1-dimethylethyl)-	74.0	C14H22O2
16.7811	Sebacic acid, nonyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	78.2	C34H50O4
16.7811	Sebacic acid, ethyl 4-(2-phenylpropyl-2)-phenyl ester	76.7	C27H36O4
16.9162	Cyclobutanone, 2,3,3-trimethyl-	81.5	C7H12O
17.0244	1,2-Benzenediol, o-(4-methoxybenzoyl)-o'-(2,2,3,3,4,4,4-heptafluorobutyl)-	86.7	C18H11F7O5
17.0247	p-Anisic acid, 3,4-dichlorophenyl ester	70.1	C14H10Cl2O3
17.0600	Benzene, 1,1'-(1,2-cyclobutanediyl)bis-, cis-	81.9	C16H16
17.0843	Cyclopentane, hexyl-	82.7	C11H22
17.0988	Cyprodinil	70.3	C14H15N3
17.1256	Cyclobutanone, 3,3-dimethyl-	82.2	C6H10O
17.1323	Methanone, (3-methylphenyl)phenyl-	89.0	C14H12O
17.1326	Methanone, (4-methylphenyl)phenyl-	87.8	C14H12O
17.1341	4,5-Dimethoxy-2-hydroxyacetophenone	74.0	C10H12O4
17.1403	Diethyl carbitol	73.3	C8H18O3

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
17.1810	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde	81.3	C15H22O2
17.2405	Desaspidinol	72.4	C11H14O4
17.3312	1-Octadecanol	96.3	C18H38O
17.3999	Octadecane	85.4	C18H38
17.4314	Glycine, N-ethyl-N-(2-methoxyethoxycarbonyl)-, 2-methoxyethyl ester	74.2	C11H21NO6
17.4682	3-Benzofurancarboxylic acid, 2,3-dihydro-, methyl ester	75.7	C10H10O3
17.5007	Hexadecane, 2-methyl-	79.8	C17H36
17.5827	Salicylic acid, tert-butyl ester	86.2	C11H14O3
17.6076	1H-Imidazole, 1,4-dimethyl-	71.0	C5H8N2
17.6297	1-Naphthalenol, 5,6,7,8-tetrahydro-2,5-dimethyl-8-(1-methylethyl)-	72.8	C15H22O
17.6580	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	84.9	C18H54O9Si9
17.7222	3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxyacetophenone	81.2	C16H24O2
17.7360	Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyanophenyl ester	80.3	C21H23NO2
17.8227	Neophytadiene	91.6	C20H38
18.0591	2-(p-Fluorophenyl)-1-methylbenzimidazole	72.4	C14H11FN2
18.0793	6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, acetate	79.5	C12H22O2
18.0809	4-Methoxyphenyl undecyl ether	72.9	C18H30O2
18.1431	N-(Benzo[1,3]dioxol-5-ylmethylene)-p-tolyl-amine	74.1	C15H13NO2
18.1890	Phthalic acid, butyl 2-pentyl ester	92.2	C17H24O4
18.2395	Tonalid	78.9	C18H26O
18.2654	Cyclopentane, 1,1'-(1,4-butandiyyl)bis-	81.7	C14H26
18.2655	7-Octadecyne, 2-methyl-	85.0	C19H36
18.2873	4-Methylsculetin	70.7	C10H8O4
18.4256	Undecane, 4,7-dimethyl-	85.1	C13H28
18.4256	Nonadecane	84.3	C19H40
18.4584	3,3,5-Trimethylcyclohexyl 2-acetoxybenzoate	71.2	C18H24O4

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
18.4723	2-Propanamine	71.6	C3H9N
18.6615	Phthalic acid, 6-ethyl-3-octyl butyl ester	82.5	C22H34O4
18.6950	Hexadecanoic acid, methyl ester	84.2	C17H34O2
18.7778	Benzoic acid, 3-methyl-, 2-oxo-2-phenylethyl ester	81.7	C16H14O3
18.7779	Benzene, 1,1'-(1,1,2,2-tetramethyl-1,2-ethanediyloxy)bis-	74.7	C18H22
18.8630	N,N-Diethyl-2,3,4,5,6-pentafluorobenzylamine	70.4	C11H12F5N
18.9046	Diphenyl sulfone	77.3	C12H10O2S
18.9341	Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	78.7	C18H28O3
18.9656	2-Propyn-1-ol, acetate	87.7	C5H6O2
19.1299	Dibutyl phthalate	96.8	C16H22O4
19.1591	Oxazole, 4,5-dihydro-2,4,4-trimethyl-	72.9	C6H11NO
19.1964	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-	73.4	C18H54O9Si9
19.2422	Ethanol, 2-ethoxy-	79.8	C4H10O2
19.2677	Isophthalic acid, di(2-fluorophenyl) ester	80.9	C20H12F2O4
19.3478	1-Nonadecene	97.9	C19H38
19.3478	Behenic alcohol	97.6	C22H46O
19.4063	Eicosane	92.0	C20H42
19.4379	3,5-Dimethoxy-4-hydroxycinnamaldehyde	90.3	C11H12O4
19.5068	Phthalic acid, di(3-methylphenyl) ester	84.8	C22H18O4
19.7049	1-Cyclohexene-1-carboxylic acid, 4-(1,5-dimethyl-3-oxohexyl)-, methyl ester, [R-(R*),R*]-	79.3	C16H26O3
19.7427	(Bis-butoxycarbonylmethyl-amino)-acetic acid, butyl ester	70.5	C18H33NO6
19.8950	Palmitic Acid, TMS derivative	77.2	C19H40O2Si
19.9126	Oxybenzone	77.7	C14H12O3
19.9526	Naphthalene, 3-benzyl-1,2-dihydro-	72.6	C17H16
20.2111	Ethanol, 2-ethoxy-	73.0	C4H10O2
20.2898	p-Benzophenetidine	77.0	C15H15NO2

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
20.3318	9,15-Octadecadienoic acid, methyl ester, (Z,Z)-	80.1	C19H34O2
20.3420	Heneicosane	97.4	C21H44
20.4136	3H-1,2,4-Triazol-3-one, 1,2-dihydro-	73.8	C2H3N3O
20.4520	Benzyl cinnamate	96.7	C16H14O2
20.4667	2(3H)-Furanone, 5-dodecylidihydro-	73.0	C16H30O2
20.6014	Methyl stearate	87.0	C19H38O2
20.8135	Pyrene	71.1	C16H10
20.8139	Fluoranthene	77.0	C16H10
20.9784	(Z)-18-Octadec-9-enolide	83.3	C18H32O2
20.9847	Cyclopentanone, 3-methyl-	72.9	C6H10O
21.0847	Naphthalene, 1-(phenylmethoxy)-	71.5	C17H14O
21.1468	Nonanamide	73.0	C9H19NO
21.1819	Cinnamyl cinnamate	78.6	C18H16O2
21.1924	1-Octadecanol	87.5	C18H38O
21.2387	Docosane	84.4	C22H46
21.2894	Benzoic acid, 4-(4-pentylcyclohexyl)-, 4'-cyano[1,1'-biphenyl]-4-yl ester	73.0	C31H33NO2
21.5980	2-Propenoic acid, 3-phenyl-, 1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]hept-2-yl ester, endo-	86.8	C19H24O2
21.8612	Oxalic acid, monoamide monohydrazide, N-benzyl-N'-(1-oxo-3-phenylprop-2-enyl)-	74.5	C18H17N3O3
21.8613	Benzenepropanenitrile	74.4	C9H9N
21.8909	Tetracosamethyl-cyclododecasiloxane	78.1	C24H72O12Si12
22.1019	Hexadecane	93.3	C16H34
22.1020	Octadecane	94.1	C18H38
22.1992	2-Propanamine	72.5	C3H9N
22.3482	2-Propenoic acid, 3-phenyl-, 3-phenylpropyl ester	91.7	C18H18O2
22.3742	2-Ethylhexyl trans-4-methoxycinnamate	74.7	C18H26O3
22.4851	Propanenitrile, 3,3'-iminobis-	72.5	C6H9N3

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
22.4895	Benzo[f]naphtho[2,1-c]quinoline	74.9	C20H12N2
22.4997	Ethanone, 1-(3-hydroxyphenyl)-	75.0	C8H8O2
22.5650	Cinnamyl cinnamate	86.4	C18H16O2
22.6273	3-Ethyl-3-methylheptane	80.9	C10H22
22.6309	4,8,12,16-Tetramethylheptadecan-4-olide	90.2	C21H40O2
22.8356	Octadecanoic acid, butyl ester	75.5	C22H44O2
22.8762	3,7,11,15-Tetramethylhexadec-2-en-1-yl acetate	75.7	C22H42O2
22.9227	Isopropyl Alcohol	95.9	C3H8O
22.9243	Ethanol, 2-ethoxy-	82.0	C4H10O2
22.9303	Tetracosane	96.3	C24H50
23.2177	Ethane, 1,1-difluoro-	83.1	C2H4F2
23.2207	Cinnamyl cinnamate	98.1	C18H16O2
23.3938	4-Pentenoic acid, 2,2-diethyl-3-oxo-5-phenyl-, ethyl ester	86.5	C17H22O3
23.4992	Cyclohexane, 1,3,5-triphenyl-	84.5	C24H24
23.6602	4-Pentenoic acid, 2,2-diethyl-3-oxo-5-phenyl-, ethyl ester	72.8	C17H22O3
23.7246	Pentacosane	97.8	C25H52
23.8421	Phosphorodifluoridothioic hydrazide, 2,2-dimethyl-	73.2	C2H7F2N2PS
23.8485	4-Pentenoic acid, 2,2-diethyl-3-oxo-5-phenyl-, ethyl ester	75.4	C17H22O3
24.0573	4-Vinylbenzoic acid	74.0	C9H8O2
24.0781	Dihexyverine	71.8	C20H35NO2
24.1690	Phthalic acid, di(2-propylpentyl) ester	98.3	C24H38O4
24.2783	1-Propene, 3-(2-cyclopentenyl)-2-methyl-1,1-diphenyl-	75.0	C21H22
24.3781	1-Propene, 3-(2-cyclopentenyl)-2-methyl-1,1-diphenyl-	78.9	C21H22
24.3789	1H-Indole, 1-methyl-2-phenyl-	71.2	C15H13N
24.4371	Benzenamine, N-(3-phenyl-2-propenylidene)-	74.6	C15H13N
24.4893	Octacosane	95.8	C28H58

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
24.5129	1-Propene, 3-(2-cyclopentenyl)-2-methyl-1,1-diphenyl-	71.5	C21H22
24.9545	Borane, diethyl(decyloxy)-	82.4	C14H31BO
24.9545	Dodecane, 1-iodo-	77.6	C12H25I
25.0350	Tetradecane, 1-iodo-	78.6	C14H29I
25.1732	Cinchophen	72.6	C16H11NO2
25.1743	Octocrylene	72.0	C24H27NO2
25.1764	3-(Phenylmethoxy)estra-1,3,5(10)-trien-17-one	72.9	C25H28O2
25.2275	Octacosane	95.6	C28H58
25.4658	Tetracosanoic acid, methyl ester	70.0	C25H50O2
25.6299	1,4-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	87.7	C24H38O4
25.6759	Decane, 1-iodo-	76.8	C10H21I
25.7574	1-Iodoundecane	74.8	C11H23I
25.7575	Decane, 3,8-dimethyl-	74.5	C12H26
25.9396	Octacosane	96.6	C28H58
26.1943	Squalene	93.0	C30H50
26.3753	Borane, diethyl(decyloxy)-	76.1	C14H31BO
26.4474	.alpha.-Tocospiro A	90.4	C29H50O4
26.4510	Tridecane, 3-methyl-	76.1	C14H30
26.4736	1-Acetoxyindane	71.0	C11H12O2
26.6001	.alpha.-Tocospiro A	70.1	C29H50O4
26.6364	Octacosane	95.2	C28H58
26.6365	Nonacosane	96.2	C29H60
26.6925	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	70.1	C5H9N
26.7226	Silane, dimethyl(4-methoxyphenoxy)dodecyloxy-	72.5	C21H38O3Si
26.7788	Formamide, N-formyl-N-methyl-	83.9	C3H5NO2
26.8630	Hexacosanoic acid, methyl ester	72.1	C27H54O2

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
26.9318	1,2,4,5-Tetrazin-3-amine	75.6	C2H3N5
26.9682	5-Methyl-2-(2-methyl-2-tetrahydrofuryl)tetrahydrofuran	73.2	C10H18O2
27.0502	Hexadecane, 1-iodo-	75.6	C16H33I
27.2940	Pentacosane	94.5	C25H52
27.3780	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	83.8	C5H9N
27.5898	Furazan, dimethyl-	74.2	C4H6N2O
27.7985	Pyrolo[3,2-d]pyrimidin-2,4(1H,3H)-dione	71.4	C6H5N3O2
27.9454	Heneicosane	96.5	C21H44
28.0493	Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3.beta.)-	78.0	C27H44O
28.1037	Methylamine, N,N-dimethyl-	76.5	C3H9N
28.1869	Stigmasta-3,5-diene	89.9	C29H48
28.3010	Benzeneethanamine, .beta.-hydroxy-.alpha.-methyl-N-octadecyl-	77.1	C27H49NO
28.3278	Vitamin E	87.2	C29H50O2
28.3290	.alpha.-Tocopherol-.beta.-D-mannoside	86.1	C35H60O7
28.5646	Undecane	89.8	C11H24
28.5656	Hentriacontane	87.8	C31H64
28.6602	.alpha.-Tocopheryl acetate	78.9	C31H52O3
28.6605	(,+/-)-.alpha.-Tocopherol acetate	73.1	C31H52O3
28.6870	2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	70.9	C5H9N
28.8895	1H-1,2,3-Triazole-4-carboxaldehyde	74.6	C3H3N3O
29.1758	Tetratriacontane	95.8	C34H70
29.6821	.gamma.-Sitosterol	83.6	C29H50O
29.8267	Triacotane	71.5	C30H62
29.8268	Tetracosane	72.4	C24H50
30.0732	Clionasterol acetate	75.4	C31H52O2
30.6507	.gamma.-Sitostenone	88.7	C29H48O

Component RT	Compound Name	Match Factor	Formula
31.0310	Lup-20(29)-en-3-ol, acetate, (3.beta.)-	87.4	C32H52O2