

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (UNESP)
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara (FCFAR)
Programa de Pós-graduação em Biociências e Biotecnologia Aplicadas à Farmácia

FLÁVIA BENINI DA ROCHA SILVA

**Avaliação da atratividade de hamster dourado (*Mesocricetus auratus*)
infectado com *Leishmania (Leishmania) amazonensis* para *Lutzomyia*
longipalpis (Diptera:Psychodidae)**

Araraquara, SP

2022

FLÁVIA BENINI DA ROCHA SILVA

**Avaliação da atratividade de hamster dourado (*Mesocricetus auratus*)
infectado com *Leishmania (Leishmania) amazonensis* para *Lutzomyia*
longipalpis (Diptera:Psychodidae)**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Biociências e Biotecnologia aplicadas à Farmácia da Faculdade de Ciências Farmacêuticas - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", como requisito parcial para obtenção do grau de doutora em Ciências. Área de Parasitologia.

Orientadora: Profa. Dra. Mara Cristina Pinto

Coorientador: Prof. Dr. Danilo Ciccone Miguel

Araraquara, SP

2022

D224a

Da Rocha Silva, Flávia Benini.

Avaliação da atratividade de hamster dourado (*Mesocricetus auratus*) infectado com *Leishmania (Leishmania) amazonensis* para *Lutzomyia longipalpis* (Diptera: Psychodidae) / Flávia Benini da Rocha Silva. – Araraquara: [S.n.], 2022.

111 f. : il.

Tese (Doutorado) – Universidade Estadual Paulista. “Júlio de Mesquita Filho”. Faculdade de Ciências Farmacêuticas. Programa de Pós Graduação em Biociências e Biotecnologia Aplicadas à Farmácia. Área de Parasitologia.

Orientador: Mara Cristina Pinto.

Coorientador: Danilo Ciccone Miguel.

1. Leishmanioses. 2. Flebotomíneos. 3. Ecologia química. 4. Compostos orgânicos voláteis. I. Pinto, Mara Cristina. II. Miguel, Danilo Ciccone, coorient. III. Título.

Diretoria do Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação - Faculdade de Ciências Farmacêuticas
UNESP - Campus de Araraquara

CAPES: 33004030081P7

Esta ficha não pode ser modificada

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: Avaliação da atratividade de hamster dourado (*Mesocricetus auratus*) infectado com *Leishmania (Leishmania) amazonensis* para *Lutzomyia longipalpis* (Diptera:Psychodidae)

AUTORA: FLÁVIA BENINI DA ROCHA SILVA

ORIENTADORA: MARA CRISTINA PINTO

COORIENTADOR: DANILO CICCONE MIGUEL

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Doutora em Ciências, área de conhecimento: Parasitologia pela Comissão Examinadora:

Profa. Dra. MARA CRISTINA PINTO (Participação Virtual)
Departamento de Ciências Biológicas / Faculdade de Ciências Farmacêuticas do Câmpus de Araraquara da UNESP

Prof. Dr. JAIRO TORRES MAGALHÃES JUNIOR (Participação Virtual)
Centro Multidisciplinar do Câmpus de Barra / Universidade Federal do Oeste da Bahia

Profa. Dra. MAGDA CLARA VIEIRA DA COSTA RIBEIRO (Participação Virtual)
Departamento de Patologia Básica / Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. ANDRÉ GONZAGA DOS SANTOS (Participação Virtual)
Departamento de Farmacos e Medicamentos / Faculdade de Ciências Farmacêuticas UNESP Araraquara

Araraquara, 30 de março de 2022

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela bolsa concedida (Processo n° 142092/2018-5).

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa concedida (Processo n° 88887.647854/2021-00).

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela concessão da verba do projeto regular (Processo n° 2018/11419-6).

Aos meus pais, Cidinha e Marcelo, por serem sempre meu porto seguro e sempre me apoiarem.

À minha orientadora Mara, por sempre acreditar no meu potencial, por todo suporte, conselhos e amizade.

Ao meu coorientador Danilo, por toda a colaboração e suporte.

Ao professor Christiann e ao IFSP-Câmpus Matão, por tornarem viável uma etapa importante para a realização do trabalho.

À minha noiva Letícia, por todo companheirismo e apoio, principalmente nos momentos mais difíceis.

Aos meus grandes amigos feitos no laboratório, Vicente e Thaís, por tornarem a jornada da pós-graduação mais leve, com muito companheirismo, risadas e conselhos.

Muito obrigada!

RESUMO

As leishmanioses são zoonoses causadas por protozoários flagelados do gênero *Leishmania* e transmitidas por insetos hematófagos denominados flebotomíneos. Clinicamente se apresentam como visceral e tegumentar. A leishmaniose visceral tem como agente etiológico a *Leishmania (Leishmania) infantum chagasi* e principal vetor nas Américas os flebotomíneos da espécie *Lutzomyia longipalpis*. Além disso, *Lu. longipalpis* é considerado como vetor permissivo para *L. (L.) amazonensis*, um dos agentes etiológicos da leishmaniose tegumentar americana. Para localização dos hospedeiros e realização do repasto sanguíneo, os insetos hematófagos utilizam compostos orgânicos voláteis (COV) liberados pelos mesmos, denominados cairomônios. Alguns estudos demonstram que hospedeiros infectados por parasitas podem liberar compostos diferentes dos não infectados e influenciar na atratividade de tais hospedeiros para os insetos hematófagos vetores. O presente estudo buscou investigar se hamsters não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis* apresentavam diferença na atratividade para *Lu. longipalpis*; além da diferença de atratividade, buscou avaliar o volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos e os COV emitidos pelos diferentes grupos de hamsters. Complementar a isso, também foram avaliados os COV liberados *in vitro* em cultura de macrófagos infectados ou não com *L. (L.) amazonensis* e de amastigotas livres dessa espécie. A atratividade dos animais foi avaliada por meio de testes realizados em gaiolas, onde se contabiliza a taxa de alimentação das fêmeas dos flebotomíneos. As fêmeas alimentadas foram então individualizadas em microtubos, maceradas e homogeneizadas para leitura da absorbância a 540nm. Tal leitura permite estimar o volume de sangue ingerido por cada fêmea, a partir de curva padrão de absorbância *versus* volume de sangue obtida previamente. Os COV liberados pelos diferentes grupos de animais foram obtidos por meio de uma fibra de microextração em fase sólida (SPME) e analisados por meio de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas. Após algumas etapas de desenvolvimento da metodologia, ficou estabelecida extração dos voláteis com uso de fibra de SPME revestida por polidimetilsiloxano/divinilbenzeno e com a amostra aquecida em banho-maria a 90°C por um período de 50 minutos. Os testes de atratividade foram realizados com um total de 10 hamsters – antes e após a infecção – onde foi possível observar uma taxa média de alimentação das fêmeas de 64,25% antes da infecção e de 64,75% após a infecção. Na avaliação do volume de sangue ingerido por fêmea, foram obtidas médias de 0,98µL e 1,10µL antes e após a infecção, respectivamente. Os voláteis extraídos a partir de amostras de pelos dos animais utilizados nos testes de atratividade e das culturas *in vitro* foram identificados com auxílio de biblioteca de espectros e cálculo dos índices de retenção. Os COV identificados foram submetidos à análise de componentes principais para verificar possíveis correlações com os animais e o status da infecção. A partir dos resultados obtidos para os testes *in vivo*, não foi possível observar uma influência da infecção por *L. (L.) amazonensis* na taxa de alimentação das fêmeas de *Lu. longipalpis* em hamsters e no perfil de COV liberados por esses animais. Para os COV identificados a partir dos testes *in vitro* com culturas infectadas com *L. (L.) amazonensis*, foi possível observar a presença de undecan-2-ona exclusivamente nas formas amastigotas-like livres; octan-1-ol e 2-feniletanol nas formas amastigotas (independente da maneira de obtenção); e de 4-fenilciclohexeno em todas as amostras, porém em maior teor nas amastigotas livres de lesão. Tais compostos podem ser estudados futuramente quanto à sua atratividade para flebotomíneos.

Palavras-chave: leishmanioses; flebotomíneos; ecologia química; compostos orgânicos voláteis.

ABSTRACT

Leishmaniasis are zoonosis caused by flagellated protozoa of *Leishmania* genus, transmitted by hematophagous insects called sand flies, and present two main clinical manifestations: visceral and cutaneous. Visceral leishmaniasis has as *Leishmania (Leishmania) infantum chagasi* as aetiological agent and *Lutzomyia longipalpis* sand flies as main vector in the America. Furthermore, *Lu. longipalpis* is considered as a permissive vector to *L. (L.) amazonensis*, one of aetiological agents of American cutaneous leishmaniasis. To ensure a successful *Leishmania* transmission, the female sand fly needs to detect a vertebrate host for blood meal. For this, sand flies females and other haematophagous insects use some chemical cues called kairomones, which are volatiles organic compounds (VOCs) released by the hosts. Some studies have demonstrated that parasites-infected hosts can release different compounds when compared to uninfected, presenting a higher attractiveness to haematophagous vectors. In the present study, we evaluated possible differences on the attractiveness of golden hamsters uninfected versus *L. (L.) amazonensis*-infected to *Lu. longipalpis* females and the blood volume ingested by the sand flies females fed on those animals; also, we investigated the VOCs released by the animals before and after infection with *L. (L.) amazonensis*. Additionally, we evaluate possible differences in the VOCs released by host macrophages, uninfected or infected by *L. amazonensis*, and by free amastigotes in culture medium. Hamsters' attractiveness trials were performed in Barraud cages, by counting of the number of blood fed sand flies females, which after each trial were individualized in microtubes, macerated and homogenized for absorbance reading at 540nm. Such reading allows estimating the blood volume ingested by each sand fly female, by using a standard curve of absorbance versus blood volume previously obtained. VOCs released by the different groups of animals were obtained by a solid phase microextraction fiber and analysed by gas chromatography-linked mass spectrometry. After some development steps, we established the VOCs extraction conditions: SPME fiber coated with polydimethylsiloxane/divinylbenzene, with the sample heated at 90°C for 50 minutes. Attractiveness trials were performed with a total of 10 hamsters – before and after infection – and we could observe means of blood fed females of 64.25% before the infection and 64.75% after the infection. For the blood volume ingested by sand fly female, we obtain means of 0.98µL and 1.10µL before and after the infection, respectively. VOCs extracted from animals samples and from *in vitro* cultures were identified by comparing mass spectra to the library of the machine and by comparing the retention indexes to those of a mixture of C8-C20 n-alkanes. Identified VOCs were subjected to principal components analysis to verify possible correlations with animals and status of infection. The results obtained from the *in vivo* trials did not showed a possible influence of *L. (L.) amazonensis* infection on the blood meal rates of *Lu. longipalpis* in hamsters and on the VOCs profiles released by these animals. For the VOCs identified from *in vitro* *L. (L.) amazonensis*-infected cell cultures, it was possible to observe the presence of undecan-2-one exclusively in amastigote-like cells; octan-1-ol and 2-phenylethanol in amastigote forms (independently of the obtained method); and 4-phenylcyclohexene in all of the samples, but with large amount in amastigotes from lesion site. Such compounds can be future evaluated for their attractiveness for sand flies.

Keywords: leishmaniasis; sand flies; chemical ecology; volatile organic compounds.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.** Ciclo de vida e transmissão dos protozoários do gênero *Leishmania*. (a) fêmeas de flebotomíneos adquire as formas amastigotas da *Leishmania* durante o repasto sanguíneo em hospedeiro infectado; (b) amastigotas se diferenciam em promastigotas procíclicas no intestino do inseto e após desenvolvimento completo se diferenciam em promastigotas metacíclicas; (c) promastigotas metacíclicas migram para o aparelho bucal do inseto e são inoculadas em um novo hospedeiro vertebrado no momento de um novo repasto sanguíneo; (d) promastigotas metacíclicas são fagocitadas por macrófagos e voltam a se diferenciar em amastigotas; (e) as amastigotas se multiplicam intracelularmente e, após apoptose da célula infectada, infectam novas células do hospedeiro; (f) as formas amastigotas são adquiridas pelo vetor durante um novo repasto sanguíneo, continuando assim o ciclo de transmissão..... 14
- Figura 2.** Estruturas moleculares dos feromônio sexuais produzidos pelas diferentes populações de *Lu. longipalpis*. (a) (S)-9-metilgermacreno-B; (b) 3-metil- α -himachaleno; (c) sobraleno, sendo dois homosesquiterpenos e um diterpeno, respectivamente. 16
- Figura 3.** Nomenclatura dos semioquímicos de acordo com o tipo de interação mediada. Aleloquímicos são classificados de acordo com o benefício para o organismo emissor e para o receptor. Feromônios são classificados de acordo com a função exercida. 17
- Figura 4.** Estrutura molecular dos compostos identificados como potenciais biomarcadores de infecção de cães por *L. (L.) i. chagasi*. (a) octanal; (b) nonanal; (c) β -hidroxietil fenil éter; (d) decanal; (e) heptadecano; (f) 2-etil-hexil salicilato. 19
- Figura 5.** Fluxograma geral das etapas realizadas durante a execução experimental do estudo. (a) delineamento dos testes realizados a partir de infecção *in vivo*; (b) delineamento dos testes realizados a partir de infecção *in vitro*..... 24
- Figura 6.** (a) Gaiola de Barraud utilizada nos testes de alimentação das fêmeas de flebotomíneos; (b) fêmeas de *Lu. longipalpis* se alimentando em pata de hamster utilizado no teste. 26
- Figura 7.** Fêmeas de *Lu. longipalpis* com diferentes níveis de ingestão sanguínea. (a) parcialmente ingurgitada; (b) totalmente ingurgitada. 27
- Figura 8.** Fluxograma dos testes de alimentação realizados com os hamsters não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis* para *Lu. longipalpis*. Intervalo entre t0 e t1 foi de aproximadamente 30-40 dias e assim sucessivamente entre os demais tempos..... 27
- Figura 9.** Esquema geral de metodologia utilizada para avaliação do volume de sangue ingerido pelas fêmeas nos testes de atratividade. 28

Figura 10. Vials utilizados para acondicionamento das amostras durante as extrações, com fibra de SPME inserida para adsorção dos voláteis.....	29
Figura 11. Imagens representativas do procedimento usado para a extração de voláteis produzidos por macrófagos infectados ou não com <i>L. (L.) amazonensis</i> (cepa PH8).....	32
Figura 12. Dados gerais dos animais após a infecção por <i>L. (L.) amazonensis</i> . (a) tamanho das patas infectadas e não infectadas após infecção; (b) tamanho da lesão das patas infectadas; (c) peso dos animais após infecção. p.d.: pata direita (não infectada); p.e.: pata esquerda (infectada).....	35
Figura 13. Volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos em cada um dos hamsters nos testes de atratividade por meio de alimentação direta das fêmeas de flebotomíneos (n=30/cada condição testada). NI: não infectado; PI: pós-infecção. n.s. = não significativo.	37
Figura 14. Número de picos totais e área total dos picos obtidos a partir de amostras de pelos de hamster para os diferentes revestimentos testados das fibras de SPME. DVB: divinilbenzeno; CAR: Carboxen®; PDMS: polidimetilsiloxano; PA: poliacrilato.....	38
Figura 15. Cromatograma obtido nas condições testadas a partir da extração utilizando fibra de SPME revestida por PDMS/DVB. (a) cromatograma total; (b) zoom $t_R=45-72$ minutos. ...	39
Figura 16. Número de picos totais e área total dos picos obtidos para cada uma das condições de temperatura/tempo de extração testadas.	40
Figura 17. Cromatograma obtido para as melhores condições de temperatura/tempo de extração testadas (90°C por 50 minutos). (a) Cromatograma total; (b) zoom $t_R=20-55$ minutos; (c) zoom $t_R=55-93$ minutos.	41
Figura 18. Cromatograma obtido após modificações no programa de temperatura da coluna cromatográfica. (a) Cromatograma total; (b) zoom $t_R=9-36$ minutos; (c) zoom $t_R=36-59$ minutos.	42
Figura 19. Número de picos totais obtidos para os hamsters que tiveram a atratividade testada para a <i>Lu. longipalpis</i> . NI: não infectado; PI: pós-infecção.	43
Figura 20. Análise de componentes principais (PCA) dos compostos voláteis identificados a partir das amostras de pelos de hamsters não infectados e infectados com <i>L. (L.) amazonensis</i> . (a) F1 x F2; (b) F2 x F3. Os números representam os COV identificados, de acordo com a tabela 2. NI: não infectado; PI: pós-infecção.	48
Figura 21. Análise de <i>cluster</i> para verificação da proximidade dos hamsters que foram utilizados para os testes de atratividade e que tiveram seus VOC extraídos e identificados. Os números representam os COV identificados, de acordo com a Tabela 2.....	49

Figura 22. Infecção <i>in vitro</i> com <i>L. (L.) amazonensis</i> cepa PH8. (a) porcentagem total de células infectadas (média de cinco poços); (b) Número de parasitos para 100 macrófagos (média de cinco poços).	52
Figura 23. Imagens representativas das culturas de macrófagos. (a) não infectados; (b) infectados com <i>L. (L.) amazonensis</i> cepa PH8. Setas indicam amastigotas no interior de vacúolos parasitóforos após 48h. Barra = 10 µm.	52
Figura 24. Imagens representativas de lâminas de esfregaço da cultura de amastigotas coradas com panótico. Barra = 10 µm.	53
Figura 25. Comparativo dos perfis cromatográficos obtidos a partir da extração dos voláteis de cultura de macrófagos não infectados com fibra de SPME (preto) e polímero Tenax TA (vermelho).	54
Figura 26. Perfis cromatográficos obtidos por meio de extração com fibra de SPME (PDMS/DVB) de culturas de: (a) meio de cultura (preto), macrófagos não infectados (verde) e infectados com <i>L. (L.) amazonensis</i> (vermelho); (b) meio de cultura (preto), amastigotas-like livres (laranja) e amastigotas de lesão livres (azul).	54
Figura 27. Número de picos totais obtidos por meio de extração com fibra de SPME (PDMS/DVB) para as amostras <i>in vitro</i> analisadas.	55
Figura 28. Análise de componentes principais (PCA) dos compostos voláteis identificados a partir das amostras obtidas <i>in vitro</i> . (a) F1 x F2; (b) F2 x F3. Os números representam os compostos identificados, de acordo com a tabela 3.	58
Figura 29. Análise de cluster dos compostos voláteis identificados a partir das amostras <i>in vitro</i> , com separação em dois principais agrupamentos (1 e 2), sendo o primeiro agrupamento o de compostos voláteis correlacionados as amastigotas livres (azul) e segundo aos macrófagos, independente de estar infectado ou não (vermelho).	59
Figura 30. COV identificado exclusivamente em apenas uma das amostras de culturas de células infectadas com <i>L. (L.) amazonensis</i> : amastigotas-like livres. (a) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural da undecan-2-ona. Seta indica o pico referente à undecan-2-ona ($t_R=25,490$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-like livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).	60
Figura 31. COV identificado exclusivamente em um grupo de amostras de culturas de células infectadas com <i>L. (L.) amazonensis</i> : amastigotas livres. (a) e (c) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural do octan-1-ol; (d) fórmula estrutural do 2-feniletanol. Setas indicam os picos referentes ao octan-1-ol ($t_R=17,002$) e ao 2-	

feniletanol ($t_R=18,784$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-*like* livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).....61

Figura 32. COV identificado em todas as amostras de culturas de células, porém em maior teor na amostra de amastigotas livres de lesão. (a) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural do 4-fenilciclohexeno. Seta indica o pico referente ao 4-fenilciclohexeno ($t_R=27,021$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-*like* livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).....62

LISTA DE TABELAS

- Tabela 1.** Número de fêmeas alimentadas em cada um dos hamsters (antes e após a infecção) nos testes de atratividade por meio de alimentação direta das fêmeas de flebotomíneos ($n = 40/\text{hamster}$; $n_{\text{TOTAL}} = 400$ para cada condição testada). $p=0,9341$ 36
- Tabela 2.** Compostos identificados, em ordem crescente de tempo de retenção (t_R) e com seus respectivos índices de retenção (IR) calculados e obtidos a partir das bases de dados. Valores indicam a área relativa do composto na amostra; -: indica ausência do composto na amostra. NI: não infectado; PI: pós-infecção. 44
- Tabela 3.** Compostos identificados nas amostras de pelos de hamsters que já foram previamente identificados em outros estudos com diferentes hospedeiros vertebrados. 47
- Tabela 4.** Compostos tentativamente identificados a partir das amostras in vitro, em ordem crescente de tempo de retenção (t_R) e com seus respectivos índices de retenção (IR) calculados e obtidos a partir das bases de dados. Valores indicam a área relativa do composto na amostra; valores destacados em negrito indicam composto presente em uma amostra ou grupo de amostras; -: indica ausência do composto na amostra. 56

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Leishmanioses e flebotomíneos	13
1.2	Cairomônios e infecções por parasitas	17
1.3	Extração e identificação de cairomônios	20
2	JUSTIFICATIVA	22
3	OBJETIVOS	23
3.1	Objetivo geral	23
3.2	Objetivos específicos	23
4	MATERIAL E MÉTODOS	24
4.1	Flebotomíneos	24
4.2	Infecção dos hamsters	25
4.3	Avaliação da taxa de alimentação	25
4.4	Avaliação do volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos	28
4.5	Identificação dos voláteis emitidos pelos animais	29
4.5.1	Padronização fibra SPME	30
4.5.2	Padronização temperatura/tempo de extração	30
4.5.3	Extração e identificação dos voláteis	31
4.6	Infecção e análise de voláteis <i>in vitro</i>	32
4.6.1	Cultura de macrófagos	32
4.6.2	Amastigotas livres	33
4.6.3	Análise dos voláteis	33
4.7	Análise dos dados	34
4.8	Ética	34
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
5.1	Infecção dos hamsters	35
5.2	Avaliação da taxa de alimentação	36
5.3	Avaliação do volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos	37
5.4	Identificação dos voláteis emitidos pelos animais	38
5.4.1	Padronização fibra SPME	38
5.4.2	Padronização temperatura/tempo de extração	40
5.4.3	Extração e identificação dos voláteis	41
5.5	Infecção e análise de voláteis <i>in vitro</i>	52

5.5.1	Cultura de macrófagos.....	52
5.5.2	Amastigotas livres	53
5.5.3	Análise dos voláteis	53
6	CONCLUSÕES.....	63
	REFERÊNCIAS	64
	APÊNDICES	70
	APÊNDICE A – Parecer de aprovação da CEUA/FCF/CAR.	70
	APÊNDICE B – Cromatogramas obtidos a partir de amostra de pelos de hamster sadio para os diferentes tipos de revestimentos testados em etapa de seleção da fibra de SPME. Cinza: DVB/CAR/PDMS; rosa: PDMS/DVB; azul: CAR/PDMS; preto: PA.	71
	APÊNDICE C – Cromatogramas obtidos a partir de amostra de pelos de hamster sadio para as diferentes condições testadas em etapa de seleção de tempo e temperatura de extração dos compostos voláteis. (a) 50°C; (b) 70°C; (c) 90°C. Em cada imagem, de cima para baixo: 10, 30 e 50 minutos.	72
	APÊNDICE D – Cromatogramas obtidos a partir da análise dos compostos voláteis presentes em amostras de pelos dos hamsters utilizados nos testes de atratividade para <i>Lu. longipalpis</i> . (a) H1; (b) H2; (c) H3; (d) H4; (e) H5; (f) H6; (g) H7; (h) H8; (i) H9; (j) H10. Preto: não infectado; vermelho: pós-infecção.....	73
	APÊNDICE E - Estruturas moleculares dos compostos voláteis identificados e comparação dos espectros de massas dos compostos presentes nas amostras de pelos dos hamsters (superiores) com as bibliotecas utilizadas (inferiores). Porcentagens indicam o grau de similaridade dos compostos.....	76
	APÊNDICE F – Cromatogramas obtidos a partir da análise dos compostos voláteis extraídos de culturas <i>in vitro</i> de <i>Leishmania</i> spp. (a) meio de cultura; (b) macrófagos; (c) macrófagos infectados com <i>L. (L.) amazonensis</i> ; (d) amastigotas-like livres de <i>L. (L.) amazonensis</i> ; (e) amastigotas de lesão de <i>L. (L.) amazonensis</i>	95
	APÊNDICE G - Estruturas moleculares dos compostos voláteis identificados e comparação dos espectros de massas dos compostos presentes nas amostras das culturas de células (superiores) com as bibliotecas utilizadas (inferiores). Porcentagens indicam o grau de similaridade dos compostos.....	97

1 INTRODUÇÃO

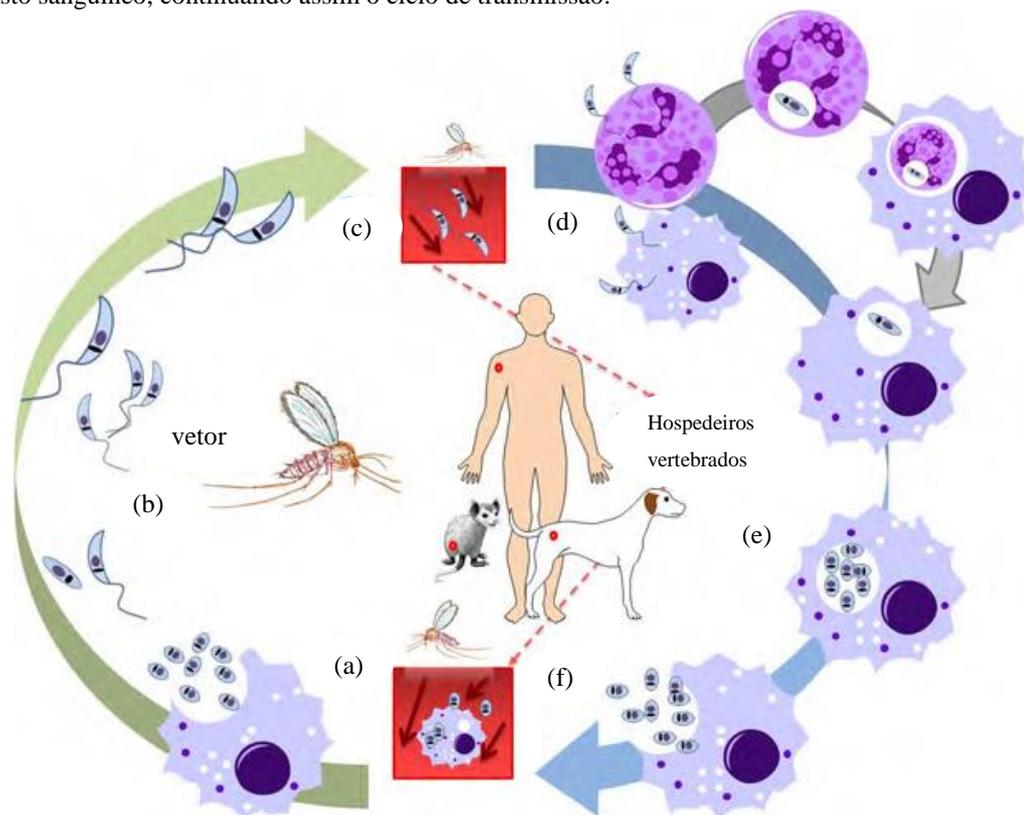
1.1 Leishmanioses e flebotomíneos

As leishmanioses são zoonoses causadas por protozoários flagelados do gênero *Leishmania* (Kinetoplastida: Trypanosomatidae), dividido em quatro subgêneros: *Leishmania* Saf-Janova, 1982, *Viannia* Lainson & Shaw, 1987, *Sauroleishmania* Ranque, 1973 e *Mundinia* Shaw, Camargo & Teixeira, 2016 (ESPINOSA et al., 2016; WHO, 2017). Dentre tais subgêneros, apenas os parasitas dos subgêneros *Leishmania* e *Viannia* e uma espécie de *Mundinia*, na Tailândia, são capazes de infectar os seres humanos (AKHOUNDI et al., 2016; STEVERDING, 2017).

Embora tais protozoários sejam capazes de infectar e causar manifestações patológicas relevantes para o ser humano, o mesmo é considerado um hospedeiro acidental, uma vez que não apresenta importância para a manutenção do ciclo do parasita na natureza (GONTIJO; DE CARVALHO, 2003).

O ciclo de vida dos protozoários do gênero *Leishmania* e desenvolvimento completo de suas formas ocorrem em um hospedeiro vertebrado e um inseto hematófago responsável pela vetorização dos parasitas. Dentro de tal ciclo, a *Leishmania* apresenta duas principais formas: as amastigotas, que não possuem flagelo e são as formas infectantes para o vetor; e as promastigotas metacíclicas, que são flageladas e infectantes para os hospedeiros vertebrados (Figura 1) (PAHO, 2020).

Figura 1. Ciclo de vida e transmissão dos protozoários do gênero *Leishmania*. (a) fêmeas de flebotomíneos adquire as formas amastigotas da *Leishmania* durante o repasto sanguíneo em hospedeiro infectado; (b) amastigotas se diferenciam em promastigotas procíclicas no intestino do inseto e após desenvolvimento completo se diferenciam em promastigotas metacíclicas; (c) promastigotas metacíclicas migram para o aparelho bucal do inseto e são inoculadas em um novo hospedeiro vertebrado no momento de um novo repasto sanguíneo; (d) promastigotas metacíclicas são fagocitadas por macrófagos e voltam a se diferenciar em amastigotas; (e) as amastigotas se multiplicam intracelularmente e, após apoptose da célula infectada, infectam novas células do hospedeiro; (f) as formas amastigotas são adquiridas pelo vetor durante um novo repasto sanguíneo, continuando assim o ciclo de transmissão.



Adaptado de: PAHO. Interactive Atlas of Leishmaniasis in the Americas: clinical aspects and differential diagnosis. Washington, D.C.: Pan American Health Organization, 2020.

Endêmicas em 98 países e amplamente distribuídas mundialmente, as leishmanioses são consideradas doenças tropicais negligenciadas e estima-se cerca de um bilhão de pessoas vivendo em áreas com risco de transmissão (WHO, 2020). Clinicamente, as leishmanioses se apresentam como: visceral e tegumentar.

A leishmaniose tegumentar americana (LTA) pode ser manifestada de três formas: cutânea, mucocutânea e cutânea difusa. Acomete principalmente a pele, mucosas e cartilagens, podendo produzir deformidades e apresentar impactos nos campos social e econômico devido ao seu envolvimento psicológico (BRASIL, 2017). Já a leishmaniose visceral (LV) atinge principalmente tecidos do fígado, baço e medula óssea, podendo ser fatal em 95% dos casos se o diagnóstico e tratamento não forem feitos de maneira precoce (WHO, 2017).

No Brasil, observou-se um aumento no número de casos de LTA registrados a partir da década de 80, além de uma expansão com a confirmação de casos autóctones em todos os estados do país a partir do ano de 2003, tendo como principal agente etiológico a *Leishmania (Viannia) braziliensis*, seguida pela *L. (Leishmania) amazonensis* (BRASIL, 2017). Dentre tais espécies de *Leishmania*, a *L. (L.) amazonensis* é a principal responsável pela manifestação cutânea difusa da LTA, geralmente associada à paciente com deficiência da resposta imune (CONVIT; ULRICH, 1993).

A LV, que tem como agente etiológico a *Leishmania (Leishmania) infantum*, apresenta casos autóctones em 24 dos 27 estados do país (BRASIL, 2021a). No período entre 1990 e 2020 foram registrados 753.656 casos de LTA e 95.547 casos de LV, sendo 16.432 e 1.933 casos de LTA e LV no ano de 2020, respectivamente (BRASIL, 2021b, 2021a).

As leishmanioses são transmitidas por insetos hematófagos denominados flebotomíneos (Diptera: Psychodidae: Phlebotominae), popularmente conhecidos como mosquito-palha, tatuquira, birigui, entre outros (BRASIL, 2017). São insetos de pequeno porte (2-3 mm de comprimento), apresentam o corpo recoberto por cerdas; são holometábolos e, além de utilizarem carboidratos como fonte de energia, as fêmeas necessitam de alimentação sanguínea para maturação de seus ovos (BRAZIL; BRAZIL, 2003). Durante o repasto sanguíneo, a saliva dos flebotomíneos gera uma grande reação inflamatória, tornando suas picadas um fator de incômodo, principalmente em áreas endêmicas (ABDELADHIM; KAMHAWI; VALENZUELA, 2014; SACKS; KAMHAWI, 2001).

Atualmente, dentre quase 1.000 espécies de flebotomíneos descritas no mundo, 530 ocorrem nas Américas e aproximadamente 20 espécies são consideradas como vetores das leishmanioses no Novo Mundo (BRAZIL; RODRIGUES; FILHO, 2015; SHIMABUKURO; DE ANDRADE; GALATI, 2017).

Para uma espécie de flebotomíneo ser considerada vetora, alguns critérios devem ser atendidos como, por exemplo, apresentar infecção natural por *Leishmania* spp e estar presente altas densidades em área de transmissão (READY, 2013).

A LV tem como principal vetor flebotomíneos da espécie *Lutzomyia longipalpis*, que está distribuída amplamente pelo Brasil (BRASIL, 2014). No estado de São Paulo, pode ser encontrado em 196 municípios, dos quais aproximadamente 77% apresentam transmissão de LV (HIRAMOTO et al., 2019).

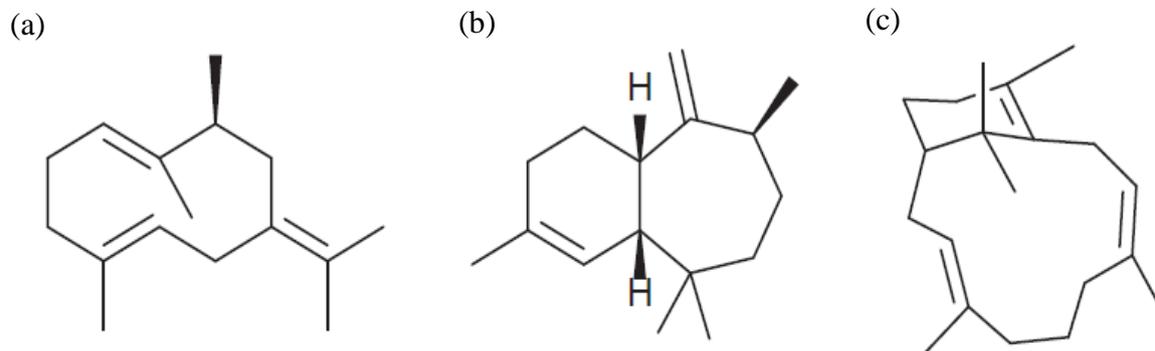
Apesar de ter o papel de principal vetor do agente etiológico da LV, *Lu. longipalpis* também é considerado um vetor permissivo da *L. (L.) amazonensis*, um dos agentes etiológicos da LTA (MOLYNEUX; KILLICK KENDRICK; ASHFORD, 1975; SILVA et al.,

1990). A *L. (L.) amazonensis* tem como principal vetor flebotomíneos da espécie *Bychromomyia flaviscutellata* (LAINSON; SHAW, 1968; RANGEL; LAINSON, 2009). No entanto, por se tratar de uma espécie com uma baixa antropofilia, possui maior importância na transmissão zoonótica da LTA (BRILHANTE et al., 2015). Além disso, *Lu. longipalpis* pode ser encontrado como espécie predominante em regiões urbanas endêmicas para as leishmanioses, onde é possível identificar a presença de DNA de *L. (L.) amazonensis* em cerca de 40% dos espécimes coletados (CARVALHO-SILVA et al., 2022). Ainda, *Lu. longipalpis* também já foi capaz de transmitir *L. (L.) amazonensis* experimentalmente para camundongos, resultando em manifestação clínica da LTA nos animais (DA SILVA et al., 2021).

Levando em conta a maior importância de *Bi. flaviscutellata* na transmissão zoonótica da LTA, a presença de *Lu. longipalpis* em regiões onde ocorre a transmissão de *L. (L.) amazonensis* e sua capacidade de transmitir experimentalmente essa espécie de *Leishmania*, cabe ressaltar a relevância de se investigar os diferentes aspectos envolvidos no papel de *Lu. longipalpis* como vetor permissivo dessa espécie (BRILHANTE et al., 2015; CARVALHO et al., 2018).

De forma geral, *Lu. longipalpis* é considerado como um complexo de espécies, uma vez que dentro da mesma espécie existem diferentes populações. As populações apresentam diversas características diferentes, no entanto são divididas de acordo com o feromônio sexual produzido por cada uma delas: (*S*)-9-metilgermacreno-B (9-MGB), 3-metil- α -himachaleno (3-M α H) e biciclo[9.3.1]pentadeca-*E*-3,4-*Z*-8,9-trieno (sobraleno – SOBR), sendo que este último anteriormente era considerado como uma dupla de isômeros denominados cembreno-1 e cembreno-2 (Figura 2) (HAMILTON et al., 2005; PALFRAMAN et al., 2018).

Figura 2. Estruturas moleculares dos feromônio sexuais produzidos pelas diferentes populações de *Lu. longipalpis*. (a) (*S*)-9-metilgermacreno-B; (b) 3-metil- α -himachaleno; (c) sobraleno, sendo dois homosesquiterpenos e um diterpeno, respectivamente.

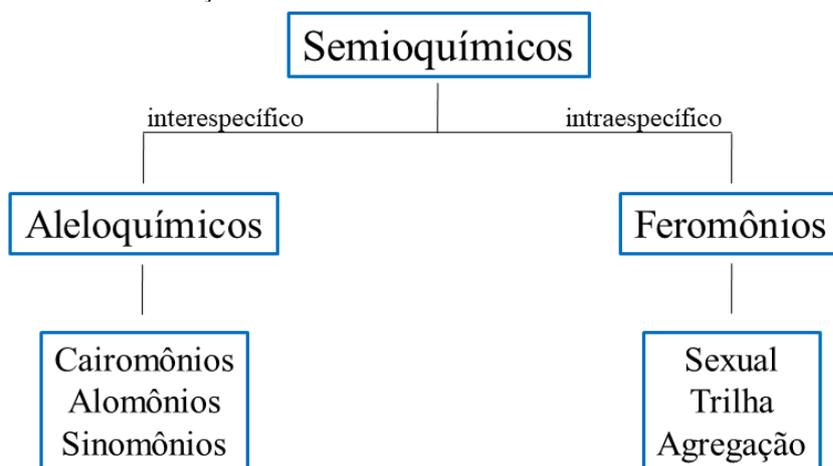


Fonte: PALFRAMAN, M. J. et al. Sobralene, a new sex-aggregation pheromone and likely shunt metabolite of the taxadiene synthase cascade, produced by a member of the sand fly *Lutzomyia longipalpis* species complex. **Tetrahedron Letters**, v. 59, n. 20, p. 1921–1923, 2018

No estado de São Paulo são encontradas duas das diferentes populações de *Lu. longipalpis* (9-MGB e SOBR) (CASANOVA et al., 2006). A presença de tais populações em áreas com diferenças epidemiológicas da LV sugere que elas apresentem uma diferença na capacidade vetorial de *L. (L.) infantum* (CASANOVA et al., 2015).

Os feromônios são compostos orgânicos voláteis (COV) responsáveis pela mediação de interações intraespecíficas, sendo considerados como semioquímicos. Além dos feromônios, que podem apresentar diferentes funções, existem também os aleloquímicos, que desencadeiam interações interespecíficas. Tais interações mediadas por semioquímicos, sejam elas intra ou interespecíficas, são objetos de estudo da ecologia química (Figura 3) (ZARBIN; RODRIGUES; LIMA, 2009).

Figura 3. Nomenclatura dos semioquímicos de acordo com o tipo de interação mediada. Aleloquímicos são classificados de acordo com o benefício para o organismo emissor e para o receptor. Feromônios são classificados de acordo com a função exercida.



Adaptado de: ZARBIN, P. H. G.; RODRIGUES, M. A. C. M.; LIMA, E. R. Feromônios de insetos: tecnologia e desafios para uma agricultura competitiva no Brasil. *Química Nova*, v. 32, n. 3, p. 722–731, 2009.

Dentre os aleloquímicos, os cairomônios são COV liberados por um organismo que desencadeiam uma resposta benéfica para organismos de outra espécie (PITTS et al., 2014). No caso dos insetos hematófagos, esses voláteis são utilizados para sinalizar a presença dos hospedeiros (BRAY; WARD; HAMILTON, 2009).

1.2 Cairomônios e infecções por parasitas

O conhecimento dos cairomônios pode ser aplicado no monitoramento e/ou controle desses insetos por meio de iscas atrativas, principalmente em áreas endêmicas da doença onde estão presentes os vetores em menor densidade (LOGAN; BIRKETT, 2007).

A partir da identificação de cairomônios, tais compostos podem ser testados em aparatos utilizados para mensurar a atratividade de insetos, tais como os olfatômetros e túneis de vento. Nesses aparatos, a fonte de estímulo é colocada distante do inseto e, geralmente, há a presença de fluxo de ar que direciona os voláteis para o inseto (OMRANI et al., 2010). Nesse tipo de experimento, no caso de insetos hematófagos, avalia-se a preferência dos insetos por voláteis dos hospedeiros e infere-se, indiretamente, que houve uma escolha para a hematofagia.

Alguns estudos têm mostrado que hospedeiros infectados por parasitas podem liberar compostos diferentes daqueles não infectados, influenciando assim na atratividade dos insetos hematófagos por tais hospedeiros. Diferentes espécies de culicídeos transmissores da malária apresentaram uma maior atratividade por hospedeiros contaminados com *Plasmodium* spp (BATISTA; COSTA; SILVA, 2014; CORNET et al., 2013; DE MORAES et al., 2014; DÍEZ-FERNÁNDEZ et al., 2020; LACROIX et al., 2005).

Além da diferença dos voláteis presentes em camundongos infectados e não infectados, também foi constatado que a presença de gametócitos no hospedeiro infectado também é capaz de aumentar a atratividade dos insetos por esses hospedeiros (BATISTA; COSTA; SILVA, 2014; DE MORAES et al., 2014; LACROIX et al., 2005). Foi também demonstrado que diferentes cepas de parasitas podem desencadear respostas distintas na atratividade, como é o caso do *Plasmodium falciparum*, onde culicídeos infectados por uma cepa sensível à cloroquina apresentaram uma maior atratividade aos odores humanos de voluntários saudáveis (SMALLEGANGE et al., 2013) e culicídeos infectados por uma cepa isolada de pacientes infectados no Marrocos não apresentaram diferença na atratividade (NGUYEN et al., 2017).

Para flebotomíneos, existem evidências de que diferentes espécies de *Leishmania* possam manipular a quantidade de sangue ingerida e a frequência de alimentação sanguínea dos insetos, aumentando a taxa de transmissão (ROGERS, 2012; ROGERS; BATES, 2007).

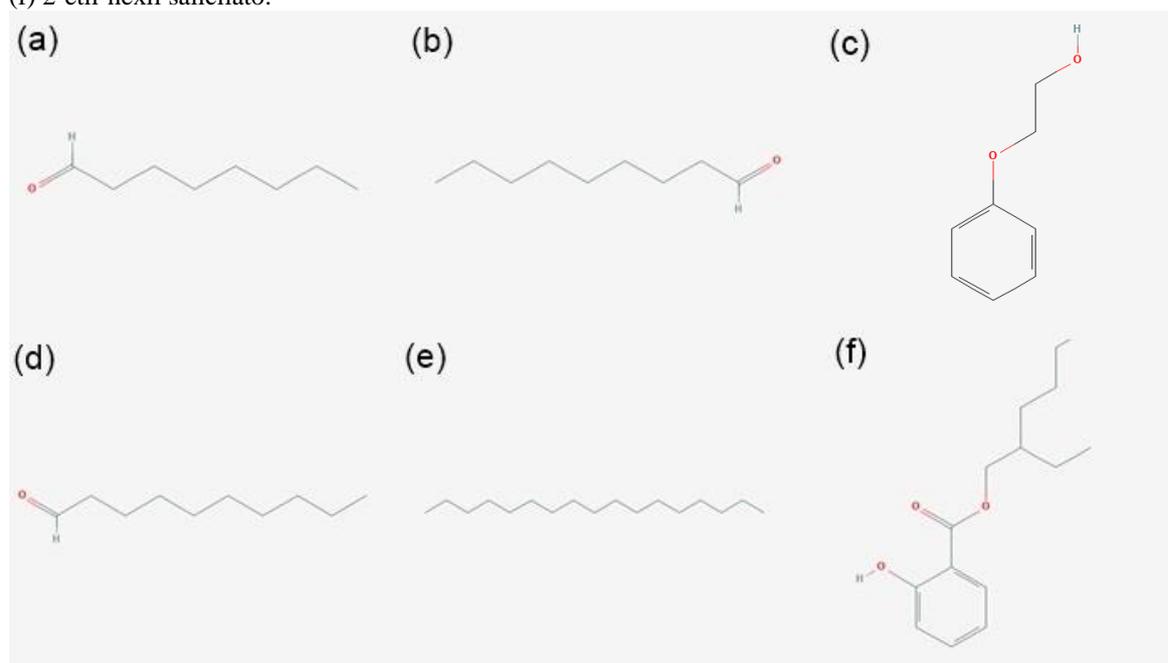
Ao avaliar a resposta de *Lu. longipalpis* frente a hospedeiros infectados ou não por *L. (L.) i. chagasi*, sugere-se que a maior atratividade do inseto pelo hospedeiro contaminado ocorra devido a uma alteração dos odores do hospedeiro mediada pelo parasita (O'SHEA et al., 2002), porém não foram identificados os compostos que poderiam estar envolvidos nessa maior atratividade.

Em outro estudo, foi avaliada a atratividade de *Lu. longipalpis* frente aos odores extraídos de hamsters antes da infecção e após um período de latência de infecção por *L. (L.) i. chagasi*. Em tais testes realizados em tubo em Y (um dos tipos de olfatômetros), os

flebotomíneos apresentaram uma preferência pelos odores extraídos dos hamsters após as manifestações clínicas da doença, reforçando a presença de uma maior atratividade por hospedeiros infectados (NEVATTE et al., 2017). Esse estudo também não identificou os voláteis envolvidos.

Quando avaliados os compostos voláteis presentes em amostras de pelos de cães infectados (assintomáticos e sintomáticos) ou não por *L. (L.) i. chagasi*, foram identificados 10 compostos presentes em maior quantidade no grupo de cães infectados, dos quais seis compostos – octanal, nonanal, β -hidroxiethyl fenil éter, decanal, heptadecano e 2-etil-hexil salicilato (Figura 4) – podem ser considerados como potenciais biomarcadores de infecção pelo parasita, tanto em infecções assintomáticas quanto em infecções sintomáticas (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014a).

Figura 4. Estrutura molecular dos compostos identificados como potenciais biomarcadores de infecção de cães por *L. (L.) i. chagasi*. (a) octanal; (b) nonanal; (c) β -hidroxiethyl fenil éter; (d) decanal; (e) heptadecano; (f) 2-etil-hexil salicilato.



Fonte: Pubchem.

Tais compostos identificados como biomarcadores acima citados foram testados quanto à sua atratividade individualmente – em concentrações de 50 e 100% – para machos e fêmeas e em diferentes misturas entre eles para machos de *Lu. longipalpis*. Dentre os compostos individuais, nonanal (50%) e decanal (50 e 100%) apresentaram resposta considerável de ativação para fêmeas e octanal (50 e 100%), nonanal (100%), decanal (50 e 100%) e heptadecano (100%) apresentaram resposta considerável de ativação para machos. Quanto às misturas testadas para os machos, octanal:decanal (1:1) apresentou resposta

significativa de ativação e octanal:decanal:heptadecano (1:1:1) apresentou resposta significativa de ativação e atração (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2019).

Ainda considerando cães infectados ou não por *L. (L.) i. chagasi*, com o auxílio de um sensor para análise dos COV provenientes de amostras de pelos e confirmação da infecção por PCR, foi possível distinguir os animais infectados dos animais sadios com boa especificidade e boa sensibilidade, até mesmo para os cães com baixa parasitemia (STANIEK et al., 2019). Quando testada a atratividade dos COV provenientes de tais amostras, foi possível observar uma maior atratividade dos odores de cães infectados para fêmeas de *Lu. longipalpis* (STANIEK; HAMILTON, 2021).

Com relação à *L. (V.) braziliensis*, agente etiológico da leishmaniose tegumentar, e seu vetor *Ny. neivai*, não foi possível observar diferenças na atratividade e nos voláteis emitidos por camundongos BALB/c infectados ou não, assim como não houve diferença entre os voláteis produzidos pelos dois grupos de animais (DA ROCHA SILVA et al., 2019).

1.3 Extração e identificação de cairomônios

Além do desenvolvimento de melhores iscas atrativas para insetos vetores, a padronização da extração e da identificação dos COV liberados por hospedeiros vertebrados também pode levar a possíveis biomarcadores de infecção que podem ser considerados como ferramentas de diagnóstico. No caso da malária, a análise de COV respiratórios de indivíduos infectados com *P. falciparum* reportou inicialmente um grupo de quatro compostos da classe dos tioéteres presentes em diferentes concentrações quando comparado com indivíduos saudáveis (BERNA et al., 2015; IVAN et al., 2021). No entanto, um grupo de terpenos liberados na respiração mostrou um aumento ao longo do curso da infecção, podendo ser considerados como possíveis biomarcadores para a predição da infecção por *P. vivax* e *P. falciparum* com uma acurácia de até 91 e 93,5%, respectivamente (BERNA et al., 2018).

Por mais que os COV provenientes da respiração dos hospedeiros vertebrados sejam considerados como uma parte importante para a atração dos insetos, a identificação dos voláteis liberados pela pele também pode ser considerada como peça chave na interação vetor-hospedeiro. O uso da técnica de microextração em fase sólida (*Solid Phase Microextraction* – SPME) para extração dos COV a partir de amostras de pelos se mostrou como uma ferramenta interessante para a avaliação de odores da pele de hospedeiros (TAVARES et al., 2019). Além de não envolver o uso de solventes para extração das amostras voláteis, o sistema de SPME reduz o tempo de preparação das amostras e aumenta a sensibilidade das análises, sendo associado principalmente a detectores de Cromatografia

Gasosa acoplada a Espectrômetro de Massas (CG-EM), para posterior separação e identificação dos analitos (ZHANG; LI, 2010).

A técnica de SPME é realizada por meio de uma fibra de sílica revestida por um polímero, protegida por um tubo hipodérmico e presa a um êmbolo. O polímero pelo qual a fibra é revestida é responsável por adsorver os compostos voláteis presentes na amostra, sendo exposta somente no momento da extração da amostra e da injeção no cromatógrafo para análise (VALENTE; AUGUSTO, 2000).

Os compostos da amostra a ser analisada podem ser extraídos por meio de extração direta ou *headspace* (mais utilizada). Na extração direta a fibra é colocada em contato direto com a amostra e na extração por *headspace* os voláteis são extraídos do espaço existente entre a amostra e o local onde a fibra é inserida (PAWLISZYN, 2012).

As fibras de SPME disponíveis comercialmente podem apresentar diferentes tipos de revestimentos da fibra de sílica, cada um com diferentes características (SHIREY, 2012; SUPELCO, 2018a). Quando o perfil da amostra a ser analisada é desconhecido, diferentes tipos de fibras devem ser avaliadas para encontrar a mais eficiente na extração dos voláteis de tal amostra, uma vez que cada um dos revestimentos irá ser mais compatível com determinadas classes de compostos químicos (SUPELCO, 2018b).

Com a expansão do uso da técnica de SPME, puderam ser obtidas amostras de compostos voláteis de produtos naturais (STASHENKO; MARTÍNEZ, 2007), de cães (DE OLIVEIRA et al., 2008; MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014a), de urina de camundongos (KWAK et al., 2009) e até mesmo de seres humanos (DORMONT et al., 2013; DORMONT; BESSIÈRE; COHUET, 2013; GALLAGHER et al., 2008; TAVARES et al., 2019).

Para outros insetos hematófagos, a SPME já foi utilizada para a identificação de compostos liberados em situações de alarme pelas glândulas de *Triatoma infestans* (GONZÁLEZ AUDINO et al., 2007) e de *Triatoma dimidiata* (MAY-CONCHA et al., 2015). Além disso, também foram identificados compostos nas fezes de *Cimex lectularius* e seu efeito negativo no comportamento de agregação desses insetos (OLSON et al., 2016).

2 JUSTIFICATIVA

Como salientado anteriormente, para culicídeos, transmissores do agente etiológico da malária, os dados de literatura apontam para uma maior atratividade dos hospedeiros infectados com determinadas cepas de *Plasmodium* spp, além de uma diferença no perfil de voláteis liberados por tais hospedeiros quando comparado com hospedeiros não infectados.

Para os flebotomíneos e *Leishmania* spp, seis artigos tratam desse assunto. Cinco deles foram realizados com *L. (L.) infantum* e *Lu. longipalpis*, sendo três com estudos comportamentais, indicando aumento da atratividade de flebotomíneos para animais infectados (NEVATTE et al., 2017; O'SHEA et al., 2002; STANIEK; HAMILTON, 2021); um com análise cromatográfica de voláteis de pelos de animais infectados e não infectados, que identificou um determinado grupo de biomarcadores de infecção (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014) e um que utiliza um sensor capaz de diferenciar cães infectados de cães sadios a partir dos voláteis extraídos de amostras de pelos dos animais (STANIEK et al., 2019). No único estudo com *L. (V.) braziliensis*, não houve indicação de diferença comportamental na atratividade para *Ny. neivai* (DA ROCHA SILVA et al., 2019).

Esses resultados deixam uma pergunta, será que somente a *L. (L.) infantum*, causadora da leishmaniose visceral, pode causar alteração na atratividade para o vetor, sendo que o mesmo não se observou para a espécie, *L. (V.) braziliensis*, causadora da leishmaniose tegumentar? Além disso, a infecção por espécies de *Leishmania* causadoras da LTA é capaz de alterar o perfil dos COV liberados pelos hospedeiros?

O presente projeto foi idealizado para investigar essa questão utilizando o modelo de outra espécie causadora de leishmaniose tegumentar, *L. (L.) amazonensis*. Como modelo de flebotomíneo, foi utilizada a espécie *Lu. longipalpis*, considerada permissiva para essa espécie de *Leishmania*.

Tendo em vista também estudos anteriores realizados com culturas celulares de glóbulos vermelhos infectados com *P. falciparum*, onde se verificou a presença de alguns COV liberados exclusivamente pelas culturas infectadas, levantou-se a questão se a cepa de *L. (L.) amazonensis* utilizada no presente estudo seria capaz de alterar o perfil de COV liberados por culturas de células infectadas por ela.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo geral

Avaliar possíveis diferenças de atratividade de hamsters não infectados e infectados com *Leishmania (Leishmania) amazonensis* para fêmeas de *Lutzomyia longipalpis*.

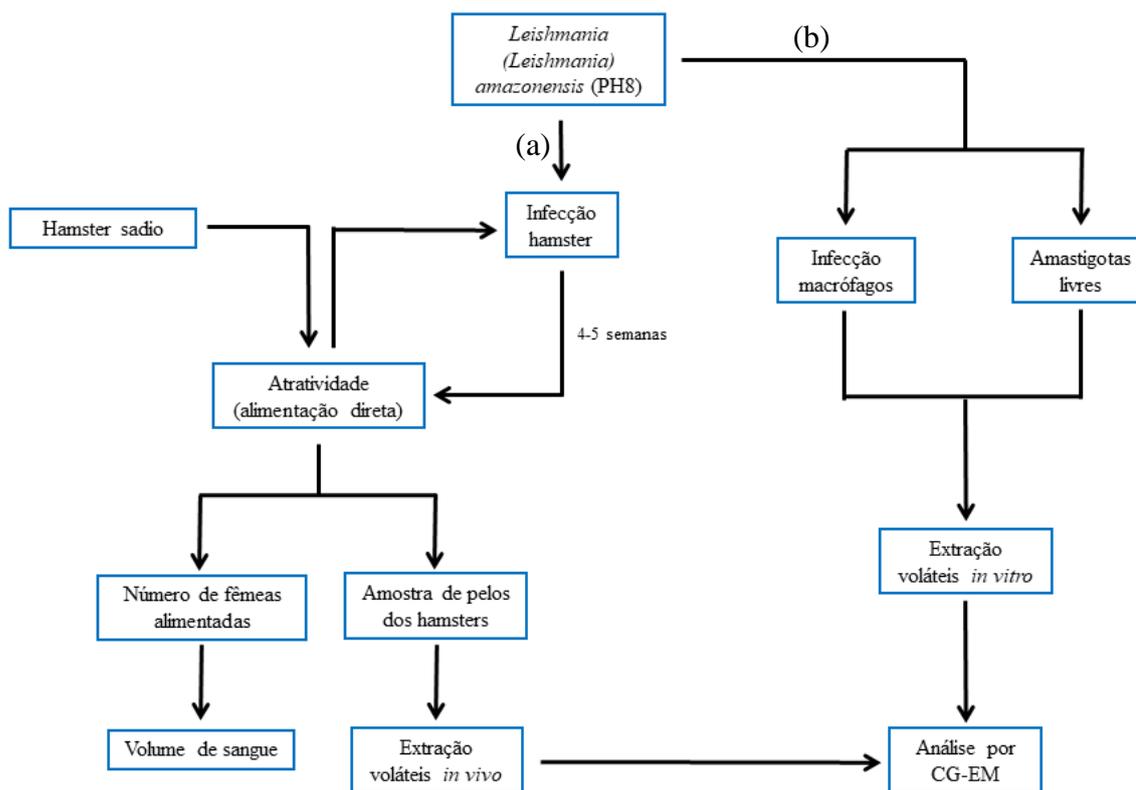
3.2 Objetivos específicos

- ✓ Avaliar a quantidade de sangue ingerida pelos flebotomíneos alimentados em hamsters não infectados e infectados.
- ✓ Identificar os COV emitidos pelos hamsters não infectados e infectados.
- ✓ Analisar os COV emitidos em cultura de macrófagos infectados ou não com *L. (L.) amazonensis* e de amastigotas livres dessa espécie.

4 MATERIAL E MÉTODOS

O presente estudo foi realizado em diferentes etapas para a verificação dos objetivos propostos: atratividade de hamsters sadios e infectados para *Lu. longipalpis*; análise dos COV liberados pelos animais nas duas condições testadas e análise dos COV liberados em culturas de células, conforme esquematizado abaixo (Figura 5).

Figura 5. Fluxograma geral das etapas realizadas durante a execução experimental do estudo. (a) delineamento dos testes realizados a partir de infecção *in vivo*; (b) delineamento dos testes realizados a partir de infecção *in vitro*.



4.1 Flebotomíneos

A colônia de *Lu. longipalpis* utilizada no presente estudo foi obtida inicialmente no ano de 2019 (feromônio: sobraleno) junto ao grupo da Profa. Dra. Eunice Aparecida Bianchi Galati, da Faculdade de Saúde Pública na Universidade de São Paulo (USP). Atualmente, vem sendo mantida no laboratório de Parasitologia da Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara (FCFAR/UNESP) de acordo com a mesma metodologia utilizada para *Ny. neivai* (GOULART et al., 2015, 2017) com algumas modificações específicas.

Para os testes de atratividade foram utilizadas fêmeas de *Lu. longipalpis* com idade entre 7-10 dias, da geração F2 até F19. Até o momento dos testes, as fêmeas não recebem nenhuma fonte de alimentação sanguínea, apenas de solução de sucrose 30% até cerca de cinco horas antes dos testes.

4.2 Infecção dos hamsters

Todas as cepas de *Leishmania* utilizadas no presente estudo são mantidas no Laboratório de Estudos de Biologia da Infecção por *Leishmania* (LEBIL) do Instituto de Biologia da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) pelo Prof. Dr. Danilo Ciccone Miguel.

Para a realização de testes iniciais, foi utilizada uma cepa de *L. (L.) amazonensis* (IFLA/BR/1967/PH8), inicialmente isolada de flebotomíneos da espécie *Bi. flaviscutellata*, para infecção dos hamsters. Foram inoculados com agulha de insulina 50 µL de PBS contendo 2×10^6 promastigotas de fase estacionária de *L. (L.) amazonensis* por coxim plantar da pata posterior esquerda. A pata direita não foi inoculada para servir como padrão de controle não infectado individual.

Após a infecção no LEBIL, os hamsters foram transferidos e mantidos no Biotério do Departamento de Ciências Biológicas da FCFAr/UNESP. Em todos os testes foram utilizados hamsters machos e os animais foram anestesiados via intramuscular de acordo com o peso de cada animal com uma dose composta por ketamina 10% (120mg kg⁻¹) + xilazina 2% (5mg kg⁻¹) (ERHARDT et al., 1984).

A atratividade e os voláteis emitidos pelos animais foram avaliados em momentos diferentes para um mesmo animal: previamente à infecção e cerca de cinco semanas após a infecção por *L. (L.) amazonensis*.

Após a inoculação de *L. (L.) amazonensis* para infecção dos hamsters, foi feito o acompanhamento semanal dos animais para avaliação do aparecimento de edema (fase assintomática) e também do aparecimento de úlcera (fase sintomática) na pata inoculada. O peso dos animais também foi acompanhado semanalmente.

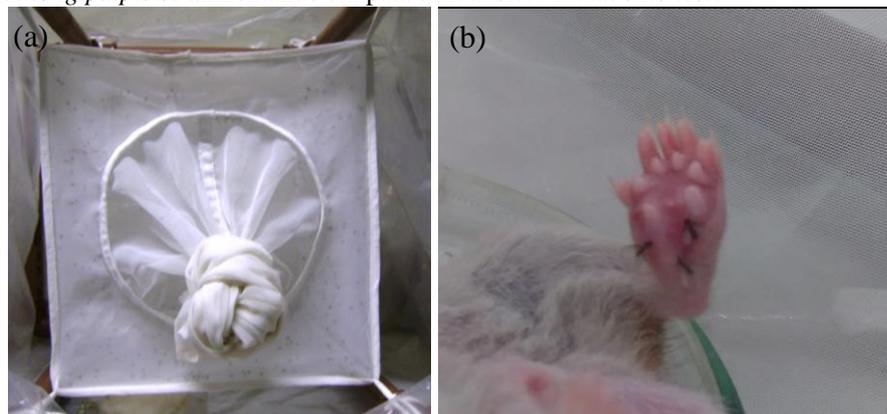
Após a realização de todos os experimentos propostos, foi feita a verificação da infecção dos animais, por meio do crescimento da *Leishmania* em meio de cultura a partir do local do inoculo e quantificação dos parasitos por grama de lesão. Tal quantificação foi feita por meio da metodologia de diluição limitante (LIMA; BLEYENBERG; TITUS, 1997; TITUS et al., 1985).

4.3 Avaliação da taxa de alimentação

A avaliação da taxa alimentação das fêmeas de flebotomíneos foi realizada em gaiolas de *voil* (30 x 30 x 30 cm), também denominadas de gaiolas de Barraud (Figura 6a).

Inicialmente, um hamster não infectado foi anestesiado e colocado dentro de uma gaiola de *voil* contendo 40 casais de *Lu. longipalpis*, onde foi mantido por um período de aproximadamente 45-60 minutos para a alimentação das fêmeas dos flebotomíneos (Figura 6b).

Figura 6. (a) Gaiola de Barraud utilizada nos testes de alimentação das fêmeas de flebotomíneos; (b) fêmeas de *Lu. longipalpis* se alimentando em pata de hamster utilizado no teste.



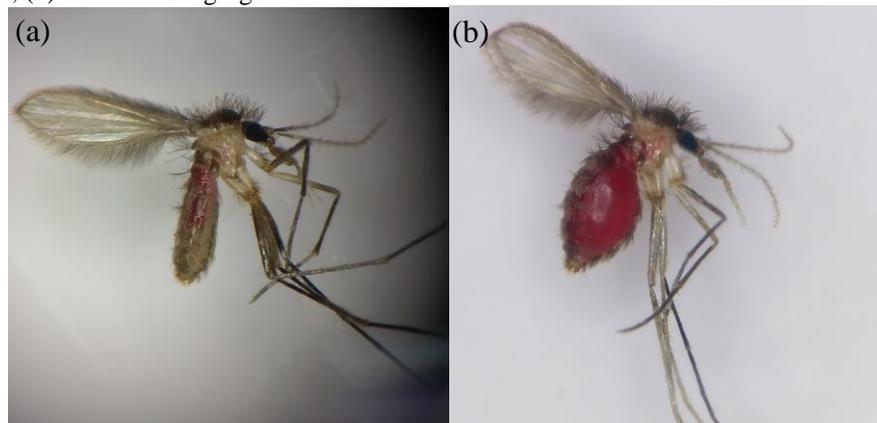
Fonte: própria autora.

Após cada teste, o número de fêmeas alimentadas em cada um dos animais foi quantificado para obtenção da taxa de atratividade das fêmeas e as fêmeas alimentadas foram utilizadas para avaliação do volume de sangue ingerido por cada inseto.

Passado o teste inicial com o animal não infectado, foi realizada a etapa de infecção com *L. (L.) amazonensis* e verificou-se novamente a atratividade do mesmo animal cerca de 4-5 semanas após a infecção, seguida pela avaliação do volume de sangue ingerido por cada fêmea.

Foram realizados testes de atratividade para *Lu. longipalpis*, com um total de 10 hamsters, não infectados e após a infecção com *L. (L.) amazonensis*. Como forma de evitar maiores perdas para a continuidade da colônia, principalmente com os hamsters não infectados, optou-se por utilizar uma amostragem randômica ($n=5$) das fêmeas alimentadas para avaliação do volume de sangue ingerido, até que fosse adquirido um total de 30 fêmeas alimentadas para cada um dos grupos – não infectado e pós-infecção. Tal amostragem permitiu a seleção de fêmeas em diferentes níveis de repasto sanguíneo, desde as com pouca ingestão de sangue até fêmeas totalmente ingurgitadas (Figura 7).

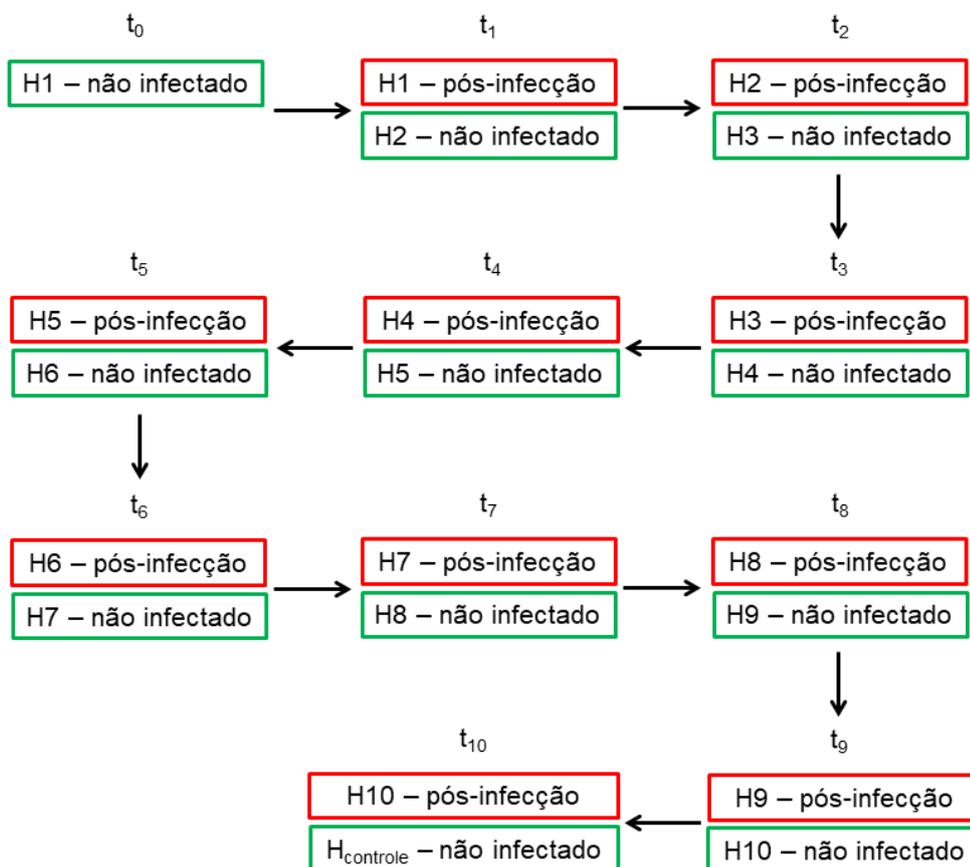
Figura 7. Fêmeas de *Lu. longipalpis* com diferentes níveis de ingestão sanguínea. (a) parcialmente ingurgitada; (b) totalmente ingurgitada.



Durante os testes que foram realizados, as médias de temperatura, umidade e pressão atmosférica foram de 26,9°C, 67,6% e 936,7 hPa, respectivamente.

Com o intuito de evitar um possível viés ocasionado pelas condições do dia de alimentação de cada animal, todos os testes sempre foram efetuados com um animal não infectado e um infectado em um mesmo dia, conforme demonstrado no fluxograma (Figura 8).

Figura 8. Fluxograma dos testes de alimentação realizados com os hamsters não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis* para *Lu. longipalpis*. Intervalo entre t_0 e t_1 foi de aproximadamente 30-40 dias e assim sucessivamente entre os demais tempos.



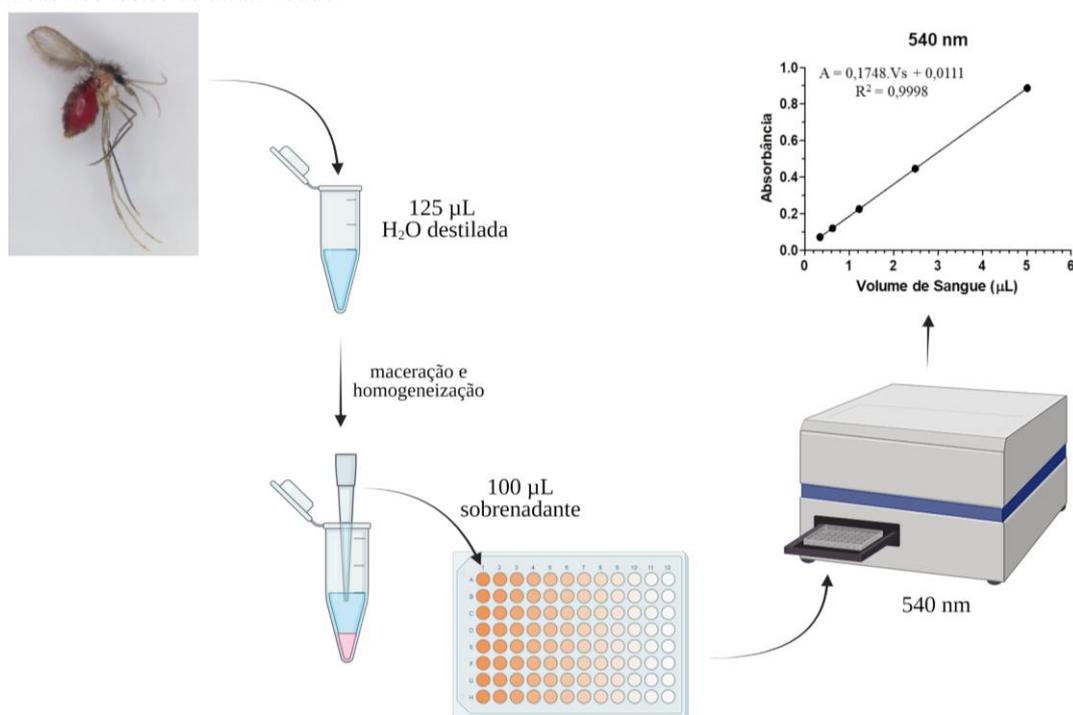
4.4 Avaliação do volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos

A estimativa do volume de sangue ingerido por cada uma das fêmeas alimentadas nos testes de atratividade por meio de alimentação direta das fêmeas de flebotomíneos em gaiolas é feita a partir de curva padrão de absorbância versus volume de sangue já padronizada para os flebotomíneos (DA ROCHA SILVA et al., 2019). Tal metodologia foi adaptada de estudo realizado para avaliação da atratividade e volume de sangue ingerido para *Aedes aegypti* (MACIEL et al., 2014).

Após cada um dos testes de atratividade, os insetos separados para a avaliação do volume de sangue foram colocados em congelador durante 30 minutos e após esse tempo as fêmeas foram individualizadas em microtubos de 1,7 mL contendo 125 μL de H_2O deionizada.

Os insetos foram então macerados com um pistão plástico e, após homogeneização, 100 μL do sobrenadante foram transferidos para uma placa de 96 poços para leitura das absorbâncias a 540 nm, comprimento de onda de absorbância máxima da hemoglobina. A partir dos valores de absorbância obtidos para cada um dos insetos, o volume de sangue ingerido por eles foi calculado a partir da equação da reta da curva padrão obtida previamente (Figura 9).

Figura 9. Esquema geral de metodologia utilizada para avaliação do volume de sangue ingerido pelas fêmeas nos testes de atratividade.



4.5 Identificação dos voláteis emitidos pelos animais

Para identificação dos voláteis emitidos pelos hamsters, os animais foram previamente anestesiados e 50 mg de pelos da região dorsal foram retirados com auxílio de uma tesoura de ponta curva. Até o momento da extração para análise dos voláteis, as amostras de pelos foram acondicionadas individualmente em placas de Petri fechadas com Parafilm® e mantidas em freezer (-20°C).

No momento da realização da etapa de extração dos voláteis, os pelos foram acondicionados em *vials* de 20 mL específicos para extração em *headspace* e aquecidos em banho-maria para melhor liberação dos compostos voláteis, que foram adsorvidos por uma fibra de SPME (Figura 10) (DE OLIVEIRA et al., 2008).

Figura 10. *Vials* utilizados para acondicionamento das amostras durante as extrações, com fibra de SPME inserida para adsorção dos voláteis.



Fonte: própria autora.

Após cada uma das extrações, as fibras foram inseridas no injetor do cromatógrafo gasoso acoplado a um espectrômetro de massas – CG-EM (Shimadzu GC-MS QP2010 Plus) por 5 minutos para dessorção dos voláteis a 240°C em modo *splitless* sob fluxo de gás de arraste (He 0,7 mL min⁻¹) e separados na coluna cromatográfica RTx-5MS (30 m x 0,25 mm; 0,25 µm – sílica fundida 5% difenil/95% dimetil polissiloxano). As temperaturas da fonte de íons e da interface foram ajustadas em 250°C, com varredura de espectros de 40 a 400 *m/z* e impacto de ionização de 70 eV.

Todas as análises por CG-EM foram realizadas no Laboratório de Ensino e Pesquisa Analítica do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo, Câmpus Matão (IFSP Matão), em parceria com o Prof. Dr. Christiann Davis Tosta.

Previamente às análises para extração e identificação dos voláteis em si, foi necessária a realização de padronização do revestimento da fibra de SPME e da temperatura e tempo de extração que seriam utilizados.

4.5.1 Padronização fibra SPME

Para a etapa de padronização do revestimento da fibra de SPME a ser utilizada, a amostra de pelos de um hamster sadio foi acondicionada em um *vial* de 20 mL, que foi aquecido em banho-maria a 90°C.

Após atingir tal temperatura, foram inseridas no septo do *vial* quatro fibras de SPME compostas por diferentes tipos e espessuras de revestimentos, sendo eles: 50/30 µm divinilbenzeno/Carboxen[®]/polidimetilsiloxano (DVB/CAR/PDMS – 24 Ga Gray), 65 µm polidimetilsiloxano/divinilbenzeno (PDMS/DVB – 24 Ga Pink), 85 µm Carboxen[®]/polidimetilsiloxano (CAR/PDMS – 24 Ga Lt. Blue) e 85 µm poliacrilato (PA – 24 Ga White). As fibras foram mantidas durante 30 minutos para extração dos voláteis por *headspace* e um *vial* vazio foi utilizado como controle negativo.

Após a etapa de extração, as fibras foram inseridas no injetor do cromatógrafo e a temperatura da coluna foi programada da seguinte maneira: 70°C por 2 minutos; 70-120°C a 2°C min⁻¹; 120°C por 20 minutos; 120-200°C a 4°C min⁻¹ e 200°C por 5 minutos (DA ROCHA SILVA et al., 2019).

A partir dos cromatogramas obtidos, foi avaliado o número de picos totais e a área total para cada um dos revestimentos para a escolha da melhor fibra.

4.5.2 Padronização temperatura/tempo de extração

Após a padronização do tipo de fibra de SPME a ser utilizada (PDMS/DVB), foi realizada uma etapa para padronização da melhor temperatura e do melhor tempo de extração dos voláteis utilizando o revestimento de SPME padronizado.

Para tal etapa, foram utilizados três *vials* contendo 50 mg de pelos de hamster sadio cada um e cada um dos *vials* foi aquecido em banho-maria a uma temperatura de extração diferente (50°C, 70°C e 90°C). Para cada temperatura foram testados três tempos de extração diferentes (10, 30 e 50 minutos).

Na tentativa de se obter uma melhor separação e resolução dos picos, foi realizada uma alteração no programa de temperatura da coluna cromatográfica, que foi a seguinte: 40°C por 10 minutos; 40-130°C a 3°C min⁻¹; 130°C por 10 minutos; 130-245° a 3°C min⁻¹ e 245°C por 5 minutos (adaptado de TAVARES et al., 2018).

A partir dos cromatogramas obtidos, foi avaliado o número de picos totais e a área total para cada uma das combinações de temperatura/tempo de extração testadas.

4.5.3 Extração e identificação dos voláteis

Para a etapa de extração e identificação dos voláteis emitidos pelos animais quando não infectados e após a infecção por *L. (L.) amazonensis*, amostras de pelos de 50 mg foram obtidas de cada animal no mesmo dia da realização de cada um dos testes de atratividade.

Tais amostras foram mantidas no congelador, acondicionadas individualmente até o momento da extração para análise dos voláteis de cada um dos animais nas duas condições testadas.

A extração dos voláteis foi realizada com as amostras de pelos dos hamster acondicionadas individualmente em *vial* de 20 mL, que foram aquecidos em banho-maria a 90°C, por um período de 50 minutos.

Na tentativa de se obter uma melhor resolução dos picos, foi realizada uma nova alteração no programa de temperatura da coluna cromatográfica: 40°C por 2 minutos; 40-140°C a 4°C min⁻¹; 140°C por 4 minutos; 140-245°C a 2°C min⁻¹ e 245°C por 2 minutos (adaptado de MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014 e TAVARES et al., 2018).

Tais condições do programa de temperatura do forno da coluna cromatográfica foram testadas com uma amostra de pelos de um hamster sadio, que teve seus voláteis extraídos de acordo com as condições já estabelecidas.

A partir dos espectros de massas obtidos de cada pico dos cromatogramas, foi feita a identificação dos compostos com auxílio de bibliotecas próprias (NIST 08, NIST 98v101, Wiley MS 229 e FFNSC 1.3), considerando similaridade acima de 75% e também pelo cálculo dos índices de retenção (IR) de cada composto, feito a partir dos tempos de retenção de uma mistura de *n*-alcanos comercial (C8-C20 – Sigma-Aldrich®) analisada sob as mesmas condições cromatográficas das amostras. O IR de cada composto foi calculado de acordo com a seguinte equação (Van den Dool and Kratz):

$$IR = 100n + 100 \times \frac{(trX - trZ)}{tr(Z+1) - trZ} \text{ onde,}$$

n = número de carbonos do *n*-alcano com o tempo de retenção anterior a composto analisado;

trX = tempo de retenção do composto analisado;

trZ = tempo de retenção do *n*-alcano imediatamente anterior ao composto analisado;

trZ+1 = tempo de retenção do *n*-alcano localizado imediatamente após o composto analisado.

Os IR calculados são comparados com dados da literatura por meio de duas bases de dados: [<https://webbook.nist.gov/chemistry/name-ser/>](https://webbook.nist.gov/chemistry/name-ser/) e [e <http://www.odour.org.uk/lriindex.html>](http://www.odour.org.uk/lriindex.html).

Após o cálculo dos IR, os compostos obtidos a partir das análises das amostras de pelos dos hamsters foram identificados a partir das bibliotecas de espectros de massas e dos índices de retenção de cada pico.

4.6 Infecção e análise de voláteis *in vitro*

4.6.1 Cultura de macrófagos

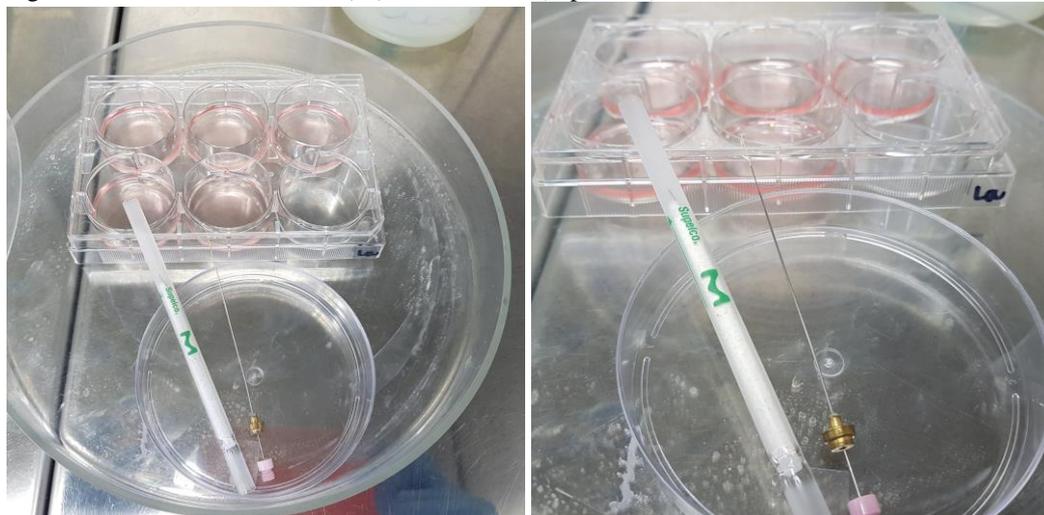
Inicialmente foi realizada a extração da medula óssea de fêmur e tíbia de camundongos BALB/c. As células foram então plaqueadas com meio RPMI (2030) e mantidas em estufa com CO₂ (5%) a 37°C por sete dias, para obtenção de macrófagos totalmente diferenciados.

Os macrófagos obtidos foram plaqueados em duas placas de seis poços, em cinco dos poços, na proporção de $1,5 \times 10^6$ macrófagos por poço. Em uma das placas os macrófagos permaneceram sem infecção e na outra foi realizada etapa de infecção com a mesma cepa de *L. (L.) amazonensis* utilizada para a infecção dos hamsters (PH8).

Após a etapa de infecção dos macrófagos, foi feita a contagem para determinar a proporção de macrófagos infectados e a quantidade de amastigotas a cada 100 macrófagos. Além disso, foi realizado procedimento para extração de possíveis voláteis produzidos pelos macrófagos infectados e/ou não infectados.

A extração dos possíveis voláteis produzidos foi realizada por meio de dois diferentes tipos de polímeros – Tenax[®] TA (Supelco) e fibra de SPME revestida por PDMS/DVB – por um período de 24 horas (Figura 11).

Figura 11. Imagens representativas do procedimento usado para a extração de voláteis produzidos por macrófagos infectados ou não com *L. (L.) amazonensis* (cepa PH8).



Após a extração dos voláteis, foi feita a fixação das culturas com metanol, que foram coradas com Kit InstantProv – Panótico, para observação das formas por microscopia óptica.

4.6.2 Amastigotas livres

Nesta etapa de execução do trabalho, foram obtidas formas amastigotas livres de duas maneiras diferentes: amastigotas-*like*, obtidas a partir da diferenciação das formas promastigotas; e amastigotas propriamente ditas, obtidas a partir da lesão de hamster utilizado nas etapas anteriores do trabalho.

Para a obtenção das formas amastigotas-*like* livres, promastigotas de *L. (L.) amazonensis* (PH8) foram incubadas em meio de cultura com pH de 5,2. Após a diferenciação das promastigotas em amastigotas, foi realizado o plaqueamento em placa de seis poços para extração dos voláteis, seguindo a mesma metodologia utilizada para a cultura de macrófagos, conforme descrito no item anterior (4.6.1).

As formas amastigotas propriamente ditas foram obtidas após a eutanásia dos hamsters, a partir da lesão utilizada para a etapa de quantificação dos parasitos (item 4.2) e após a obtenção de quantidade suficiente de amastigotas, foi realizado o plaqueamento em placa de seis poços para extração dos voláteis, também seguindo a mesma metodologia utilizada anteriormente (item 4.6.1).

Também foram realizados esfregaços a partir do plaqueamento, que foram fixados com metanol e corados com Kit InstantProv – Panótico, para observação das formas por microscopia óptica.

4.6.3 Análise dos voláteis

Como controle das extrações dos voláteis das culturas de macrófagos e das formas amastigotas, foi realizada a extração dos voláteis de uma placa de seis poços contendo apenas meio de cultura, seguindo as mesmas condições descritas acima.

As fibras de SPME utilizadas para a extração dos voláteis *in vitro* foram inseridas individualmente no injetor do CG-EM por 5 minutos e a análise de tais voláteis foram realizadas seguindo as condições cromatográficas determinadas após toda a etapa de padronização ter sido concluída (item 4.5.3).

Para as extrações realizadas com o polímero Tenax[®] TA, 5 mL de uma mistura de hexano:acetona (1:1) foram passados por cada um dos tubos de vidro contendo o polímero para retirada dos compostos extraídos das amostras. O volume de solvente de cada amostra foi

coletado individualmente em *vials* de 10 mL e foi reduzido pela metade sob fluxo de gás nitrogênio, de maneira a se concentrar os compostos presentes em cada amostra.

Após a concentração das amostras, foi injetado 1 µL de cada uma no CG-EM com o auxílio de uma micro seringa de 10 µL (Hamilton). Após a injeção, a análise também foi realizada sob o mesmo programa de temperaturas descrito no item 4.5.3, com acréscimo de um *cut-off* de quatro minutos, devido ao solvente.

Os compostos voláteis obtidos nessas análises foram analisados e tentativamente identificados a partir das bibliotecas e dos índices de retenção de cada pico.

4.7 Análise dos dados

Para os testes de atratividade por meio da alimentação direta dos insetos, o número de fêmeas alimentadas e o volume de sangue ingerido por cada fêmea foram analisados estatisticamente por meio do teste t (GraphPad Prism 5.03). As áreas relativas dos picos dos compostos identificados por CG-EM foram submetidas à análise de componentes principais (*Principal Components Analysis* - PCA) e posteriormente à análise de agrupamento hierárquico (*Hierarchical Cluster Analysis* – HCA) (XLSTAT[®] 2022 by Addinsoft).

4.8 Ética

O estudo foi submetido e aprovado pela Comissão de Ética no Uso de Animais (CEUA) da Faculdade de Ciências Farmacêuticas do Campus de Araraquara da UNESP (Protocolo CEUA/FCF/CAR 16/2018) (Apêndice A).

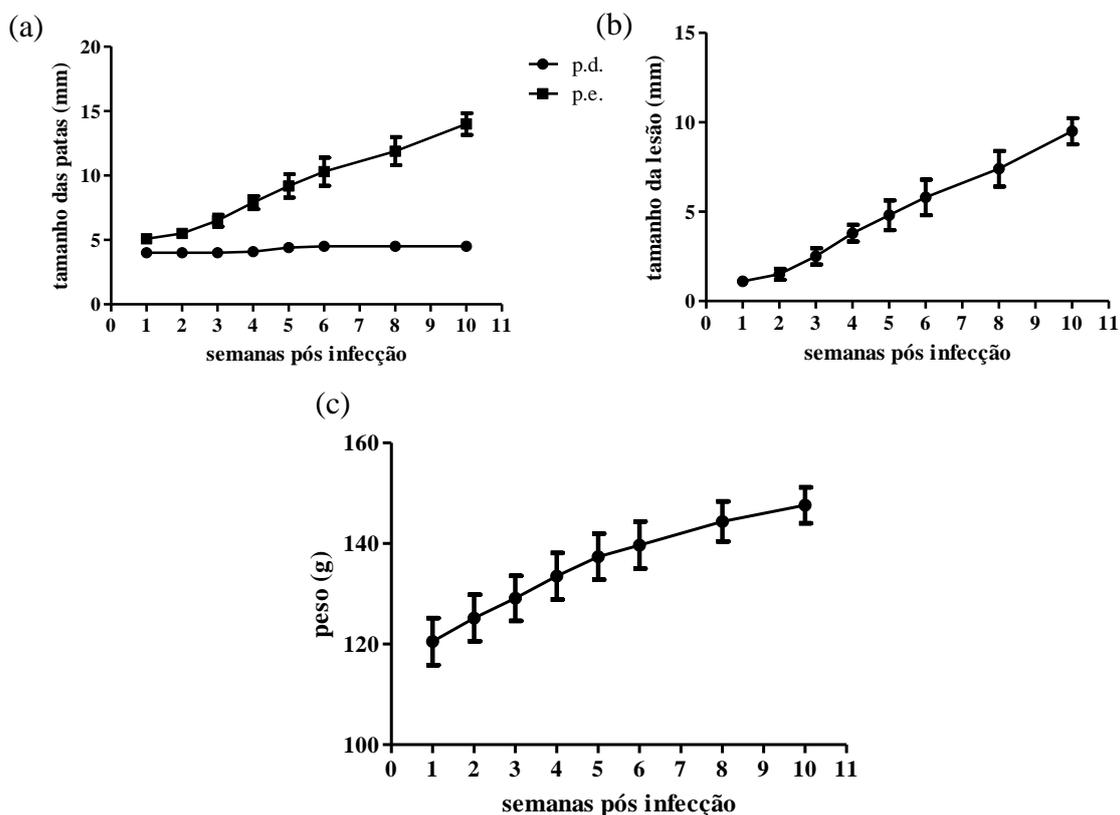
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Infecção dos hamsters

Os hamsters que foram infectados com a cepa de *L. (L.) amazonensis* foram acompanhados semanalmente para verificação do curso da infecção.

Dentro desse acompanhamento, foram realizadas as medições das patas infectadas (p.e.) e das patas controle não infectadas (p.d.), além da pesagem dos animais. Por meio dos dados obtidos durante o acompanhamento dos animais infectados (10 semanas pós-infecção), pode ser verificado que houve um aumento do tamanho da pata infectada a partir da segunda semana após a infecção (Figura 12a). A diferença entre os tamanhos das patas infectadas e das patas controle é apresentada como tamanho da lesão (Figura 12b).

Figura 12. Dados gerais dos animais após a infecção por *L. (L.) amazonensis*. (a) tamanho das patas infectadas e não infectadas após infecção; (b) tamanho da lesão das patas infectadas; (c) peso dos animais após infecção. p.d.: pata direita (não infectada); p.e.: pata esquerda (infectada).



Os hamsters apresentaram o edema característico da infecção por *L. (L.) amazonensis* e ganho de peso no período (Figura 12c).

5.2 Avaliação da taxa de alimentação

Quando realizados os testes de alimentação direta das fêmeas de *Lu. longipalpis*, foram obtidas respostas variáveis entre os hamsters utilizados. De tal maneira, não foi possível observar uma influência da infecção por *L. (L.) amazonensis* na atratividade dos animais, uma vez que para mais da metade deles – seis – foi obtida uma taxa de alimentação menor quando infectado (Tabela 1).

Tabela 1. Número de fêmeas alimentadas em cada um dos hamsters (antes e após a infecção) nos testes de atratividade por meio de alimentação direta das fêmeas de flebotomíneos (n = 40/hamster; n_{TOTAL} = 400 para cada condição testada). p=0,9341.

Hamster	Fêmeas alimentadas	Fêmeas alimentadas	Tamanho da lesão (mm)	Efeito da infecção
	Antes da infecção	Após infecção		
1	30 (75,00%)	29 (72,50%)	9	(-)
2	32 (80,00%)	26 (65,00%)	8	(-)
3	34 (85,00%)	24 (60,00%)	2	(-)
4	32 (80,00%)	27 (67,50%)	2	(-)
5	19 (47,50%)	26 (65,00%)	5	(+)
6	23 (57,50%)	20 (50,00%)	4	(-)
7	30 (75,00%)	24 (60,00%)	7	(-)
8	15 (37,50%)	27 (67,50%)	6	(+)
9	27 (67,50%)	34 (85,00%)	3	(+)
10	15 (37,50%)	22 (55,00%)	2	(+)
Somatória	257 (64,25%)	259 (64,75%)	-	(+)
Média	25,7 (64,25%)	25,9 (64,75%)	4,8	(+)

Embora ao considerar os resultados gerais o efeito da infecção por *L. (L.) amazonensis* seja positivo, tal resultado não apresentou diferença estatística (p>0,05), uma vez que as médias de alimentação foram bem próximas para os dois grupos. Além disso, o tamanho da lesão não foi um fator capaz de influenciar na taxa de alimentação após a infecção dos animais, uma vez que animais com lesões maiores apresentaram taxas menores de alimentação após a infecção.

A diferença de atratividade de hospedeiros quando infectados, embora não se conheça ao certo por quais mecanismos, é atualmente bem elucidada para hospedeiros infectados por parasitas do gênero *Plasmodium* para culicídeos não infectados (BATISTA; COSTA; SILVA, 2014; CORNET et al., 2013; DE MORAES et al., 2018; DÍEZ-FERNÁNDEZ et al., 2020; LACROIX et al., 2005).

Para espécies de flebotomíneos do Novo Mundo, tal diferença na atratividade é relatada a LV, onde hamsters infectados com *L. (L.) i. chagasi* foram mais atrativos para *Lu. longipalpis* (NEVATTE et al., 2017; O'SHEA et al., 2002). Ainda para a LV, também foi

observada uma maior atratividade de cães infectados com *L. (L.) i. chagasi* para *Phlebotomus perniciosus*, principal vetor na região do Mediterrâneo (CHELBI et al., 2021).

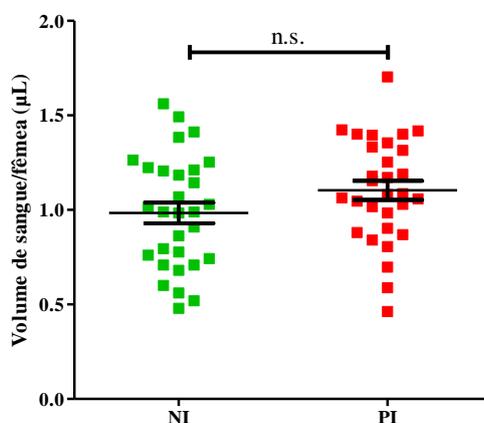
Embora utilize espécies do agente etiológico, do hospedeiro e de flebotomíneos diferentes, o presente estudo corrobora o já observado anteriormente para a LTA, onde camundongos BALB/c infectados com *L. (V.) braziliensis* não apresentaram maior atratividade quando comparado com camundongos sadios (DA ROCHA SILVA et al., 2019). Tal resposta observada para a LTA pode ser devido a diferenças na interação hospedeiro-parasita-vetor que ocorrem quando comparada com a LV, uma vez que dependendo da espécie de *Leishmania* a resposta imune e demais fatores envolvidos na infecção são alterados (FALCÃO et al., 2016; REBOUÇAS et al., 2021).

5.3 Avaliação do volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos

Além da avaliação da atratividade dos hamsters antes e após a infecção por *L. (L.) amazonensis*, também foi avaliado o volume de sangue ingerido pelas fêmeas de flebotomíneos que se alimentaram nos animais em cada uma das condições. Um possível aumento no volume de sangue poderia ser esperado, uma vez que facilitaria a aquisição de parasitas pelo inseto, favorecendo a manutenção do ciclo da doença.

O volume de sangue ingerido pelas fêmeas que se alimentaram nos hamsters foi calculado individualmente a partir de curva padrão obtida previamente. Foram obtidas médias de 0,98 μ L e de 1,10 μ L de sangue ingerido para as fêmeas que se alimentaram nos hamsters não infectados e infectados, respectivamente ($p=0,1333$) (Figura 13).

Figura 13. Volume de sangue ingerido pelos flebotomíneos em cada um dos hamsters nos testes de atratividade por meio de alimentação direta das fêmeas de flebotomíneos (n=30/cada condição testada). NI: não infectado; PI: pós-infecção. n.s. = não significativo.



O presente estudo não demonstrou diferença no volume de sangue ingerido quando o hospedeiro é infectado por *L. (L.) amazonensis*, algo que também já foi observado para *L. (V.) braziliensis* (DA ROCHA SILVA et al., 2019). Por outro lado, quando os flebotomíneos estão com infecção por alguma espécie de *Leishmania* já estabelecida, ocorre uma diminuição no volume de sangue ingerido por eles. A alteração se dá por meio de mudanças fisiológicas geradas pela formação de um bloqueio da válvula estomodeal dos insetos por um gel de proteofosfoglicano secretado por promastigotas de *Leishmania*. O bloqueio faz então com que ocorra uma menor alimentação dos insetos em um único hospedeiro, fazendo com que ele realize múltiplas picadas em diferentes hospedeiros, favorecendo assim a transmissão dos parasitas do gênero *Leishmania* (ROGERS, 2012; ROGERS; BATES, 2007).

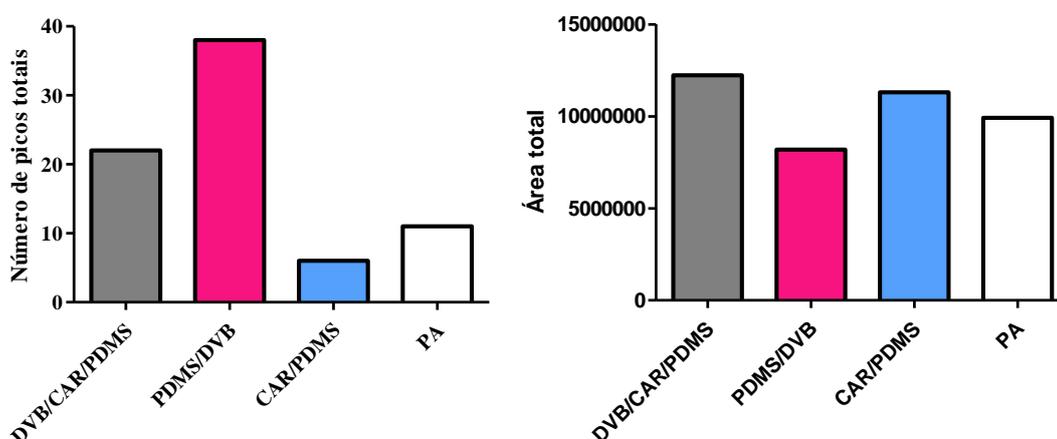
5.4 Identificação dos voláteis emitidos pelos animais

5.4.1 Padronização fibra SPME

Previamente às extrações dos voláteis, foram realizadas padronizações para escolha das melhores condições de extração. Em um primeiro passo, foi padronizado o melhor revestimento da fibra de SPME a ser utilizada nos próximos testes.

Para a escolha do melhor revestimento da fibra de SPME, foram avaliados a área total e o número de picos totais obtidos nos cromatogramas (Apêndice B) para cada um dos quatro tipos de revestimentos testados (Figura 14).

Figura 14. Número de picos totais e área total dos picos obtidos a partir de amostras de pelos de hamster para os diferentes revestimentos testados das fibras de SPME. DVB: divinilbenzeno; CAR: Carboxen®; PDMS: polidimetilsiloxano; PA: poliacrilato.



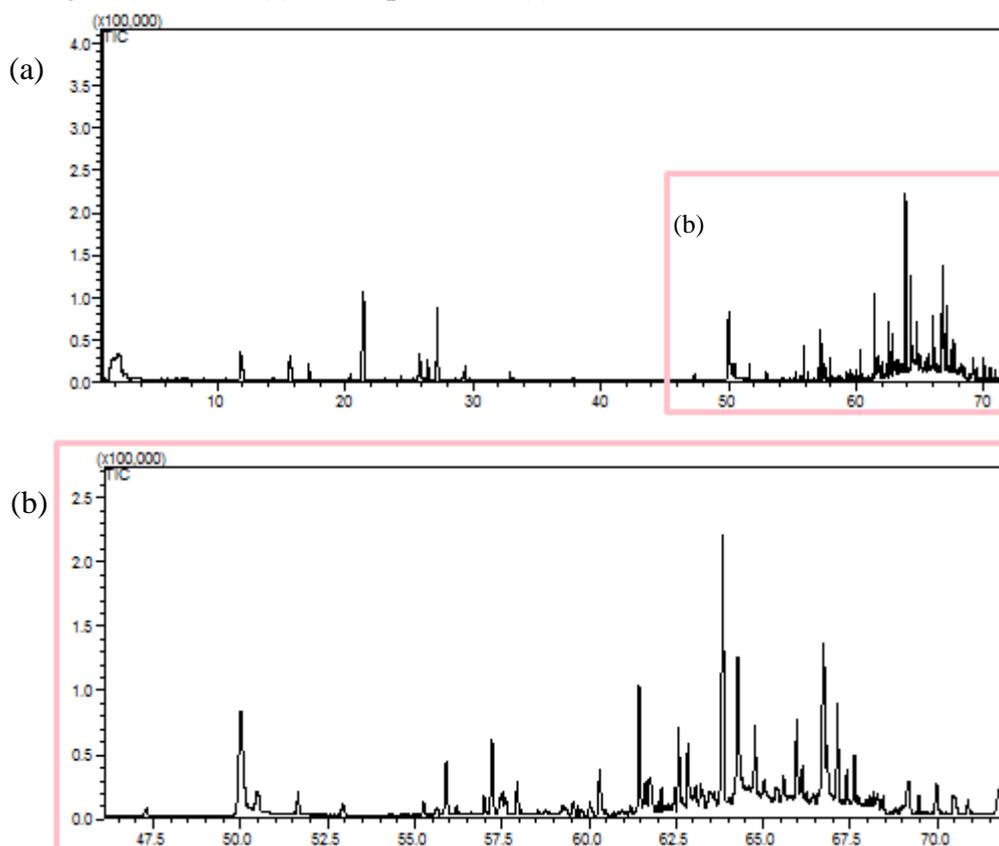
Dentre os quatro revestimentos testados, a fibra composta por PDMS/DVB foi a que apresentou um maior número de picos (38), seguida por DVB/CAR/PDMS (22), PA (11) e CAR/PDMS (6). Analisando a área total dos picos obtidos para cada revestimento, a fibra

composta por DVB/CAR/PDMS apresentou uma área maior, no entanto a menor área apresentada pela fibra de PDMS/DVB ressalta uma maior sensibilidade de tal revestimento para a amostra analisada, uma vez que uma menor área cobriu um maior número de compostos.

Dessa maneira, a fibra revestida por PDMS/DVB foi escolhida para as próximas etapas de extração dos voláteis, mesmo revestimento utilizado em outros trabalhos para a extração dos COV de pelos de camundongos, cães e seres humanos (DA ROCHA SILVA et al., 2019; MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014a; TAVARES et al., 2019).

Apesar de ter sido possível estabelecer o tipo de revestimento a ser utilizado para as próximas etapas, ainda foram necessários ajustes no programa de temperaturas da coluna cromatográfica para obtenção de picos com melhor resolução do que foi obtido na padronização da fibra de SPME (Figura 15a), onde é possível observar alguns picos com baixa resolução, principalmente na porção final do cromatograma (Figura 15b).

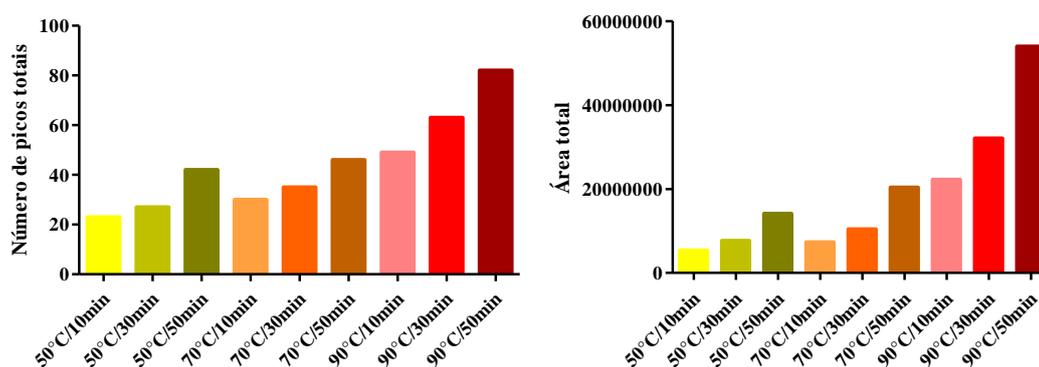
Figura 15. Cromatograma obtido nas condições testadas a partir da extração utilizando fibra de SPME revestida por PDMS/DVB. (a) cromatograma total; (b) zoom $t_R=45-72$ minutos.



5.4.2 Padronização temperatura/tempo de extração

Após a padronização do revestimento da fibra de SPME, foram realizadas extrações para padronização das melhores condições de temperatura e tempo de extração dos voláteis. Para as diferentes condições de temperatura e tempo de extração que foram testados, também foram avaliados a área total e o número de picos totais obtidos nos cromatogramas (Apêndice C) para cada uma das condições (Figura 16).

Figura 16. Número de picos totais e área total dos picos obtidos para cada uma das condições de temperatura/tempo de extração testadas.

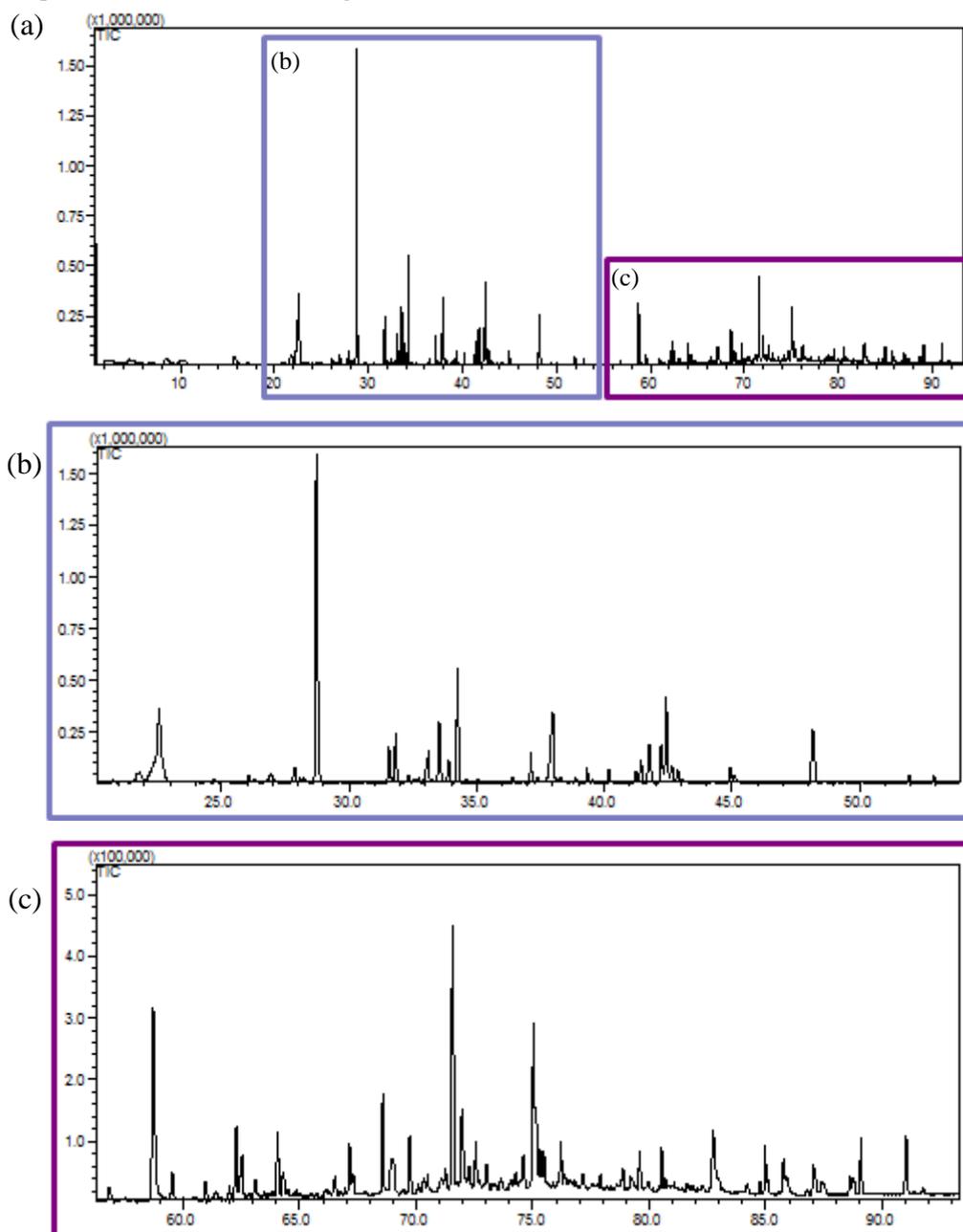


De acordo com o número de picos totais obtidos e área total dos picos, foi possível observar um aumento conforme o aumento do tempo e também da temperatura de extração. Dessa maneira, a melhor condição para extração dos voláteis foi a de 90°C por um período de 50 minutos, que apresentou um total de 82 picos.

A temperatura de extração que apresentou o melhor resultado se mostrou a mesma de outros trabalhos que utilizaram a mesma metodologia de extração. No entanto, o tempo de extração necessário para obtenção de um maior número de COV foi maior do que o utilizado para cães (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014a), camundongos (DA ROCHA SILVA et al., 2019) e seres humanos (TAVARES et al., 2019), que foram de 18, 30 e 40 minutos, respectivamente.

Com relação à resolução dos picos, foi possível obter melhor resultado do que o obtido anteriormente na etapa de padronização da fibra de SPME (Figura 17).

Figura 17. Cromatograma obtido para as melhores condições de temperatura/tempo de extração testadas (90°C por 50 minutos). (a) Cromatograma total; (b) zoom $t_R=20-55$ minutos; (c) zoom $t_R=55-93$ minutos.

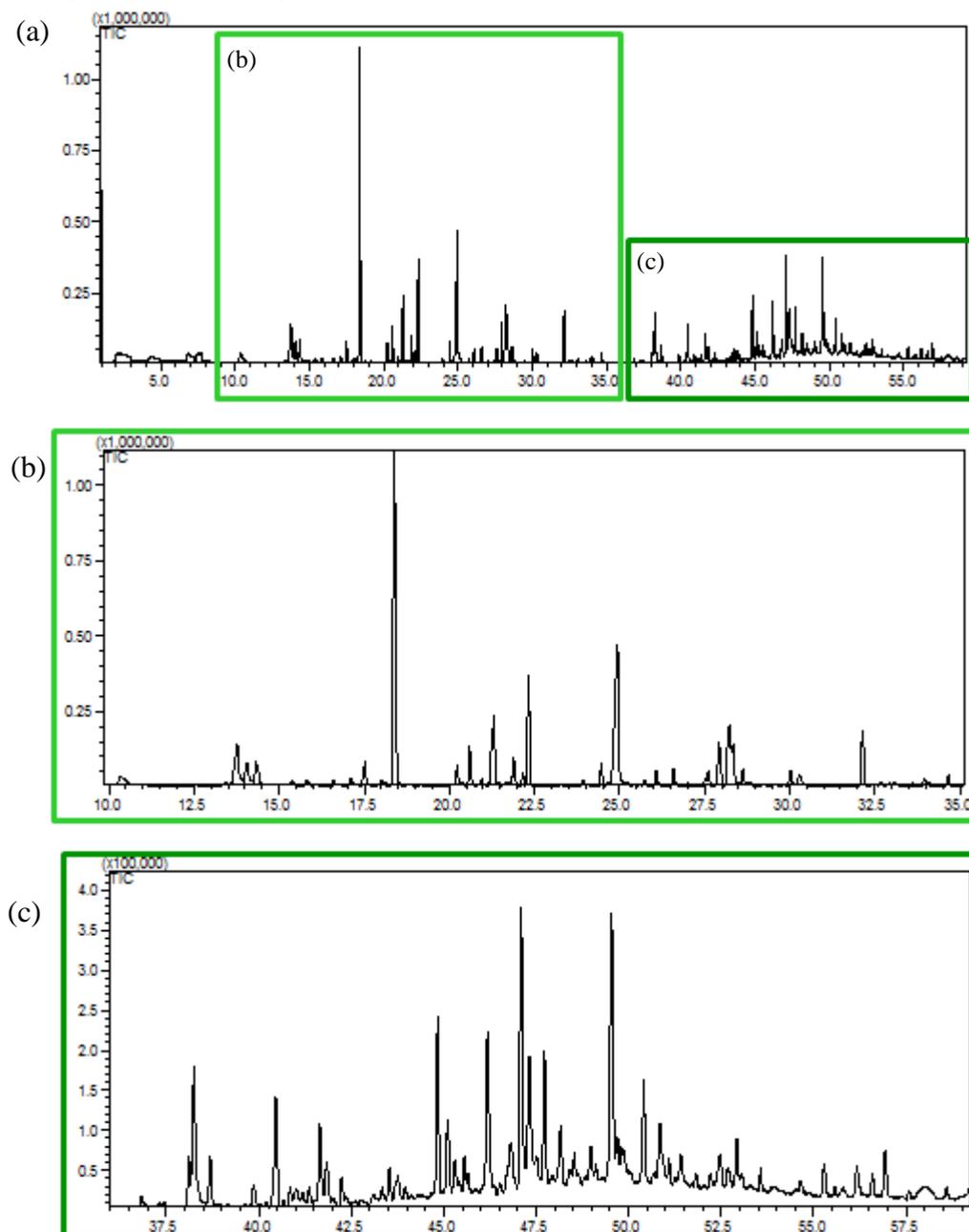


5.4.3 Extração e identificação dos voláteis

Apesar da melhor resolução dos picos para as corridas cromatográficas nas condições testadas nesta etapa, foi realizada mais uma modificação no programa de temperaturas da coluna cromatográfica para as próximas etapas: 40°C por 2 minutos; 40-140°C a 4°C min⁻¹; 140°C por 4 minutos; 140-245°C a 2°C min⁻¹ e 245°C por 2 minutos (adaptado de MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014 e TAVARES et al., 2018) (conforme descrito no item 3.5.3).

As novas condições no programa de temperaturas da coluna cromatográfica foram testadas antes de prosseguir com as análises dos voláteis dos animais testados. Foi possível verificar uma melhor resolução dos picos no cromatograma obtido (Figura 18).

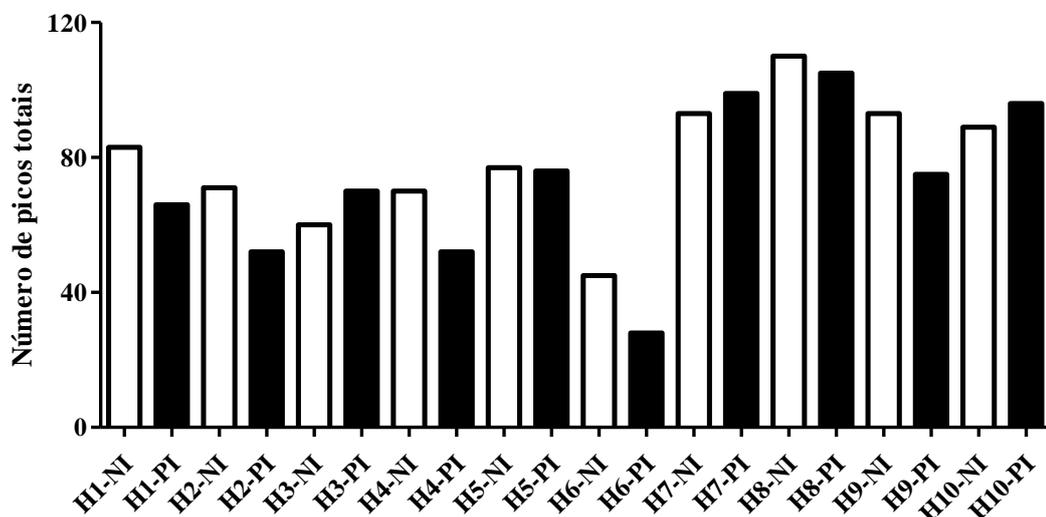
Figura 18. Cromatograma obtido após modificações no programa de temperatura da coluna cromatográfica. (a) Cromatograma total; (b) zoom $t_R=9-36$ minutos; (c) zoom $t_R=36-59$ minutos.



Após a integração dos picos dos cromatogramas dos COV obtidos a partir das amostras dos 10 hamsters que foram utilizados para os testes de atratividade para os flebotomíneos (Apêndice D), foi possível observar um perfil semelhante de picos para os

voláteis extraídos antes e após a infecção, com variações entre os números de picos totais obtidos para os animais (Figura 19).

Figura 19. Número de picos totais obtidos para os hamsters que tiveram a atratividade testada para a *Lm. longipalpis*. NI: não infectado; PI: pós-infecção.



Tal variação no número de picos totais entre os diferentes hamsters reforça mais uma vez que a variabilidade interindividual deve ser considerada como um fator importante ao se avaliar a atratividade de hospedeiros vertebrados frente a insetos vetores e também para a análise dos COV liberados pelos animais.

Após procedimento de identificação dos voláteis extraídos a partir das amostras de pelos dos hamsters utilizados nos testes de atratividade para os flebotomíneos, foi possível a identificação de 73 compostos (Tabela 2). Apenas os COV provenientes do hamster número 6 não foram identificados, devido a problemas técnicos durante o procedimento de extração e análise dos compostos.

Tabela 2. Compostos identificados, em ordem crescente de tempo de retenção (t_R) e com seus respectivos índices de retenção (IR) calculados e obtidos a partir das bases de dados. Valores indicam a área relativa do composto na amostra; -: indica ausência do composto na amostra. NI: não infectado; PI: pós-infecção.

	t_R (min)	IR calculado	IR literatura	Compostos	H1		H2		H3		H4		H5		H7		H8		H9		H10	
					NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI	NI	PI
1	10,242	903	902	heptanal	0,60	-	0,41	-	-	-	-	-	0,64	-	0,20	0,51	0,25	0,42	0,70	0,68	0,51	1,50
2	13,758	986	990	ácido hexanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,75	0,55	0,76	0,70	0,84	0,29	1,29
3	14,223	1005	1005	octanal	0,58	0,72	0,40	-	0,17	-	-	-	0,82	0,61	0,58	0,67	0,43	0,62	0,88	0,53	0,84	0,69
4	15,284	1034	1034	limoneno	0,73	-	-	-	-	-	-	-	0,94	-	-	-	-	-	-	-	-	-
5	15,320	1035	1029	2-etilhexan-1-ol	-	1,38	-	-	-	-	-	-	-	-	1,28	0,19	1,24	0,15	-	-	-	-
6	15,625	1042	1043	álcool benzílico	1,19	3,49	1,22	2,59	0,89	2,19	2,06	2,73	2,28	1,53	-	-	0,33	-	-	-	-	-
7	15,735	1049	1049	2-fenilacetaldéido	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,17	0,18	-	-	-	-
8	16,109	1068	1061	1-feniletanol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,53	-	-	-	-	-
9	16,280	1071	1068	1-feniletanona	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,85	-	-	-	-	-
10	17,003	1076	1072	octan-1-ol	0,45	0,81	0,50	-	0,28	0,76	0,56	-	0,68	0,52	-	0,38	0,10	0,35	0,28	0,49	0,26	0,38
11	17,525	1086	1083	ácido heptanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,30	0,64	0,38	0,29	0,44	-	0,71
12	17,702	1092	1089	terpinoleno	-	-	-	-	-	-	-	1,15	-	1,26	-	-	-	-	-	-	-	-
13	17,777	1093	1093	nonan-2-ona	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,30	-	0,19	0,25	0,17	-	-
14	18,287	1107	1109	nonanal	14,00	15,07	11,67	12,91	5,04	26,35	9,96	13,63	15,39	16,91	12,02	10,49	6,94	10,66	25,67	13,73	21,85	16,45
15	18,807	1134	1128	ácido 2-etil hexanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,55	0,10	-	-	-	-
16	20,493	1165	1163	(E)-non-2-enal	1,08	1,07	0,94	1,23	0,33	0,70	0,46	1,29	0,95	0,39	0,27	0,68	0,22	0,96	1,47	0,66	0,80	1,21
17	20,947	1176	1172	nonan-1-ol	0,69	1,96	0,57	0,99	1,40	2,27	3,02	1,04	1,22	1,08	1,20	0,13	1,01	0,17	0,29	0,31	-	0,15
18	21,253	1190	1192	ácido octanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,82	1,74	5,46	2,51	1,09	1,52	0,44	1,86
19	21,531	1191	1181	naftaleno	0,74	1,99	1,22	2,67	0,43	3,51	1,05	2,81	1,14	2,70	2,72	0,43	-	-	0,83	0,41	0,74	0,37
20	21,713	1194	1191	decan-2-ona	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,30	0,99	0,43	0,88	1,25	-	1,21	0,24
21	21,792	1197	1193	α -terpineol	-	0,86	-	0,75	0,28	-	0,82	0,79	1,20	-	-	-	-	-	-	1,16	-	0,46
22	21,887	1198	1194	octanoato de etila	-	-	-	-	-	-	0,60	-	0,71	-	-	-	-	-	-	-	-	-
23	21,920	1199	1200	dodecano	0,52	0,81	0,55	0,49	0,28	1,30	-	-	-	0,83	-	-	-	-	-	-	-	-
24	22,055	1203	1199	mirtenol	-	-	-	-	-	-	0,27	-	0,19	-	-	-	-	-	-	-	-	-
25	22,221	1208	1208	decanal	3,50	8,05	2,66	4,17	1,42	5,04	2,54	4,39	2,76	3,03	2,58	2,87	1,32	2,35	4,14	1,88	4,46	2,60
26	22,582	1218	1212	verbenona	-	-	-	-	-	-	0,42	-	0,35	-	-	-	-	-	-	-	-	-
27	22,645	1227	1220	2-fenoxietanol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,39	-	-	-	-	-
28	24,364	1266	1266	decan-1-ol	0,42	0,72	0,38	-	0,16	0,55	0,40	0,32	0,84	-	0,49	0,52	-	0,59	0,77	0,86	0,72	0,88
29	24,891	1289	1278	ácido nonanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4,28	5,76	15,97	7,24	3,59	8,05	1,41	7,61

30	25,253	1290	1282	pentil hexanoato	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,48	-	-	-	-	-	-	-	-
31	25,549	1297	1296	nonanoato de etila	0,39	1,00	1,15	0,50	0,48	1,13	1,48	0,53	1,05	0,83	-	-	-	-	-	-	-	-
32	25,953	1309	1306	undecanal	0,39	0,87	0,32	-	0,13	-	-	-	0,33	-	0,94	0,47	0,55	0,61	0,67	0,31	0,51	0,54
33	28,030	1366	1364	(E)-undec-2-enal	0,49	1,13	0,37	-	-	0,84	-	-	0,83	-	0,43	0,27	0,36	0,68	0,78	1,16	0,79	1,12
34	28,307	1380	1380	ácido decanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,68	1,95	0,93	-	1,97	-	1,15
35	29,252	1396	1394	decanoato de etila	0,52	-	0,85	-	0,19	-	0,67	-	2,01	0,87	-	-	-	-	-	-	-	-
36	29,351	1399	1400	tetradecano	-	0,39	-	-	-	-	-	-	-	-	1,61	-	0,89	0,13	-	-	-	-
37	29,856	1411	1408	dodecanal	0,96	1,22	0,91	0,90	0,34	2,12	0,65	0,95	0,76	1,15	4,81	0,82	2,69	1,32	1,25	0,41	0,60	0,88
38	31,967	1459	1455	geranilacetona	1,96	3,35	0,96	3,01	0,90	2,05	1,96	3,17	1,78	2,00	0,84	3,37	0,70	1,97	2,82	1,72	3,26	1,89
39	32,451	1468	1457	(E)-dodec-2-en-1-ol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,90	-	-	-	-	-	-
40	32,610	1470	1468	(E)-dodec-2-enal	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,28	-	-	-	-	-
41	32,927	1478	1473	dodecan-1-ol	0,85	-	0,57	6,63	-	-	-	-	1,22	1,53	1,66	0,38	1,38	0,53	0,60	0,25	0,34	0,28
42	32,940	1478	1478	2,6-ditert-butil-4-hidroxi-4-metilciclohexa-2,5-dien-1-ona	-	4,01	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
43	33,917	1499	1500	pentadecano	0,83	1,26	0,51	2,16	0,39	1,13	0,91	2,27	0,68	0,59	1,29	-	0,30	-	-	0,41	-	0,41
44	34,464	1513	1513	tridecanal	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4,55	0,46	2,41	1,17	0,77	0,45	0,43	0,91
45	36,676	1580	1580	tridecan-1-ol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,29	-	-	-	-
46	36,739	1584	1580	ácido dodecanóico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,55	0,86	-	-	0,81	-	0,24
47	37,847	1596	1592	dodecanoato de etila	1,26	0,44	3,05	1,19	-	-	4,85	1,25	5,21	4,41	-	-	-	-	-	-	-	-
48	37,954	1599	1600	hexadecano	3,28	2,63	1,78	4,62	-	2,34	2,06	4,87	1,69	2,16	6,77	1,76	-	3,94	1,46	2,76	2,41	2,47
49	38,528	1615	1612	tetradecanal	0,98	0,95	1,41	1,31	0,46	1,93	0,75	1,38	0,90	1,26	5,33	0,82	2,84	1,64	1,59	1,13	0,80	1,80
50	39,702	1648	1649	2,6,10-trimetilpentadecano	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,33	0,65	1,07	-	2,39	-	2,26
51	40,845	1681	1680	tetradecan-1-ol	1,24	1,51	1,22	1,36	0,49	-	1,03	1,43	0,60	-	-	0,81	4,18	1,09	0,88	1,11	0,47	1,01
52	41,384	1695	1687	tridecanoato de etila	-	-	2,14	-	1,84	-	4,91	-	3,26	2,75	-	-	-	-	-	-	-	-
53	41,499	1699	1700	heptadecano	8,70	2,75	4,70	4,22	1,52	4,60	2,69	4,44	3,21	4,80	4,90	5,64	3,06	5,07	4,11	7,35	6,87	5,77
54	41,655	1703	1703	2,6,10,14-tetrametilpentadecano	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4,84	0,88	5,08	2,97	5,22	6,39	6,04
55	42,082	1717	1715	pentadecanal	0,98	1,07	0,95	1,01	-	1,51	0,50	-	0,75	1,43	6,89	0,85	4,35	1,24	1,39	0,89	0,95	1,20
56	43,516	1764	1768	dodecan-5-ilciclohexano	-	-	1,10	-	-	-	-	-	-	-	-	1,18	-	-	0,59	-	1,38	1,11
57	43,771	1771	1770	3-metilheptadecano	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,77	-	-
58	44,468	1781	1780	pentadecan-1-ol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,62	-	-	-	-	-
59	44,574	1796	1798	tetradecanoato de etila	4,54	5,83	11,40	7,23	3,11	3,05	15,19	7,62	10,42	10,08	-	-	-	-	-	-	-	-
60	44,673	1799	1800	octadecano	12,33	3,41	7,00	4,41	1,30	5,24	3,44	4,64	3,54	8,01	5,64	9,25	4,11	7,92	5,78	9,29	9,69	7,27

61	44,930	1809	1809	2,6,10,14-tetrametilhexadecano	-	-	4,48	-	-	-	-	-	-	-	1,12	7,49	0,62	8,38	4,79	5,61	7,87	5,64
62	45,114	1814	1807	2-etil-hexil salicilato	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,93	0,24	0,83	-	-	-	-	0,14
63	45,268	1821	1821	hexadecanal	0,52	0,74	0,47	-	1,24	0,68	0,44	-	0,25	-	2,09	0,24	2,24	1,06	2,38	-	0,58	0,62
64	45,477	1826	1826	tetradecanoato de propano-2-ila	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,46	-	2,03	1,39	0,51	0,79	0,44
65	47,131	1884	1880	hexadecan-1-ol	3,89	3,94	4,53	4,12	1,24	4,29	2,72	4,35	1,94	3,57	3,45	5,13	7,57	5,09	7,42	3,86	2,65	4,71
66	47,479	1896	1897	pentadecanoato de etila	6,38	6,05	9,26	8,48	6,79	3,29	20,50	8,93	19,05	9,51	-	-	-	-	-	-	-	-
67	47,565	1899	1900	nonadecano	11,04	2,83	5,89	3,86	0,77	2,60	1,58	4,07	2,09	3,63	5,86	11,10	3,50	10,20	7,63	10,69	10,75	8,05
68	47,686	1902	1902	heptadecan-2-ona	-	-	-	-	0,80	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
69	48,343	1927	1926	metil <i>n</i> -hexadecanoato	-	0,72	1,01	1,35	0,32	0,44	-	1,42	0,72	-	-	-	-	-	0,75	-	0,45	1,35
70	49,380	1967	1961	ácido hexadecanoico	0,54	5,87	3,44	7,72	64,63	6,58	2,30	8,14	1,83	3,81	-	-	-	-	-	-	-	-
71	49,730	1982	1986	heptadecan-1-ol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,32	-	-	-	-	-
72	50,167	1995	1991	hexadecanoato de etila	7,13	11,10	6,62	10,12	2,38	11,62	8,02	10,67	4,43	5,75	-	-	-	-	-	-	-	-
73	50,242	1999	2000	eicosano	6,30	-	3,39	-	-	1,89	1,19	1,72	1,34	2,52	14,15	10,25	11,48	10,05	7,78	9,20	8,49	6,30

Dentre os 73 compostos identificados, alguns já foram previamente identificados em estudos de análise do perfil de voláteis presentes em amostras de diferentes hospedeiros vertebrados (Tabela 3).

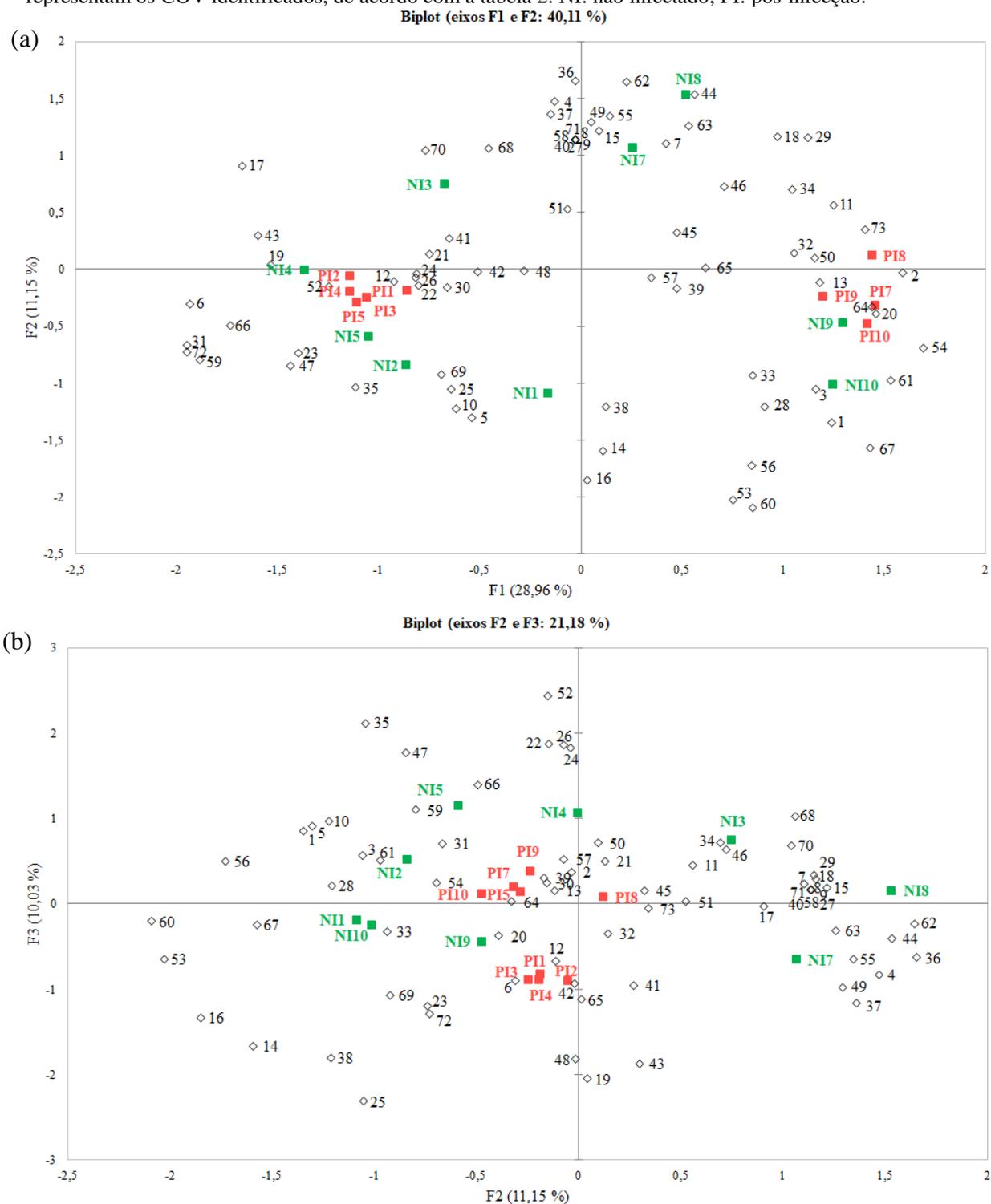
Tabela 3. Compostos identificados nas amostras de pelos de hamsters que já foram previamente identificados em outros estudos com diferentes hospedeiros vertebrados.

Compostos	Fontes dos compostos		
	Camundongos	Cães	Seres humanos
heptanal	a	c, d	e
ácido hexanóico	a	-	e
octanal	a, b	c, d	e, f, g, h
2-etilhexan-1-ol	-	-	g
limoneno	b	-	f, g
álcool benzílico	-	c	-
octan-1-ol	-	d	h
ácido heptanóico	-	d	e
nonanal	a, b	c, d	e, f, g, h
(<i>E</i>)-non-2-enal	b	d	f, h
nonan-1-ol	b	-	h
ácido octanóico	-	-	e, f
naftaleno	b	d	-
dodecano	-	c	f, g
mirtenol	b	-	-
decanal	a, b	c, d	f, h
verbenona	b	-	h
decan-1-ol	-	-	h
ácido nonanóico	b	-	e, f, h
undecanal	b	d	f, h
(<i>E</i>)-undec-2-enal	-	-	h
ácido decanóico	-	-	e, f, h
tetradecano	b	c	e, f, h
dodecanal	b	d	e, f, h
geranilacetona	b	-	e, f, h
dodecan-1-ol	b	d	f, h
pentadecano	b	c, d	e, f, h
ácido dodecanóico	-	-	e, h
hexadecano	b	c, d	e, f, h
tetradecanal	b	-	h
tetradecan-1-ol	-	-	e, h
heptadecano	b	c, d	e, f
pentadecanal	b	-	h
octadecano	b	c, d	e, h
2-etil-hexil salicilato	-	c, d	h
hexadecanal	b	-	-
hexadecan-1-ol	b	-	-
nonadecano	b	c, d	-
metil n-hexadecanoato	-	-	e, f, h
ácido hexadecanóico	-	-	e, h
eicosano	b	c	h

Letras simbolizam os estudos onde cada composto foi identificado previamente: a: RÖCK et al., 2006; b: DA ROCHA SILVA et al., 2019; c: DE OLIVEIRA et al., 2008; d: MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014; e: BERNIER et al., 2000; f: DORMONT et al., 2013; g: DE MORAES et al., 2018; h: TAVARES et al., 2019.

As áreas relativas de todos os compostos identificados a partir das amostras de pelos foram então submetidas à PCA, com base no coeficiente de Pearson, para verificação de possíveis correlações de COV com algum animal ou grupo de animais (Figura 20).

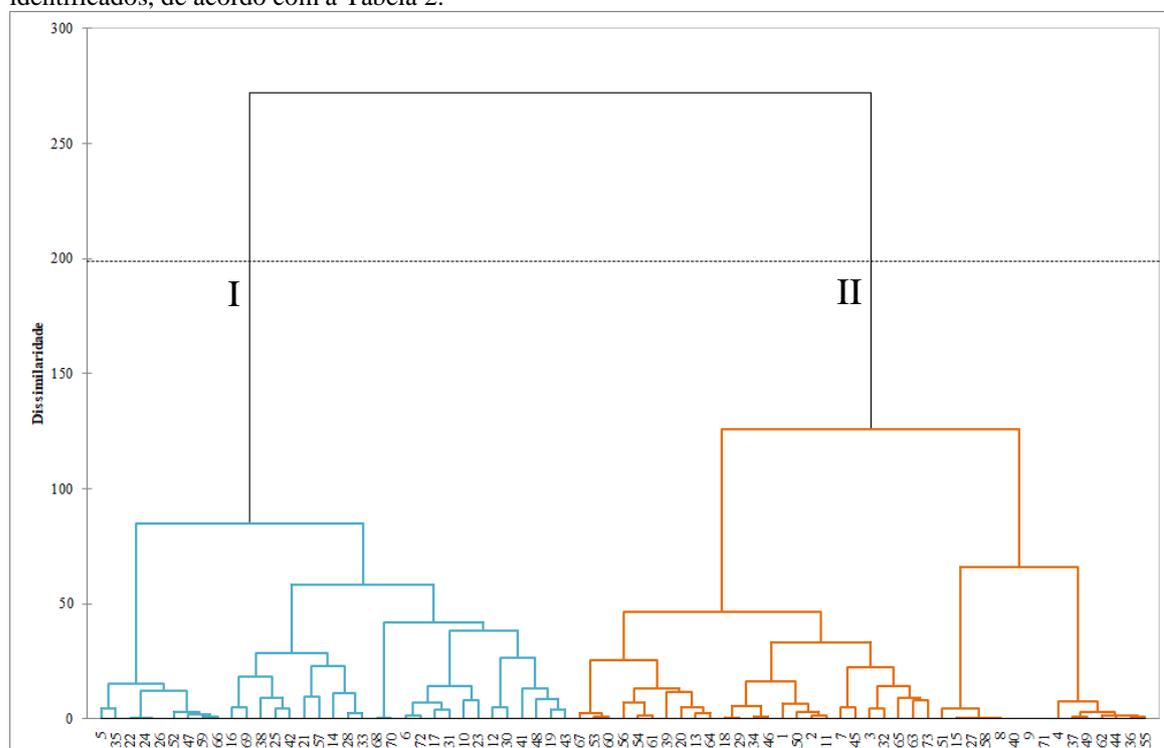
Figura 20. Análise de componentes principais (PCA) dos compostos voláteis identificados a partir das amostras de pelos de hamsters não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis*. (a) F1 x F2; (b) F2 x F3. Os números representam os COV identificados, de acordo com a tabela 2. NI: não infectado; PI: pós-infecção.



A partir do resultado obtido por meio da PCA, não foi possível observar nenhuma correlação entre os compostos e um animal ou grupo de animais específico. No entanto, é possível observar que a infecção influencia no perfil de COV emitidos pelos animais, uma vez que aproxima as amostras desses animais estão mais próximas no *biplot*, principalmente em F2 x F3, indicando uma redução da variabilidade interindividual após a infecção.

Tal ausência da separação entre os animais nas duas condições testadas – não infectado e pós-infecção – se torna mais evidente quando realizada a HCA para verificação da proximidade dos animais de acordo com os COV produzidos por cada um deles (Figura 21).

Figura 21. Análise de *cluster* para verificação da proximidade dos hamsters que foram utilizados para os testes de atratividade e que tiveram seus COV extraídos e identificados. Os números representam os COV identificados, de acordo com a Tabela 2.



A HCA permitiu distinguir os COV identificados em dois principais agrupamentos: I (compostos que englobam os animais NI e PI 1, 2, 3, 4 e 5) e II (compostos que englobam os demais animais). Em ambos os agrupamentos é possível observar a presença de tanto hamsters não infectados quanto hamsters após a infecção, comprovando que a infecção por *L. (L.) amazonensis* não é capaz de influenciar direta ou indiretamente em tal fator dos hospedeiros.

Tais resultados observados por meio da PCA e da HCA demonstram mais uma vez que a variação interindividual parece ser mais determinante para a produção de voláteis, e consequentemente para a atratividade, do que o status da infecção dos animais utilizados.

Conforme mencionado anteriormente, a diferença de atratividade de hospedeiros infectados com *Plasmodium* spp já é bem estudada e reconhecida, no entanto os mecanismos pelos quais tal diferença ocorre ainda são desconhecidos. Duas principais hipóteses são discutidas quanto a isso: i) o próprio parasita é responsável pela emissão direta de COV responsáveis por atrair mais os vetores; e ii) o parasita é capaz de gerar alterações da composição da microbiota cutânea dos hospedeiros, causando indiretamente uma alteração no perfil dos COV emitidos pelos hospedeiros (BUSULA et al., 2017).

Para as leishmanioses, até o presente momento o foco dos estudos tem sido a LV, avaliando a alteração do perfil de COV liberados por hospedeiros infectados por *L. (L.) i. chagasi*, sendo que apenas um estudo identificou efetivamente os compostos diferenciais gerados pela infecção (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014a). Para a LTA, um estudo anterior (DA ROCHA SILVA et al., 2019) e o presente estudo demonstraram não ocorrer tal alteração nos COV liberados pelos hospedeiros após a infecção por *L. (V.) braziliensis* e *L. (L.) amazonensis*, respectivamente.

Dentro da primeira hipótese, sobre a produção direta de diferentes COV pelo próprio parasita que influenciariam na atratividade do hospedeiro, devemos destacar as principais diferenças entre as doenças onde tal fenômeno ocorre e a que não ocorre. Para a malária e a LV, temos infecções onde o parasita atinge o paciente sistemicamente, atingindo órgãos internos e conseqüentemente a circulação sanguínea. Já para a LTA, a infecção geralmente ocorre de maneira mais localizada, uma vez que na maioria dos casos ocorre a formação de uma única pápula ou ulceração no local da picada do vetor.

Tal diferença também pode ser levada em conta com relação à segunda hipótese levantada para a malária, onde o parasita seria capaz de alterar a microbiota cutânea do hospedeiro e alterar os COV produzidos indiretamente.

Para a LTA tal alteração da microbiota cutânea já foi observada em pacientes de região endêmica da doença, com predominância de casos causados por *L. (V.) braziliensis*, para os quais houve uma diminuição na diversidade bacteriana presente nas lesões de diferentes partes do corpo quando comparada com pacientes saudáveis. Entretanto, é sugerido que a alteração da microbiota ocorra em decorrência de infecções secundárias oportunistas (SALGADO et al., 2016).

Embora para a LV ainda não tenha sido investigada uma diferença na microbiota cutânea de indivíduos positivos, a possível alteração dos COV emitidos por tais hospedeiros e, conseqüentemente, a maior atratividade para os vetores, pode estar associada à presença do parasita na região da pele dos mesmos, tendo em vista que já foi verificado que uma maior

carga parasitária de *L. (L.) i. chagasi* na pele de cães infectados contribui diretamente para a infecção dos flebotomíneos no momento da picada (SCORZA et al., 2021).

Uma possível influência de forma mais sistêmica para a LTA poderia ser observada em casos de leishmaniose cutâneo-difusa, que está associada a pacientes imunossuprimidos e geralmente é causada pela *L. (L.) amazonensis* (DA SILVA et al., 2021).

Embora não houve diferença no perfil de COV liberados pelos animais infectados e não infectados, alguns dos compostos listados na Tabela 2 já foram identificados previamente em diferentes hospedeiros vertebrados e alguns apresentam resultados de atratividade para flebotomíneos.

Em um estudo com testes realizados em túnel de vento com alguns álcoois foi verificada uma resposta de ativação e atração dose-dependente do nonan-1-ol para machos e fêmeas de *Lu. longipalpis* (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2014b). Também em testes realizados em túnel de vento, o octan-1-ol mostrou boa resposta de ativação e atração e o nonan-1-ol apresentou boa resposta de ativação para flebotomíneos da espécie *Ny. neivai* (MACHADO et al., 2015).

Para flebotomíneos capturados em campo – sendo a maioria da espécie *Ny. intermedia* – foi avaliada a ativação e atração desses insetos para 2-fenilacetaldéido, tetradecano, pentadecano, hexadecano, nonadecano e eicosano. Dentre esses compostos, 2-fenilacetaldéido, pentadecano e eicosano apresentaram resposta de ativação; e 2-fenilacetaldéido e eicosano apresentaram resposta de atração (TAVARES et al., 2018).

Dentre os compostos que foram previamente identificados como biomarcadores de infecção de cães, octanal, nonanal, decanal, heptadecano e tetradecano foram testados quanto à sua atratividade individualmente – em concentrações de 50 e 100% – para machos e fêmeas e em diferentes misturas entre eles para machos de *Lu. longipalpis*. Dentre os compostos individuais, nonanal (50%) e decanal (50 e 100%) apresentaram resposta considerável de ativação para fêmeas e octanal (50 e 100%), nonanal (100%), decanal (50 e 100%) e heptadecano (100%) apresentaram resposta considerável de ativação para machos. Quanto às misturas testadas para os machos, octanal:decanal (1:1) apresentou resposta significativa de ativação e octanal:decanal:heptadecano (1:1:1) apresentou resposta significativa de ativação e atração (MAGALHÃES-JUNIOR et al., 2019).

Além disso, o presente estudo identificou a presença de ácido hexadecanóico em algumas amostras. O ácido hexadecanóico é um precursor do ácido dodecanóico – também identificado no presente estudo – que é considerado como feromônio de oviposição de *Lu.*

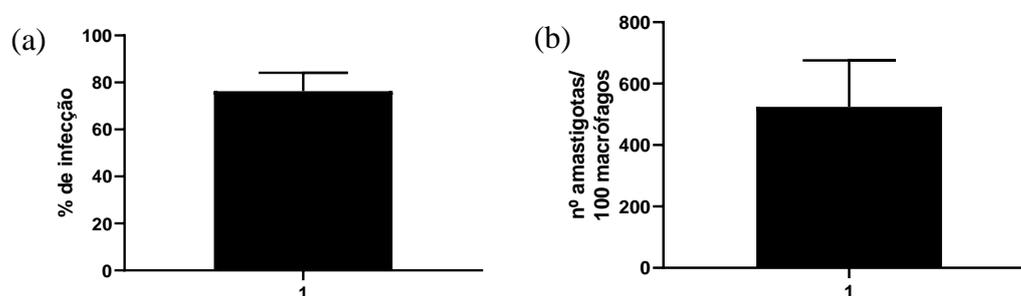
longipalpis (DOUGHERTY; HAMILTON, 1997) e mais recentemente de *Phlebotomus papatasi* (KOWACICH et al., 2020).

5.5 Infecção e análise de voláteis *in vitro*

5.5.1 Cultura de macrófagos

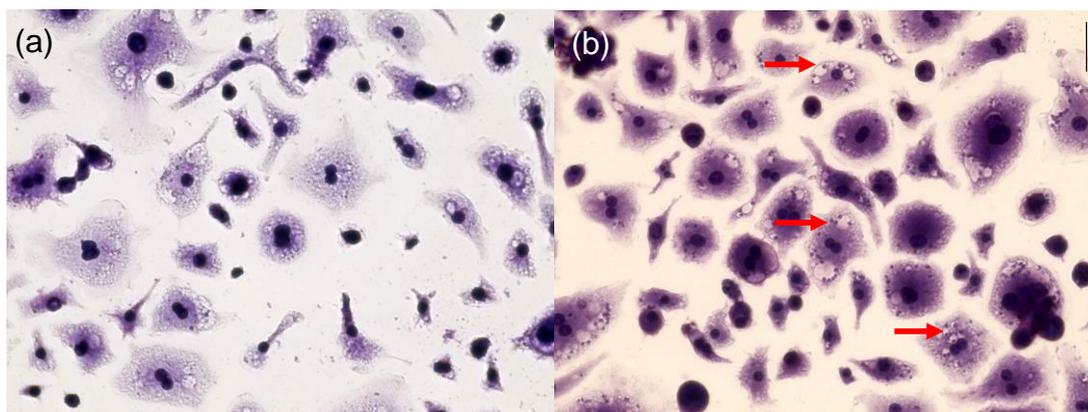
Após o procedimento de infecção, observou-se uma proporção média de aproximadamente 75% de macrófagos infectados (Figura 22a) e uma média de 500 amastigotas a cada 100 macrófagos (Figura 22b).

Figura 22. Infecção *in vitro* com *L. (L.) amazonensis* cepa PH8. (a) porcentagem total de células infectadas (média de cinco poços); (b) Número de parasitos para 100 macrófagos (média de cinco poços).



A partir da fixação e coloração das culturas de macrófagos, foi possível observar a presença das formas amastigotas em vacúolos parasitóforos nas culturas onde foi realizada a etapa de infecção com *L. (L.) amazonensis* (Figura 23).

Figura 23. Imagens representativas das culturas de macrófagos. (a) não infectados; (b) infectados com *L. (L.) amazonensis* cepa PH8. Setas indicam amastigotas no interior de vacúolos parasitóforos após 48h. Barra = 10 μ m.

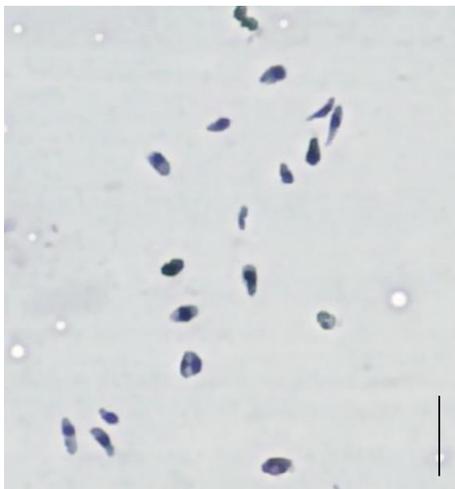


Fonte: Danilo Ciccone Miguel.

5.5.2 Amastigotas livres

A partir da obtenção dos esfregaços fixados e corados, foi possível verificar a presença de formas amastigotas livres em meio de cultura (Figura 24).

Figura 24. Imagens representativas de lâminas de esfregaço da cultura de amastigotas coradas com panótico. Barra = 10 µm.



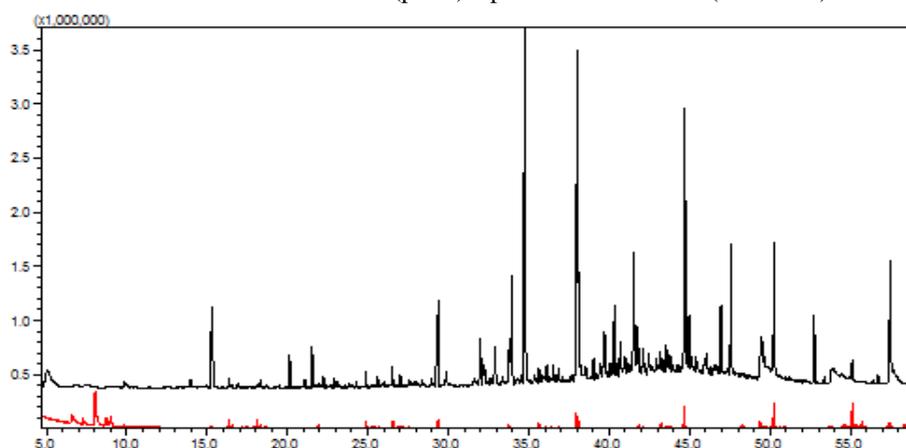
Fonte: Danilo Ciccone Miguel.

5.5.3 Análise dos voláteis

A análise de voláteis a partir de culturas de células é uma ferramenta que já foi utilizada para a identificação de COV que são liberados por glóbulos vermelhos infectados por *P. falciparum*. Para os agentes etiológicos das leishmanioses, a extração de COV de infecção *in vitro* ainda é pouco estudada, tendo em vista a existência de um único trabalho, que avaliou os COV de cultura de células mononucleares infectadas com *L. (L.) i. chagasi* (ANCHIETA, 2016).

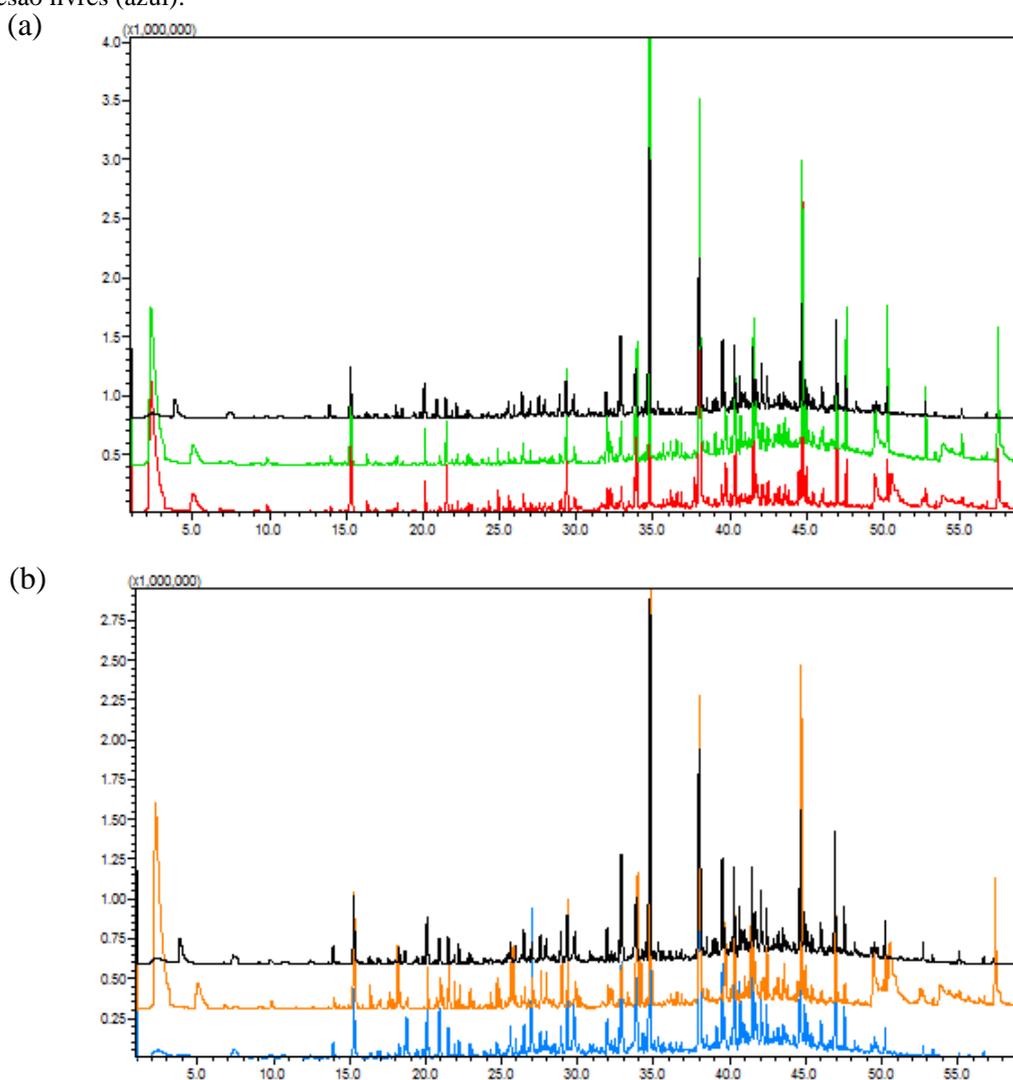
Levando em conta que no presente estudo foram realizadas duas metodologias distintas para a extração dos voláteis das culturas de macrófagos – não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis* – e de amastigotas livres, em um primeiro momento foi feita a análise para escolha do melhor polímero a ser utilizado. Por meio da comparação, foi possível observar uma baixa adsorção dos compostos da amostra quando a extração foi efetuada com o polímero Tenax TA (Figura 25).

Figura 25. Comparativo dos perfis cromatográficos obtidos a partir da extração dos voláteis de cultura de macrófagos não infectados com fibra de SPME (preto) e polímero Tenax TA (vermelho).



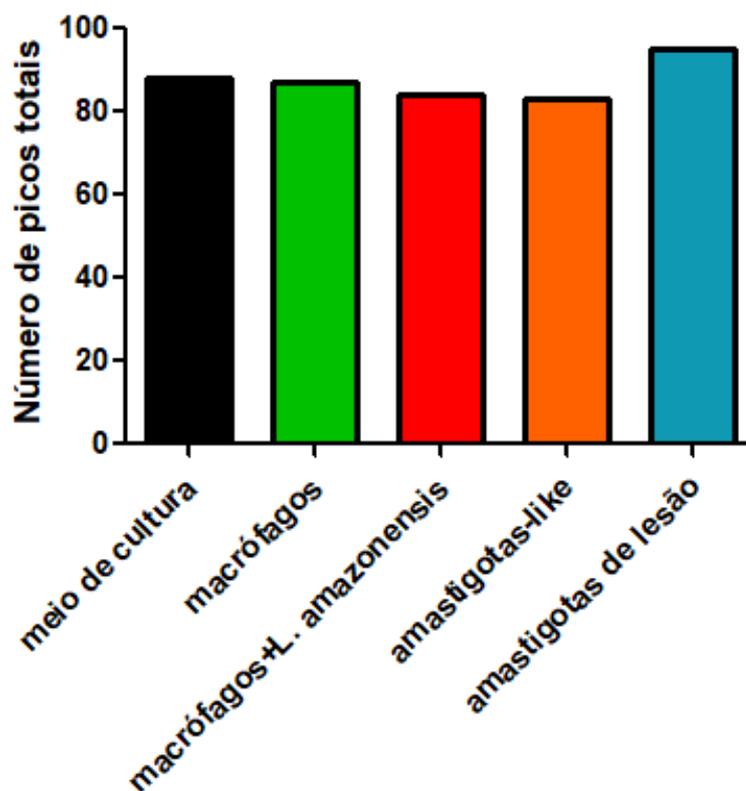
Após a comparação entre os dois tipos de polímeros, tal etapa de análise dos voláteis *in vitro* teve sequência com a dessorção dos voláteis extraídos por meio das fibras de SPME. Considerando as três amostras analisadas, foram obtidos perfis cromatográficos semelhantes entre elas (Figura 26).

Figura 26. Perfis cromatográficos obtidos por meio de extração com fibra de SPME (PDMS/DVB) de culturas de: (a) meio de cultura (preto), macrófagos não infectados (verde) e infectados com *L. (L.) amazonensis* (vermelho); (b) meio de cultura (preto), amastigotas-like livres (laranja) e amastigotas de lesão livres (azul).



A partir dos cromatogramas obtidos e posterior integração dos picos, também foi possível observar um número de picos totais próximos entre as amostras analisadas, com valores de 88, 87, 84, 83 e 95 picos para as amostras de meio de cultura, macrófagos não infectados, macrófagos infectados com *L. (L.) amazonensis*, amastigotas-like livres e amastigotas de lesão livres, respectivamente (Figura 27).

Figura 27. Número de picos totais obtidos por meio de extração com fibra de SPME (PDMS/DVB) para as amostras *in vitro* analisadas.



Apesar dos cromatogramas das diferentes amostras apresentarem um número de picos totais próximo, após etapa de identificação dos COV, foi possível observar pequenas diferenças no perfil dos voláteis presentes nas amostras. No total foi possível a identificação de 61 compostos presentes nas amostras *in vitro* (Tabela 4).

Tabela 4. Compostos tentativamente identificados a partir das amostras in vitro, em ordem crescente de tempo de retenção (t_R) e com seus respectivos índices de retenção (IR) calculados e obtidos a partir das bases de dados. Valores indicam a área relativa do composto na amostra; valores destacados em negrito indicam composto presente em uma amostra ou grupo de amostras; -: indica ausência do composto na amostra.

	t_R (min)	IR calculado	IR literatura	Composto	Meio de cultura	Amastigota- like livre	Amastigota livre	Macrófago	Macrófago + <i>L. (L.) amazonensis</i>
1	9,831	893	880	ciclooctatetraeno	0,59	0,74	0,39	0,61	0,38
2	12,559	966	960	benzaldeído	0,18	-	-	-	-
3	15,308	1034	1029	2-etilhexan-1-ol * ⁺	7,44	-	5,96	-	8,21
4	16,344	1060	1056	4,5-dimetilnonano	-	-	-	0,50	-
5	16,897	1073	1068	1-feniletanona ⁺	0,43	0,29	0,38	0,23	0,20
6	17,002	1076	1072	octan-1-ol * ⁺	-	0,44	0,41	-	-
7	18,163	1103	1103	nonan-2-ol	-	2,92	-	-	-
8	18,303	1107	1109	nonanal * ⁺	1,20	0,56	0,79	0,43	0,39
9	18,784	1120	1120	2-feniletanol	-	0,60	3,19	-	-
10	19,833	1148	1154	6-metiloctan-1-ol	0,71	-	-	-	-
11	20,940	1176	1173	nonan-1-ol ⁺	1,96	1,35	2,91	-	-
12	21,088	1179	1176	mentol *	-	1,01	-	0,40	0,26
13	21,533	1190	1181	naftaleno ⁺	2,13	3,04	1,78	2,30	2,58
14	21,913	1199	1200	dodecano * ⁺	0,76	1,11	0,70	0,23	0,29
15	22,232	1208	1208	decanal * ⁺	1,23	0,94	0,71	0,43	0,39
16	22,711	1222	1217	2,4-dimetilbenzaldeído	0,35	-	-	-	-
17	22,921	1228	1220	2-fenoxietanol ⁺	0,88	0,85	0,82	0,48	0,49
18	23,135	1234	1232	6-metilheptil prop-2-enoato	0,38	-	0,36	-	0,29
19	24,711	1276	1266	decan-1-ol ⁺	0,17	1,21	0,88	-	-
20	24,848	1280	1277	2-butiloctan-1-ol	-	-	0,28	-	-
21	24,901	1281	1285	4,6-dimetildodecano	-	-	-	-	0,95
22	25,490	1296	1290	undecan-2-ona	-	0,27	-	-	-
23	25,609	1299	1300	tridecano *	1,37	1,65	1,92	0,44	0,68
24	25,749	1303	1307	undecan-2-ol	-	2,32	-	-	-
25	25,928	1308	1306	undecanal ⁺	1,13	-	0,91	-	-
26	27,021	1338	1336	4-fenilciclohexeno	1,26	1,32	9,01	0,56	0,41
27	27,975	1363	1368	2,4,4,6,6,8,8-heptametilnon-1-eno	1,53	-	0,85	-	0,26
28	28,397	1374	1379	2,6,10-trimetildodecano	-	-	-	-	0,30

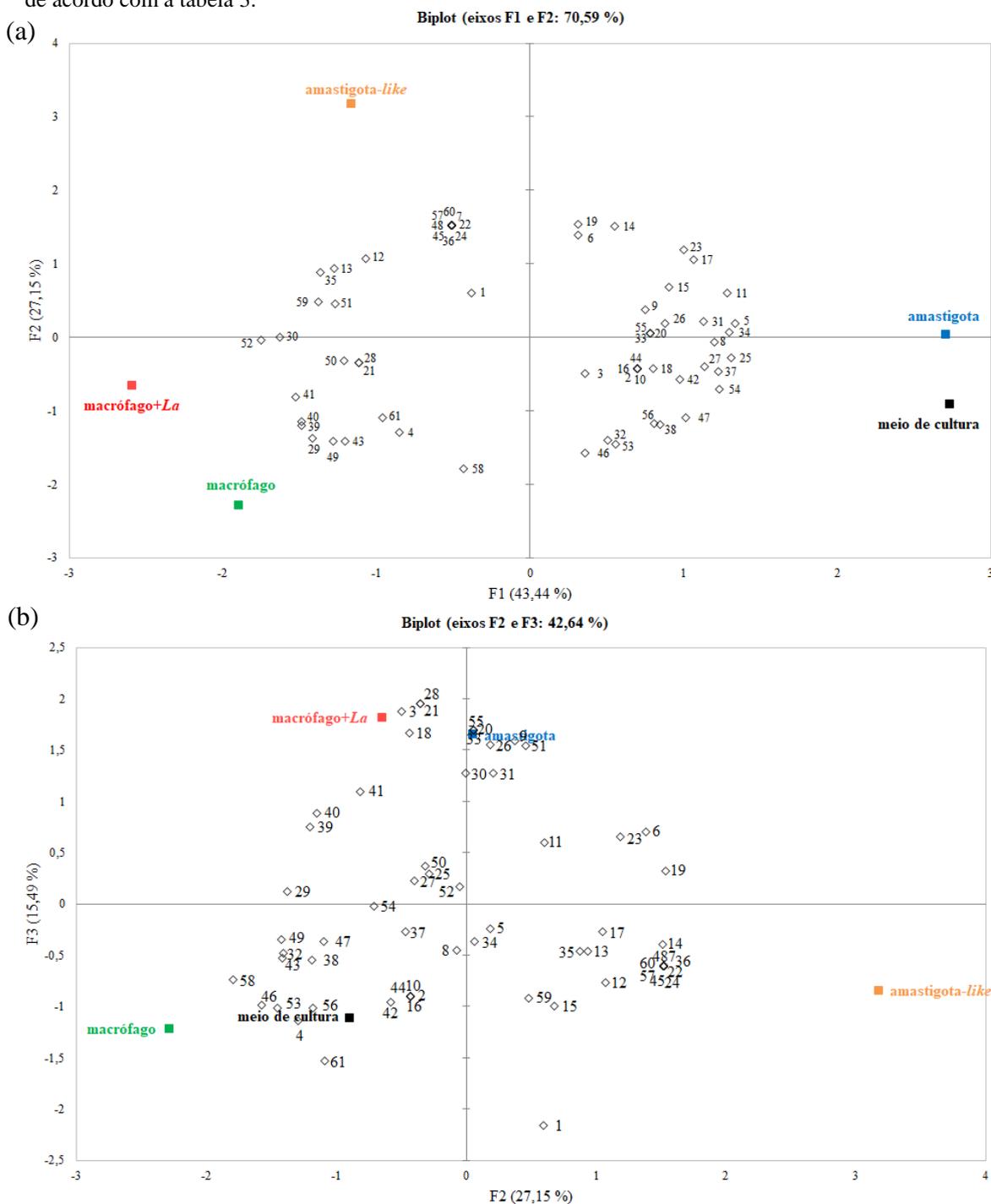
29	29,261	1396	1394	decanoato de etila ⁺	-	-	-	1,42	1,02
30	29,366	1399	1400	tetradecano ^{*+}	3,55	5,27	4,13	5,09	6,65
31	29,871	1411	1408	dodecanal ^{*+}	2,42	1,47	5,73	0,70	0,70
32	31,995	1458	1455	geranilacetona ⁺	2,78	1,41	3,04	3,35	1,60
33	32,556	1470	1472	3-metiltetradecano	-	-	0,27	-	-
34	32,920	1478	1473	dodecan-1-ol ⁺	10,55	4,14	7,34	2,24	1,23
35	33,942	1499	1500	pentadecano ⁺	5,10	9,25	4,53	6,79	7,21
36	34,171	1505	1510	tridecan-2-ol	-	2,64	-	-	-
37	34,527	1514	1513	tridecanal ⁺	1,31	0,37	0,91	0,48	0,33
38	35,646	1543	1539	2,6,10-trimetiltetradecano	0,67	-	0,66	0,63	-
39	36,541	1564	1564	2-metilpentadecano	-	-	-	0,56	0,67
40	36,839	1572	1570	3-metilpentadecano	-	-	-	0,54	0,72
41	38,010	1599	1600	hexadecano ⁺	13,40	14,44	11,87	20,61	28,53
42	38,545	1615	1612	tetradecanal ⁺	1,36	0,60	0,80	0,73	0,52
43	39,046	1630	1629	dodecanoato de propano-2-ila	-	-	-	1,03	0,37
44	40,836	1680	1680	tetradecan-1-ol ⁺	2,36	-	-	-	-
45	41,388	1695	1689	3,7,11-trimetildodeca-6,10-dien-1-ol	-	3,75	-	-	-
46	41,521	1699	1700	heptadecano ⁺	6,17	3,65	5,34	6,58	4,12
47	41,703	1705	1703	2,6,10,14-tetrametilpentadecano ⁺	4,92	2,14	4,27	3,79	2,48
48	42,453	1729	1713	(2E,6E)-3,7,11-trimetildodeca-2,6,10-trien-1-ol	-	2,59	-	-	-
49	43,374	1758	1759	4-metilheptadecano	-	-	-	0,48	0,22
50	43,797	1771	1770	3-metilheptadecano ⁺	-	0,58	0,54	0,87	0,54
51	44,490	1793	1795	(E)-octadec-3-eno	-	0,88	-	-	1,75
52	44,709	1799	1800	octadecano ⁺	10,40	14,71	9,31	14,53	16,38
53	44,965	1808	1810	2,6,10,14-tetrametilhexadecano ⁺	3,64	1,86	2,84	3,41	2,12
54	45,141	1815	1817	2-etilhexil 2-hidroxibenzoato ⁺	1,48	-	1,38	0,59	-
55	45,234	1818	1821	hexadecanal ⁺	-	-	0,74	-	-
56	45,497	1827	1826	tetradecanoato de propano-2-ila ⁺	0,60	-	0,33	0,41	-
57	47,116	1883	1880	hexadecan-1-ol ⁺	-	0,34	-	-	-
58	47,575	1898	1900	nonadecano ⁺	3,23	-	2,39	6,83	2,26
59	49,461	1969	1965	ácido hexadecanóico ⁺	-	6,06	-	4,71	2,49
60	50,093	1992	1986	heptadecan-1-ol ⁺	-	0,47	-	-	-
61	50,252	1998	2000	eicosano ⁺	2,36	2,76	1,33	7,02	2,01

* compostos previamente identificados em amostras de culturas de glóbulos vermelhos infectados com *P. falciparum* (CORREA et al., 2017).

+ compostos que também foram identificados nos hamsters utilizados no presente estudo.

As áreas relativas de todos os compostos identificados a partir das amostras *in vitro* foram então submetidas à PCA (Figura 28).

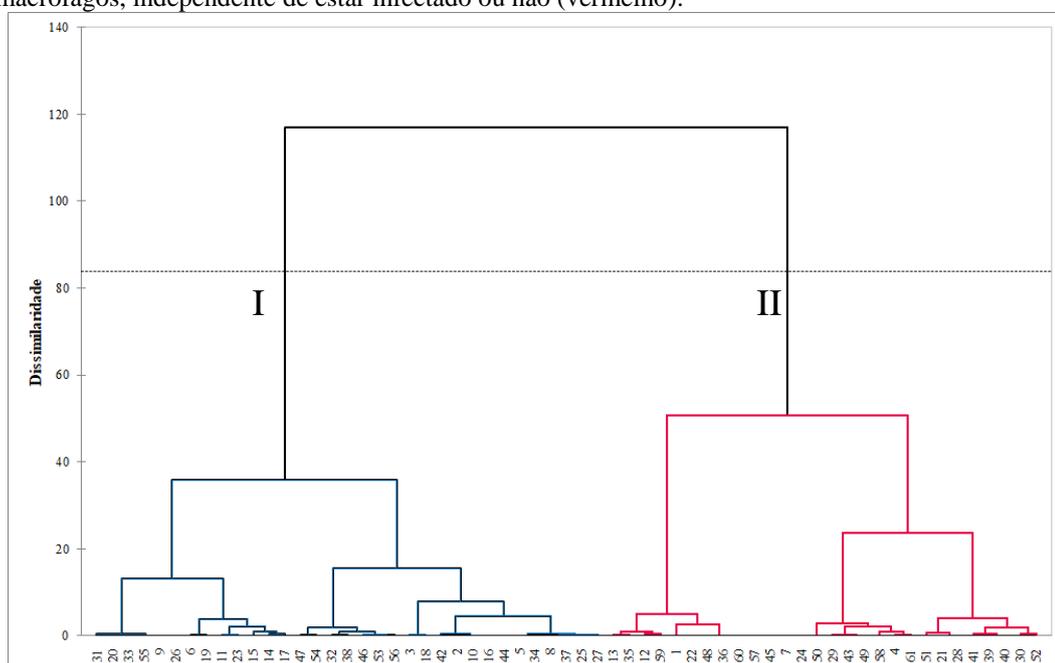
Figura 28. Análise de componentes principais (PCA) dos compostos voláteis identificados a partir das amostras obtidas *in vitro*. (a) F1 x F2; (b) F2 x F3. Os números representam os compostos identificados, de acordo com a tabela 3.



A partir dos resultados obtidos por meio da PCA, foi possível observar uma maior proximidade dos COV liberados pelas formas amastigotas obtidas a partir de lesão e pelo meio de cultura; e dos COV liberados pelos macrófagos, independente da infecção (F1 x F2). Além disso, é possível observar um maior distanciamento dos COV das formas amastigotas-like em comparação com as outras amostras, tanto em F1 x F2, quanto em F2 x F3.

Para uma melhor avaliação da correlação dos COV com as diferentes amostras, foi realizada a HCA a partir dos dados da PCA (Figura 29).

Figura 29. Análise de cluster dos compostos voláteis identificados a partir das amostras *in vitro*, com separação em dois principais agrupamentos (1 e 2), sendo o primeiro agrupamento o de compostos voláteis correlacionados ao meio de cultura e às amastigotas de lesão livres (azul) e o segundo às amastigotas-like e aos macrófagos, independente de estar infectado ou não (vermelho).



A HCA permitiu distinguir os COV identificados em dois principais agrupamentos: I (compostos que englobam as amostras de meio de cultura e de amastigotas de lesão livres) e II (compostos que englobam as amostras de amastigotas-like livres, macrófagos não infectados e macrófagos infectados com *L. (L.) amazonensis*). De tal maneira, não foi possível observar nenhum agrupamento das amostras provenientes de culturas infectadas e diferenciação de tais amostras com as demais, corroborando os dados obtidos por meio da PCA e demonstrados no *biplot* acima (Figura 28).

Conforme ressaltado anteriormente sobre o uso da análise de COV de culturas de células infectadas com outros parasitas, em um primeiro momento, foram identificados terpenos em culturas celulares infectadas por *P. falciparum* e que foram capazes de gerar uma

maior resposta eletrofisiológica para *An. gambiae* (KELLY et al., 2015). Posteriormente, foi identificado em culturas de glóbulos vermelhos infectados com *P. falciparum* um precursor responsável pelo aumento da produção de CO₂, aldeídos e monoterpenos que são capazes de gerar uma maior atratividade e susceptibilidade de infecção para *An.gambiae* (EMAMI et al., 2017).

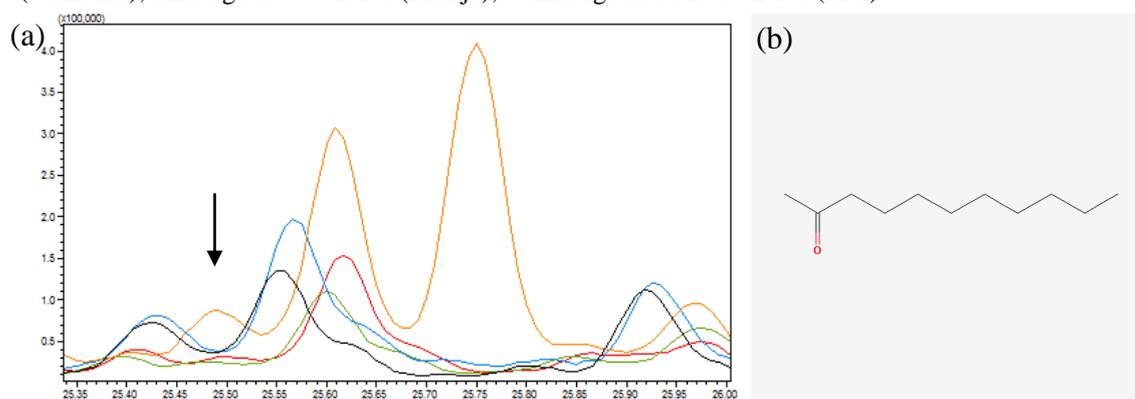
Já para as leishmanioses, um estudo avaliando os COV liberados por culturas de células infectadas com *L. (L.) i. chagasi* foi capaz de identificar dois compostos que estavam presentes apenas nas culturas infectadas: 2,4-difenil-ciclobutano e (*E*)-(2,3-difenilciclopropil)-metil-fenilsufóxido (ANCHIETA, 2016).

No presente estudo, embora não tenha sido obtida uma diferenciação das amostras por meio das análises de PCA e HCA, dentre os 61 COV identificados foi possível observar a presença de alguns compostos exclusivamente em alguma das amostras.

A amostra de amastigotas-*like* livres de *L. (L.) amazonensis* apresentou oito compostos exclusivos: nonan-2-ol, undecan-2-ona, undecan-2-ol, tridecan-2-ol, 3,7,11-trimetildodeca-6,10-dien-1-ol, (2*E*,6*E*)-3,7,11-trimetildodeca-2,6,10-trien-1-ol, hexadecan-1-ol e heptadecan-1-ol, dos quais dois – hexadecan-1-ol e heptadecan-1-ol – foram identificados também nos hamsters utilizados no presente estudo. Já a amostra de amastigotas de lesão livres apresentou três compostos exclusivos: 2-butiloctan-1-ol, 3-metiltetradecano e hexadecanal. Além disso, dois compostos foram identificados exclusivamente na amostra de macrófagos infectados: 4,6-dimetildodecano e 2,6,10-trimetildodecano.

Dentre tais compostos encontrados exclusivamente em apenas uma das amostras, podemos destacar a undecan-2-ona, que já teve sua atividade como repelente testada para insetos hematófagos (Figura 30).

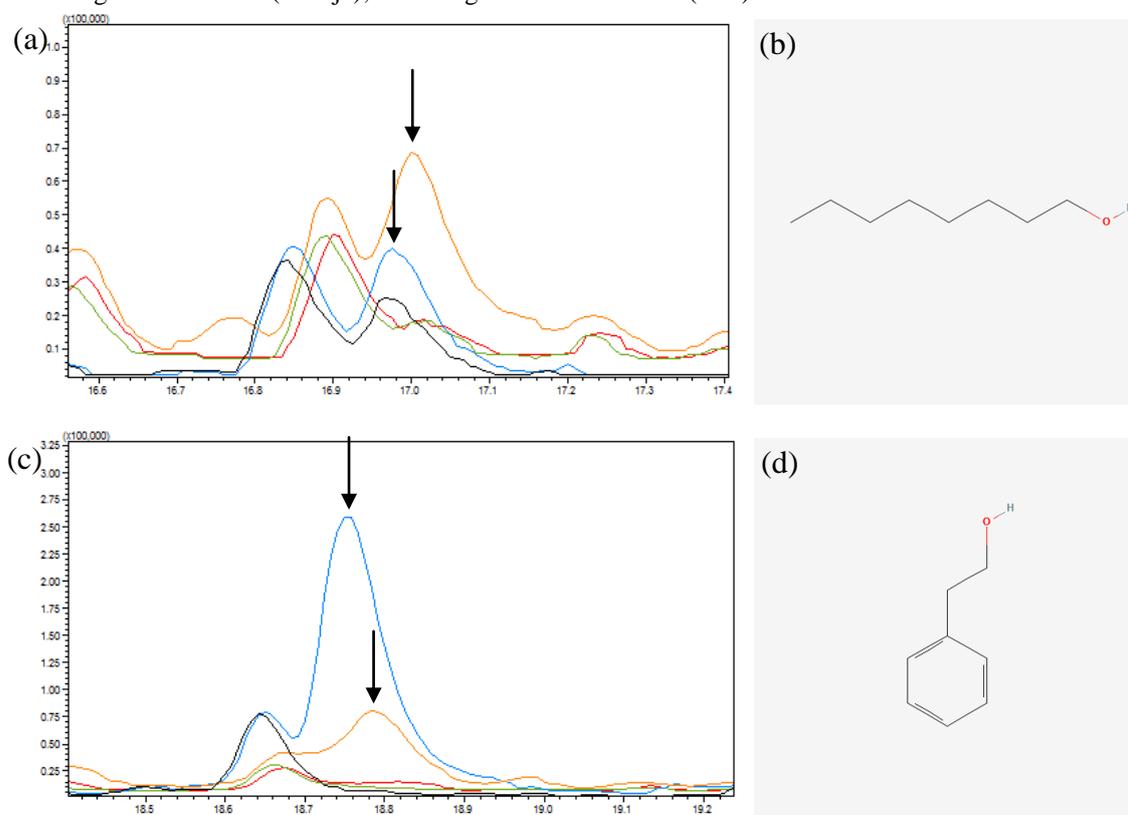
Figura 30. COV identificado exclusivamente em apenas uma das amostras de culturas de células infectadas com *L. (L.) amazonensis*: amastigotas-*like* livres. (a) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural da undecan-2-ona. Seta indica o pico referente à undecan-2-ona ($t_R=25,490$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-*like* livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).



A undecan-2-ona quando testada como repelente em quatro diferentes concentrações apresentou uma boa eficácia de proteção dose-dependente contra picadas de *An. gambiae* s.s., embora tal eficácia tenha sido menor do que o DEET, princípio ativo mais utilizado em formulações repelentes (INNOCENT; GIKONYO; NKUNYA, 2008). O mesmo composto também foi testado como repelente em uma formulação contendo 7,75% do mesmo e apresentou porcentagens de repelência semelhantes ao DEET utilizado na mesma concentração, tanto para *Aedes aegypti* quando para *Aedes albopictus* (WITTING-BISSINGER et al., 2008).

Interessantemente, foi possível observar também a presença de dois compostos – octan-1-ol e 2-feniletanol – exclusivamente nas amostras de amastigotas livres, independente da origem de obtenção das mesmas, sendo que o 2-feniletanol apresentou um teor (área relativa) cinco vezes maior nas amastigotas livres obtidas a partir de lesão (Figura 31).

Figura 31. COV identificado exclusivamente em um grupo de amostras de culturas de células infectadas com *L. (L.) amazonensis*: amastigotas livres. (a) e (c) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural do octan-1-ol; (d) fórmula estrutural do 2-feniletanol. Setas em (a) indicam os picos referentes ao octan-1-ol ($t_R=17,002$) e em (b) ao 2-feniletanol ($t_R=18,784$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-like livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).



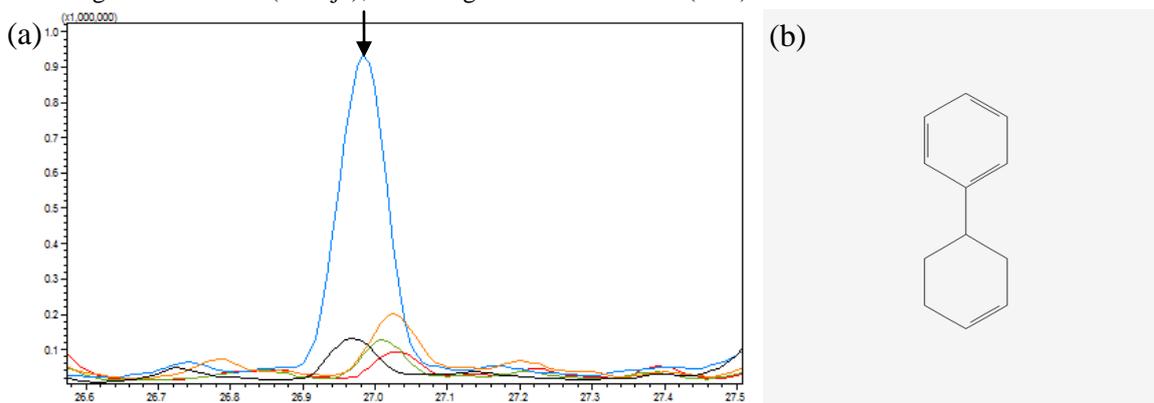
Dentre todos os compostos encontrados exclusivamente em alguma das amostras, apenas o octan-1-ol apresenta atividade conhecida para flebotomíneos, conforme citado

anteriormente. Tal composto é responsável por uma resposta de ativação e atração de *Ny. neivai* (MACHADO et al., 2015).

Em um estudo onde foi avaliada a atratividade de uma mistura de compostos identificados a partir de microbiota da pele humana, o composto 2-feniletanol foi identificado como responsável pela redução da atratividade dessa mistura de compostos para *An. gambiae*, podendo ser considerado como um candidato a repelente (VERHULST et al., 2011). Futuramente, outro estudo identificou o mesmo composto como um dos compostos associados a indivíduos menos atrativos para *An. gambiae* (VERHULST et al., 2013).

Além dos compostos que foram identificados em apenas uma das amostras, também pode ser destacado o 4-fenilciclohexeno, que está presente em todas as amostras, porém apresentou um teor (área relativa) cerca de nove vezes maior nas amastigotas livres obtidas a partir de lesão (Figura 32).

Figura 32. COV identificado em todas as amostras de culturas de células, porém em maior teor na amostra de amastigotas livres de lesão. (a) comparativo dos cromatogramas das diferentes amostras; (b) fórmula estrutural do 4-fenilciclohexeno. Seta indica o pico referente ao 4-fenilciclohexeno ($t_R=27,021$). Cromatogramas: meio de cultura (preto); macrófagos (verde); macrófagos infectados (vermelho); amastigotas-like livres (laranja); e amastigotas de lesão livres (azul).



Embora tenha sido possível observar a presença de determinados compostos produzidos *in vitro* por culturas de células de *L. (L.) amazonensis*, cabe ressaltar mais uma vez as diferenças entre as manifestações clínicas da LV e da LTA, uma vez que tal alteração apresentada ocorreria apenas de maneira localizada e possivelmente não seria capaz de influenciar de maneira significativa na atratividade de hospedeiros infectados por tal espécie de *Leishmania*.

6 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos nos testes realizados nas gaiolas, não foi possível observar diferença significativa nas taxas de alimentação das fêmeas de *Lu. longipalpis* em hamsters não infectados e infectados com *L. (L.) amazonensis*.

As diferenças no número de picos totais obtidos para a extração de COV dos hamsters não infectados e após a infecção ressaltam a variação interindividual como um fator importante para a atratividade.

A identificação dos COV dos animais não permitiu nenhuma distinção do grupo de animais infectados quando comparados com os mesmo animais previamente à infecção com *L. (L.) amazonensis*.

Quando analisados os COV a partir de infecção *in vitro* com *L. (L.) amazonensis*, não foram observadas diferenças significativas no número total de compostos obtidos. No entanto, foi possível observar alguns COV presentes exclusivamente em algumas das amostras.

A presença de determinados compostos em apenas culturas de células infectadas com *L. (L.) amazonensis*, assim como o já observado para a malária, os COV extraídos de infecções *in vitro* podem ser considerados como um bom direcionamento dos compostos voláteis que podem vir a serem produzidos também por hospedeiros infectados. Dessa maneira, a identificação desses voláteis pode ser interessante para a avaliação da atratividade de tais compostos para flebotomíneos.

O significado biológico dos resultados obtidos precisa ser mais profundamente estudados com outros agentes etiológicos das LTs para um panorama mais geral do processo de atratividade, pois até momento os dados apontam que a diferença de atratividade e/ou na produção dos COV observada em LV não ocorre em LT.

REFERÊNCIAS

- ABDELADHIM, M.; KAMHAWI, S.; VALENZUELA, J. G. What's behind a sand fly bite? The profound effect of sand fly saliva on host hemostasis, inflammation and immunity. **Infection, Genetics and Evolution**, v. 28, p. 691–703, 2014.
- AKHOUNDI, M. et al. A Historical Overview of the Classification, Evolution, and Dispersion of *Leishmania* Parasites and Sandflies. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 10, n. 3, p. 1–40, 2016.
- ANCHIETA, N. F. **Caracterização do perfil de compostos orgânicos voláteis produzidos por cultura de células e animais infectados com *Leishmania infantum***. [s.l.] Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, 2016.
- BATISTA, E. P.; COSTA, E. F.; SILVA, A. A. *Anopheles darlingi* (Diptera: Culicidae) displays increased attractiveness to infected individuals with *Plasmodium vivax* gametocytes. **Parasites & Vectors**, v. 7, p. 251, 2014.
- BERNA, A. Z. et al. Analysis of Breath Specimens for Biomarkers of *Plasmodium falciparum* Infection. **Journal of Infectious Diseases**, v. 212, n. 7, p. 1120–1128, 2015.
- BERNA, A. Z. et al. Diurnal variation in expired breath volatiles in malaria-infected and healthy volunteers. **Journal of Breath Research**, v. 12, n. 4, 2018.
- BERNIER, U. R. et al. Analysis of Human Skin Emanations by Gas Chromatography/Mass Spectrometry. 2. Identification of Volatile Compounds That Are Candidate Attractants for the Yellow Fever Mosquito (*Aedes aegypti*). **Analytical Chemistry**, v. 72, n. 4, p. 747–756, 2000.
- BRASIL. **Manual de vigilância da leishmaniose tegumentar**. 2^a ed. Brasília: Editora do Ministério da Saúde, 2017.
- BRASIL. **Casos confirmados de leishmaniose visceral, Brasil, Grandes Regiões e Unidades Federadas. 1990 a 2020**. Disponível em: <<https://www.gov.br/saude/pt-br/media/pdf/2021/novembro/16/lv-casos.pdf>>. Acesso em: 6 fev. 2022a.
- BRASIL. **Casos de leishmaniose tegumentar. Brasil, Grandes Regiões e Unidades Federadas. 1990 a 2020**. Disponível em: <<https://www.gov.br/saude/pt-br/media/pdf/2021/novembro/17/lt-casos.pdf>>. Acesso em: 6 fev. 2022b.
- BRAY, D. P.; WARD, R. D.; HAMILTON, J. G. C. The chemical ecology of sandflies (Diptera:Psychodidae). In: TAKKEN, W.; KNOLS, B. G. J. (Eds.). . **Olfaction in vector-host interactions**. 1. ed. [s.l.] The Netherlands: Wageningen Academic Publishers, 2009. p. 203–215.
- BRAZIL, R. P.; BRAZIL, B. G. Biologia de flebotomíneos neotropicais. In: FIOCRUZ (Ed.). . **Flebotomíneos do Brasil**. V. 4 ed. Rio de Janeiro: [s.n.]. p. 257–274.
- BRAZIL, R.; RODRIGUES, A.; FILHO, J. Sand Fly Vectors of *Leishmania* in the Americas - A Mini Review. **Entomology, Ornithology and Herpetology: Current Research**, v. 04, n. 02, p. 4–7, 2015.
- BRILHANTE, A. F. et al. Natural infection of phlebotomines (Diptera: Psychodidae) by *Leishmania (Leishmania) amazonensis* in an area of ecotourism in Central-Western Brazil. **Journal of Venomous Animals and Toxins including Tropical Diseases**, v. 21, p. 39, 2015.
- BUSULA, A. O. et al. Mechanisms of *Plasmodium*-Enhanced Attraction of Mosquito Vectors. **Trends in Parasitology**, v. 33, n. 12, p. 961–973, 2017.

- CARVALHO-SILVA, R. et al. Predominance of *Leishmania (Leishmania) amazonensis* DNA in *Lutzomyia longipalpis* sand flies (Diptera: Psychodidae) from an endemic area for leishmaniasis in Northeastern Brazil. **Revista do Instituto de Medicina Tropical de São Paulo**, v. 64, p. e32, 2022.
- CARVALHO, B. M. et al. Entomological surveys of *Lutzomyia flaviscutellata* and other vectors of cutaneous leishmaniasis in municipalities with records of *Leishmania amazonensis* within the Bragança region of Pará State, Brazil. **Journal of Vector Ecology**, v. 43, n. 1, p. 168–178, 1 jun. 2018.
- CASANOVA, C. et al. Identification of sex pheromones of *Lutzomyia longipalpis* (Lutz & Neiva, 1912) populations from the state of São Paulo, Brazil. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 101, n. 1, p. 113–115, fev. 2006.
- CASANOVA, C. et al. Distribution of *Lutzomyia longipalpis* Chemotype Populations in São Paulo State, Brazil. **PLOS Neglected Tropical Diseases**, v. 9, n. 3, p. e0003620, mar. 2015.
- CHELBI, I. et al. Enhanced attraction of sand fly vectors of *Leishmania infantum* to dogs infected with zoonotic visceral leishmaniasis. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 15, n. 7, p. 1–17, 2021.
- CONVIT, J.; ULRICH, M. Antigen-specific immunodeficiency and its relation to the spectrum of American cutaneous leishmaniasis. **Biological research**, v. 26, n. 1–2, p. 159–166, 1993.
- CORNET, S. et al. Malaria infection increases bird attractiveness to uninfected mosquitoes. **Ecology Letters**, v. 16, n. 3, p. 323–329, 2013.
- CORREA, R. et al. Volatile organic compounds associated with *Plasmodium falciparum* infection *in vitro*. **Parasites & Vectors**, v. 10, p. 215, 2017.
- DA ROCHA SILVA, F. B. et al. Influence of *Leishmania (Viannia) braziliensis* infection on the attractiveness of BALB/c mice to *Nyssomyia neivai* (Diptera: Psychodidae). **PLoS ONE**, v. 14, n. 4, p. 1–17, 2019.
- DA SILVA, R. C. R. et al. Experimental transmission of *Leishmania (Leishmania) amazonensis* to immunosuppressed mice through the bite of *Lutzomyia longipalpis* (Diptera: Psychodidae) results in cutaneous leishmaniasis. **Journal of the São Paulo Institute of Tropical Medicine**, v. 63, n. e81, p. 1–10, 2021.
- DE MORAES, C. M. et al. Malaria-induced changes in host odors enhance mosquito attraction. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 111, n. 30, p. 11079–11084, 2014.
- DE MORAES, C. M. et al. Volatile biomarkers of symptomatic and asymptomatic malaria infection in humans. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 115, n. 22, p. 201801512, 2018.
- DE OLIVEIRA, L. S. et al. Headspace solid phase microextraction/gas chromatography-mass spectrometry combined to chemometric analysis for volatile organic compounds determination in canine hair: A new tool to detect dog contamination by visceral leishmaniasis. **Journal of Chromatography B: Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences**, v. 875, n. 2, p. 392–398, 2008.
- DÍEZ-FERNÁNDEZ, A. et al. Mosquitoes are attracted by the odour of *Plasmodium*-infected birds. **International Journal for Parasitology**, v. 50, n. 8, p. 569–575, 2020.
- DORMONT, L. et al. New methods for field collection of human skin volatiles and

- perspectives for their application in the chemical ecology of human-pathogen-vector interactions. **Journal of Experimental Biology**, v. 216, n. 15, p. 2783–2788, 2013.
- DORMONT, L.; BESSIÈRE, J. M.; COHUET, A. Human Skin Volatiles: A Review. **Journal of Chemical Ecology**, v. 39, n. 5, p. 569–578, 2013.
- DOUGHERTY, M.; HAMILTON, G. Dodecanoic acid is the oviposition pheromone of *Lutzomyia longipalpis*. **Journal of Chemical Ecology**, v. 23, n. 12, p. 2657–2671, 1997.
- EMAMI, S. N. et al. A key malaria metabolite modulates vector blood seeking, feeding, and susceptibility to infection. **Science**, v. 355, n. 6329, p. 1076–1080, 2017.
- ERHARDT, W. et al. A comparative study with various anesthetics in mice (pentobarbitone, ketamine-xylazine, carfentanyl-etomidate). **Research In Experimental Medicine**, v. 184, n. 3, p. 159–169, 1984.
- FALCÃO, S. DE A. C. et al. *Leishmania infantum* and *Leishmania braziliensis*: Differences and similarities to evade the innate immune system. **Frontiers in Immunology**, v. 7, p. 287, 2016.
- GALLAGHER, M. et al. Analyses of volatile organic compounds from human skin. **Br J Dermatol**, v. 159, n. 4, p. 780–791, 2008.
- GONTIJO, B.; DE CARVALHO, M. L. R. Leishmaniose tegumentar americana. **Medicina Tropical**, v. 36, n. 13, p. 71–80, 2003.
- GONZÁLEZ AUDINO, P. et al. Volatile compounds secreted by Brindley's glands of adult *Triatoma infestans*: identification and biological activity of previously unidentified compounds. **Journal of Vector Ecology**, v. 32, n. 1, p. 75–82, 2007.
- GOULART, T. M. et al. Techniques to improve the maintenance of a laboratory colony of *Nyssomyia neivai* (Diptera: Psychodidae). **Parasites & Vectors**, v. 8, n. 1, p. 423, 2015.
- GOULART, T. M. et al. Breeding protocol for the sand fly *Nyssomyia neivai* (Diptera: Psychodidae) in laboratory conditions. **Acta Tropica**, v. 174, n. July, p. 102–105, 2017.
- HAMILTON, J. G. C. et al. Analysis of the sex pheromone extract of individual male *Lutzomyia longipalpis* sandflies from six regions in Brazil. **Medical and Veterinary Entomology**, v. 19, n. 4, p. 480–488, 1 dez. 2005.
- HIRAMOTO, R. M. et al. Classificação epidemiológica dos municípios do Estado de São Paulo segundo o Programa de Vigilância e Controle da leishmaniose visceral, 2017. **BEPA**, v. 16, n. 182, p. 11–35, 2019.
- INNOCENT, E.; GIKONYO, N. K.; NKUNYA, M. H. Repellency property of long chain aliphatic methyl ketones against *Anopheles gambiae* s.s. **Tanzania journal of health research**, v. 10, n. 1, p. 50–54, 2008.
- IVAN, I. et al. *Plasmodium falciparum* Breath Metabolomics (Breathomics) Analysis as a Non-Invasive Practical Method to Diagnose Malaria in Pediatric. **Indonesian Journal of Tropical and Infectious Disease**, v. 9, n. 1, p. 24–32, 2021.
- KELLY, M. et al. Malaria parasites produce volatile mosquito attractants. **mBio**, v. 6, n. 2, p. 1–6, 2015.
- KOWACICH, D. et al. The egg and larval pheromone dodecanoic acid mediates density-dependent oviposition of *Phlebotomus papatasi*. **Parasites and Vectors**, v. 13, n. 1, p. 1–11, 2020.
- KWAK, J. et al. Major histocompatibility complex-regulated odortypes: Peptide-free urinary

- volatile signals. **Physiology and Behavior**, v. 96, n. 1, p. 184–188, 2009.
- LACROIX, R. et al. Malaria infection increases attractiveness of humans to mosquitoes. **PLoS Biology**, v. 3, n. 9, p. 1590–1593, 2005.
- LAINSON, R.; SHAW, J. J. Leishmaniasis in Brazil: I. Observations on enzootic rodent leishmaniasis - incrimination of *Lutzomyia flaviscutellata* (Mangabeira) as the vector in the lower Amazonian basin. **Transactions of the Royal Society of Tropical Medicine and Hygiene**, v. 62, n. 3, p. 385–395, 1968.
- LIMA, H. C.; BLEYENBERG, J. A.; TITUS, R. G. A simple method for quantifying *Leishmania* in tissues of infected animals. **Parasitology Today**, v. 13, n. 2, p. 80–82, fev. 1997.
- LOGAN, J. G.; BIRKETT, M. A. Semiochemicals for biting fly control: their identification and exploitation. **Pest Management Science**, v. 63, p. 647–657, 2007.
- MACHADO, V. et al. Attraction of the sand fly *Nyssomyia neivai* (Diptera: Psychodidae) to chemical compounds in a wind tunnel. **Parasites & Vectors**, v. 8, n. 1, p. 147, 2015.
- MACIEL, C. et al. Evans blue as a simple method to discriminate mosquitoes' feeding choice on small laboratory animals. **PLoS ONE**, v. 9, n. 10, 2014.
- MAGALHÃES-JUNIOR, J. T. et al. Identification of biomarkers in the hair of dogs: New diagnostic possibilities in the study and control of visceral leishmaniasis. **Analytical and Bioanalytical Chemistry**, v. 406, n. 26, p. 6691–6700, 2014a.
- MAGALHÃES-JUNIOR, J. T. et al. A laboratory evaluation of alcohols as attractants for the sandfly *Lutzomyia longipalpis* (Diptera:Psychodidae). **Parasites & Vectors**, v. 7, n. 1, p. 60, 2014b.
- MAGALHÃES-JUNIOR, J. T. et al. Attraction of the sandfly *Lutzomyia longipalpis* to possible biomarker compounds from dogs infected with *Leishmania infantum*. **Medical and Veterinary Entomology**, v. 33, n. 2, p. 322–325, 2019.
- MAY-CONCHA, I. et al. Volatile compound diversity and conserved alarm behaviour in *Triatoma dimidiata*. **Parasites & Vectors**, v. 8, p. 84, 2015.
- MOLYNEUX, D. H.; KILLICK KENDRICK, R.; ASHFORD, R. W. *Leishmania* in phlebotomid sandflies. III. The ultrastructure of *Leishmania mexicana amazonensis* in the midgut and pharynx of *Lutzomyia longipalpis*. **Proceedings of the Royal Society of London - Biological Sciences**, v. 190, n. 1100, p. 341–357, 1975.
- NEVATTE, T. M. et al. After infection with *Leishmania infantum*, Golden Hamsters (*Mesocricetus auratus*) become more attractive to female sand flies (*Lutzomyia longipalpis*). **Scientific Reports**, v. 7, n. 1, p. 6104, 2017.
- NGUYEN, P. L. et al. No evidence for manipulation of *Anopheles gambiae*, *An. coluzzii* and *An. arabiensis* host preference by *Plasmodium falciparum*. **Scientific Reports**, v. 7, n. 1, p. 9415, 2017.
- O'SHEA, B. et al. Enhanced sandfly attraction to *Leishmania*-infected hosts. **Transactions of the Royal Society of Tropical Medicine and Hygiene**, v. 96, n. 2, p. 117–118, 2002.
- OLSON, J. F. et al. Two compounds in bed bug feces are sufficient to elicit off-host aggregation by bed bugs, *Cimex lectularius*. **Pest Management Science**, v. 73, n. 1, p. 198–205, 2016.
- OMRANI, S. M. et al. Fabrication of an olfactometer for mosquito behavioural studies.

Journal of Vector Borne Diseases, v. 47, n. 1, p. 17–25, 2010.

PAHO. **Interactive Atlas of Leishmaniasis in the Americas: clinical aspects and differential diagnosis**. Washington, D.C.: Pan American Health Organization, 2020.

PALFRAMAN, M. J. et al. Sobralene, a new sex-aggregation pheromone and likely shunt metabolite of the taxadiene synthase cascade, produced by a member of the sand fly *Lutzomyia longipalpis* species complex. **Tetrahedron Letters**, v. 59, n. 20, p. 1921–1923, 2018.

PAWLISZYN, J. **Handbook of Solid Phase Microextraction**. 1st. ed. [s.l.] Elsevier, 2012.

PITTS, R. J. et al. The roles of kairomones, synomones and pheromones in the chemically-mediated behaviour of male mosquitoes. **Acta Tropica**, v. 132, n. 1, p. 26–34, 2014.

RANGEL, E. F.; LAINSON, R. Proven and putative vectors of American cutaneous leishmaniasis in Brazil: aspects of their biology and vectorial competence. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 104, n. 7, p. 937–954, 2009.

READY, P. D. Biology of Phlebotomine Sand Flies as Vectors of Disease Agents. **Annual Review of Entomology**, v. 58, n. 1, p. 227–250, 2013.

REBOUÇAS, A. et al. *Leishmania*-Induced Dendritic Cell Migration and Its Potential Contribution to Parasite Dissemination. **Microorganisms**, v. 9, n. 6, p. 1268, 2021.

RÖCK, F. et al. Comparative analysis of volatile constituents from mice and their urine. **Journal of chemical ecology**, v. 32, n. 6, p. 1333–1346, 2006.

ROGERS, M. E. The role of *Leishmania* proteophosphoglycans in sand fly transmission and infection of the mammalian host. **Frontiers in Microbiology**, v. 3, n. JUN, p. 1–13, 2012.

ROGERS, M. E.; BATES, P. A. *Leishmania* manipulation of sand fly feeding behavior results in enhanced transmission. **PLoS Pathogens**, v. 3, n. 6, p. 0818–0825, 2007.

SACKS, D.; KAMHAWI, S. Molecular aspects of parasite-vector and vector-host interactions in Leishmaniasis. **Annual Review of Microbiology**, v. 55, p. 453–83, 2001.

SALGADO, V. R. et al. The microbiological signature of human cutaneous leishmaniasis lesions exhibits restricted bacterial diversity compared to healthy skin. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 111, n. 4, p. 241–251, 2016.

SCORZA, B. M. et al. *Leishmania infantum* xenodiagnosis from vertically infected dogs reveals significant skin tropism. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 15, n. 10, p. e0009366, 2021.

SHIMABUKURO, P. H. F.; DE ANDRADE, A. J.; GALATI, E. A. B. Checklist of American sand flies (Diptera, psychodidae, phlebotominae): Genera, species, and their distribution. **ZooKeys**, v. 2017, n. 660, p. 67–106, 2017.

SHIREY, R. E. SPME Commercial Devices and Fibre Coatings. In: **Handbook of Solid Phase Microextraction**. 1st. ed. [s.l.] Elsevier, 2012. p. 99–133.

SILVA, A. L. F. F. DA et al. Susceptibility of laboratory-reared female *Lutzomyia longipalpis* (Lutz & Neiva, 1912) to infection by different species and strains of *Leishmania* Ross, 1903. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 85, n. 4, p. 453–458, 1990.

SMALLEGANGE, R. C. et al. Malaria Infected Mosquitoes Express Enhanced Attraction to Human Odor. **PLoS ONE**, v. 8, n. 5, p. 8–10, 2013.

STANIEK, M. E. et al. eNose analysis of volatile chemicals from dogs naturally infected with

Leishmania infantum in Brazil. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 13, n. 8, p. 1–19, 2019.

STANIEK, M. E.; HAMILTON, J. G. C. Odour of domestic dogs infected with *Leishmania infantum* is attractive to female but not male sand flies: Evidence for parasite manipulation. **PLOS Pathogens**, v. 17, n. 3, p. e1009354, 2021.

STASHENKO, E. E.; MARTÍNEZ, J. R. Sampling volatile compounds from natural products with headspace/solid-phase micro-extraction. **Journal of Biochemical and Biophysical Methods**, v. 70, n. 2, p. 235–242, 2007.

STEVERDING, D. The history of leishmaniasis. **Parasites & Vectors**, v. 10, n. 1, p. 82, 2017.

SUPELCO. **Solid Phase Microextraction Fiber Assemblies**. Disponível em: <https://www.sigmaaldrich.com/content/dam/sigma-aldrich/docs/Sigma/General_Information/1/t794123.pdf>. Acesso em: 22 maio. 2018a.

SUPELCO. **Selection Guide for Supelco SPME Fibers | Sigma-Aldrich**. Disponível em: <<https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/selecting-spme-fibers.html>>. Acesso em: 18 maio. 2018b.

TAVARES, D. DA S. et al. Attraction of phlebotomine sandflies to volatiles from skin odors of individuals residing in an endemic area of tegumentary leishmaniasis. **PLoS ONE**, v. 13, n. 9, p. 1–14, 2018.

TAVARES, D. S. et al. Determination and profiling of human skin odors using hair samples. **Molecules**, v. 24, n. 16, p. 2964, 2019.

TITUS, R. G. et al. A limiting dilution assay for quantifying *Leishmania major* in tissues of infected mice. **Parasite Immunology**, v. 7, n. 5, p. 545–555, set. 1985.

VALENTE, A. L. P.; AUGUSTO, F. Microextração por fase sólida. **Química Nova**, v. 23, n. 4, p. 523–530, 2000.

VERHULST, N. O. et al. Improvement of a synthetic lure for *Anopheles gambiae* using compounds produced by human skin microbiota. **Malaria Journal**, v. 10, p. 28, 2011.

VERHULST, N. O. et al. Relation between HLA genes, human skin volatiles and attractiveness of humans to malaria mosquitoes. **Infection, Genetics and Evolution**, v. 18, p. 87–93, ago. 2013.

WHO. **Leishmaniasis: Situation and trends**. Disponível em: <<https://www.who.int/data/gho/data/themes/topics/gho-ntd-leishmaniasis>>. Acesso em: 16 dez. 2021.

WITTING-BISSINGER, B. E. et al. Novel arthropod repellent, BioUD, is an efficacious alternative do deet. **Journal of Medical Entomology**, v. 45, n. 5, p. 891–898, 2008.

ZARBIN, P. H. G.; RODRIGUES, M. A. C. M.; LIMA, E. R. Feromônios de insetos: tecnologia e desafios para uma agricultura competitiva no Brasil. **Química Nova**, v. 32, n. 3, p. 722–731, 2009.

ZHANG, Z.; LI, G. A review of advances and new developments in the analysis of biological volatile organic compounds. **Microchemical Journal**, v. 95, n. 2, p. 127–139, jul. 2010.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Parecer de aprovação da CEUA/FCF/CAr.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Câmpus de Araraquara



CERTIFICADO

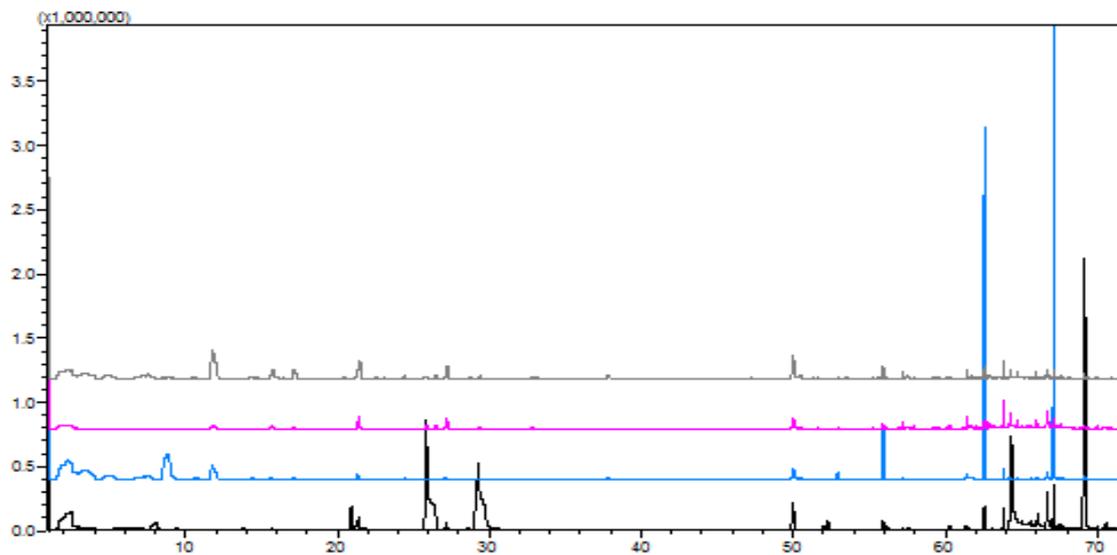
Certificamos que a proposta intitulada "Avaliação da atratividade de hamster dourado (*Mesocricetus auratus*) infectado com *Leishmania* spp para flebotomíneos (*Diptera:Psychodidae*)", registrada com o Protocolo CEUA/FCF/CAr: 16/2018, sob a responsabilidade da Pesquisadora Flávia Benini da Rocha Silva, que envolve a produção, manutenção ou utilização de animais pertencentes ao filo Chordata, subfilo Vertebrata exceto humanos), para fins de pesquisa científica (ou ensino) - encontra-se de acordo com os preceitos da Lei nº 11.794, de 8 de outubro de 2008, do Decreto nº 6.899, de 15 de julho de 2009, e com as normas editadas pelo Conselho Nacional de Controle de Experimentação Animal (CONCEA), e foi aprovado pela COMISSÃO DE ÉTICA NO USO DE ANIMAIS da Faculdade de Ciências Farmacêuticas do Campus de Araraquara da UNESP em reunião de 24 de outubro de 2018.

Finalidade	() Ensino (X) Pesquisa Científica
Vigência da autorização	Agosto de 2020
Espécie/linhagem/raça	hamster dourado
Nº de animais	23
Idade/Peso	4 semanas 140 g
Sexo	feminino
Origem	ANILAB – Animais de Laboratório Criação e Comércio Ltda – EPP

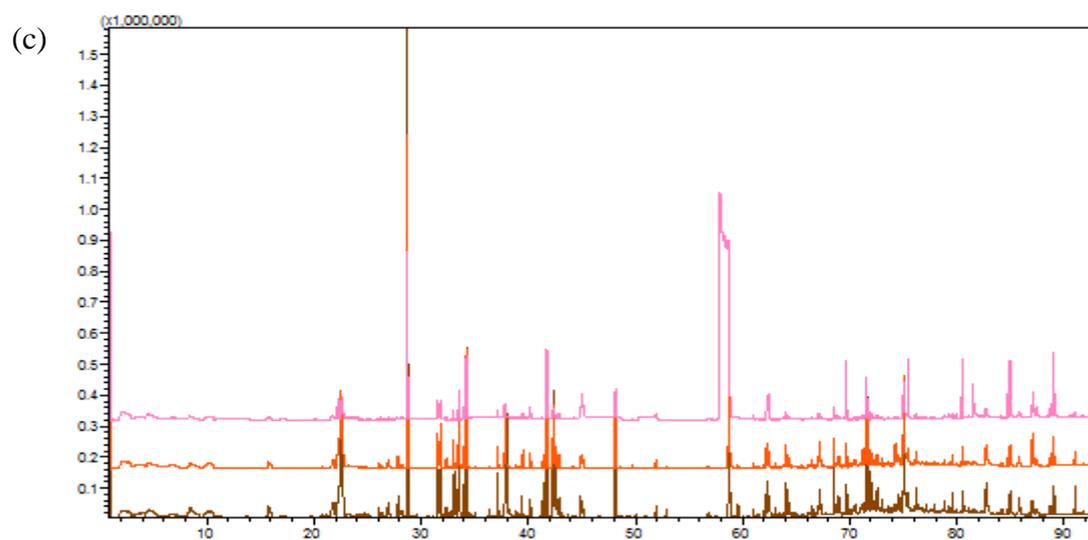
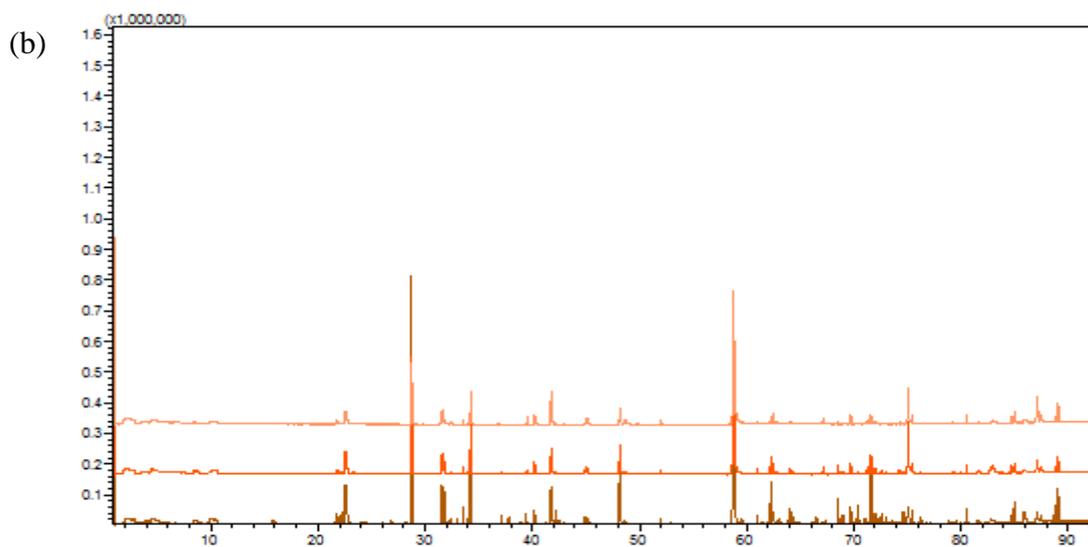
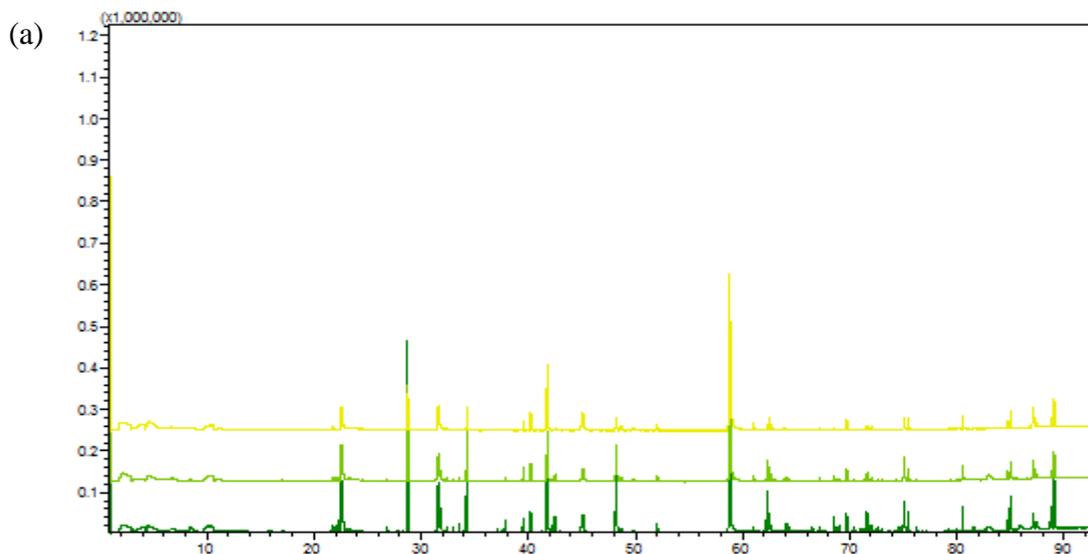
Araraquara, 24 de outubro de 2018.

Profa. Dra. CARLA RAQUEL FONTANA
Coordenadora da CEUA

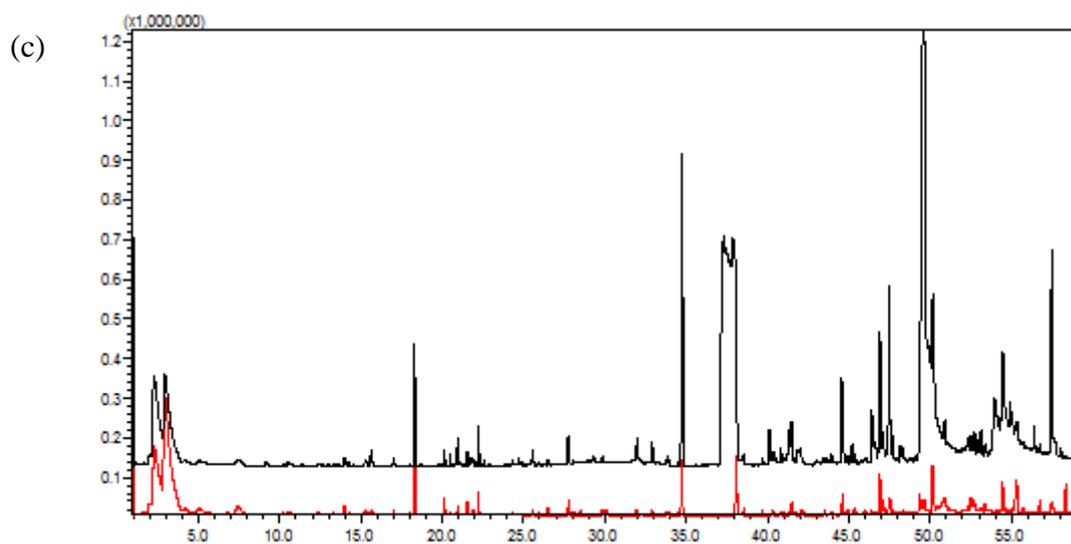
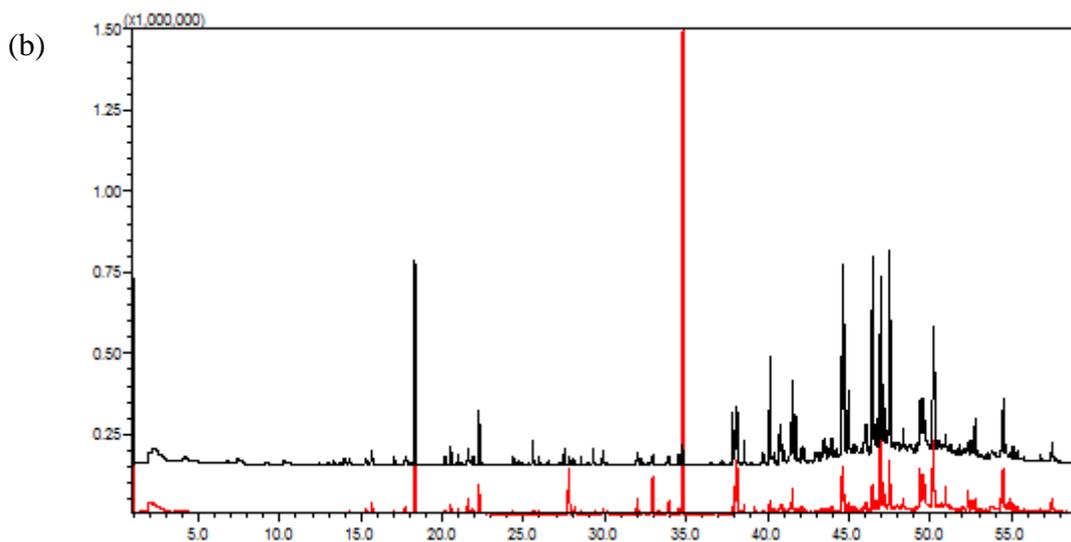
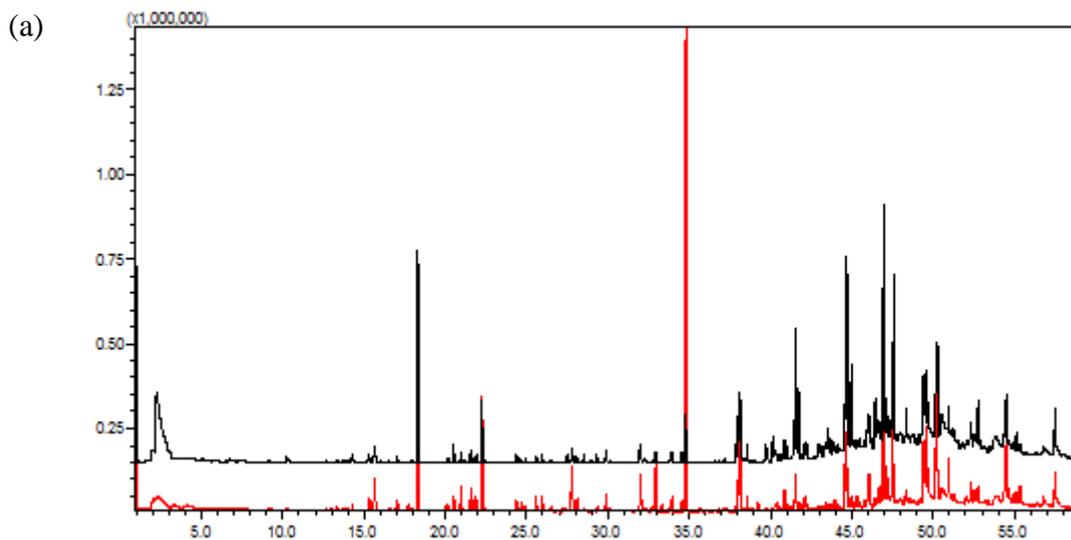
APÊNDICE B – Cromatogramas obtidos a partir de amostra de pelos de hamster sadio para os diferentes tipos de revestimentos testados em etapa de seleção da fibra de SPME. Cinza: DVB/CAR/PDMS; rosa: PDMS/DVB; azul: CAR/PDMS; preto: PA.

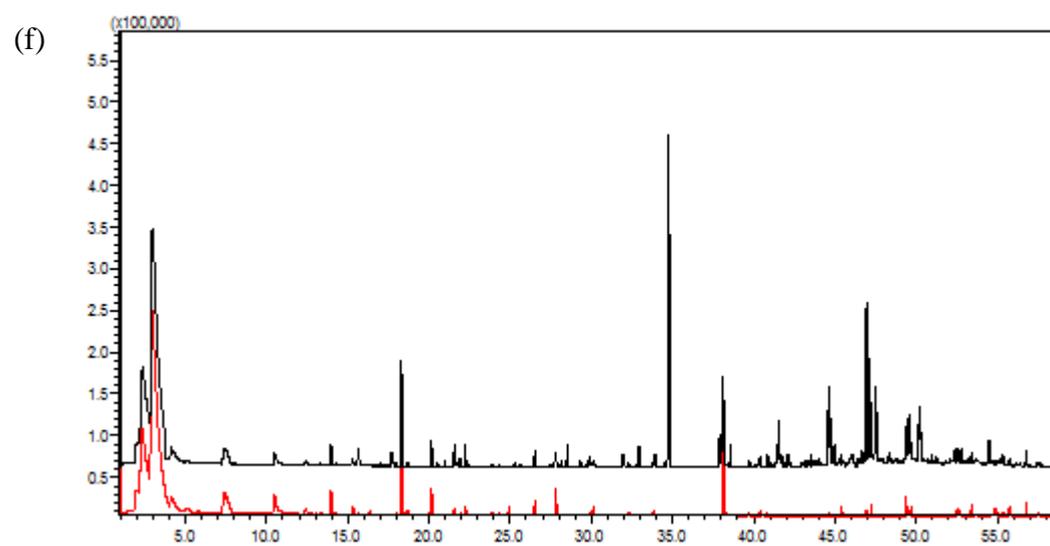
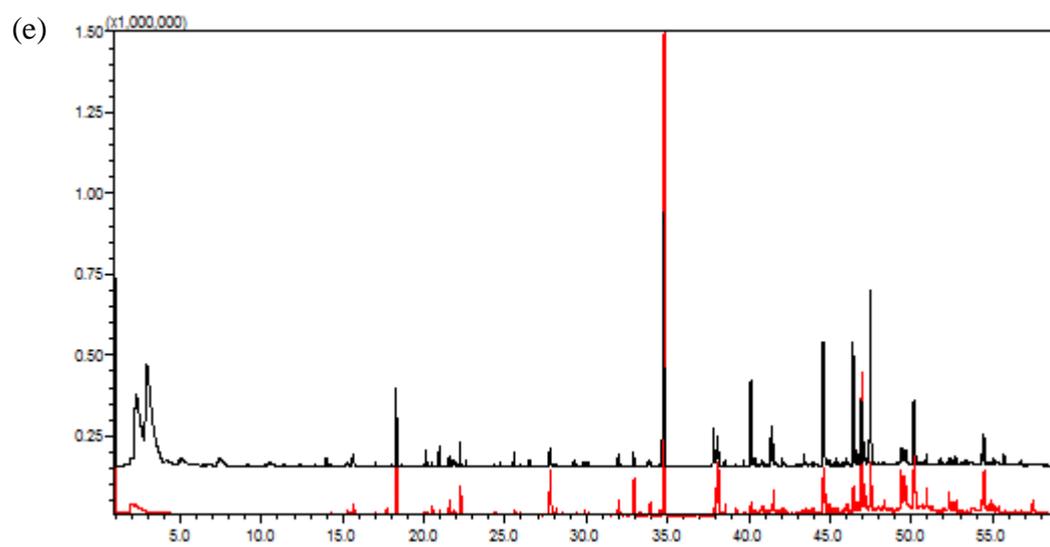
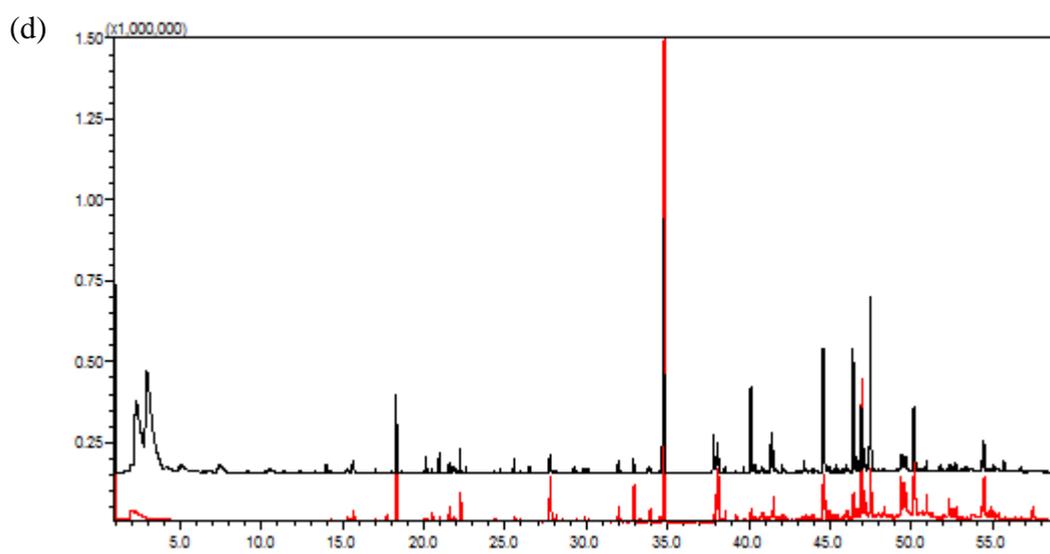


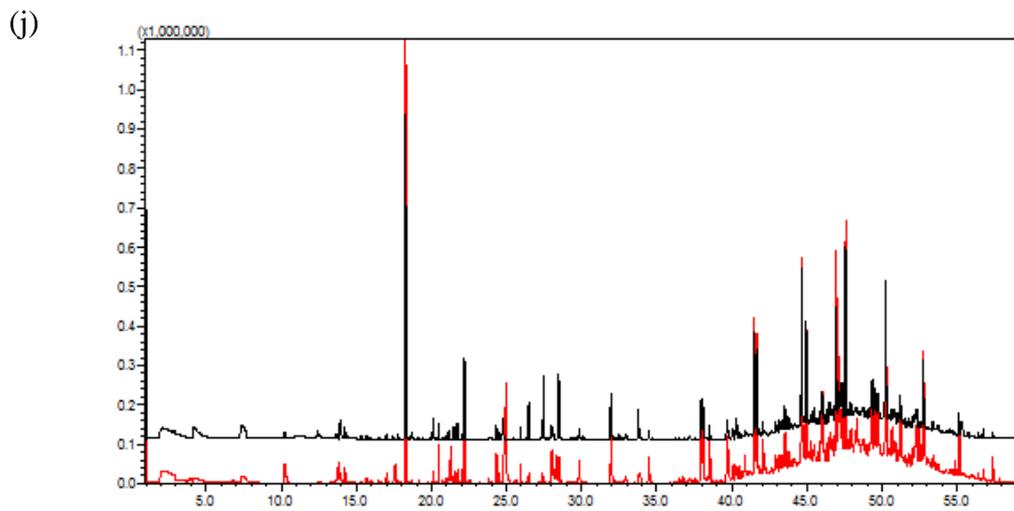
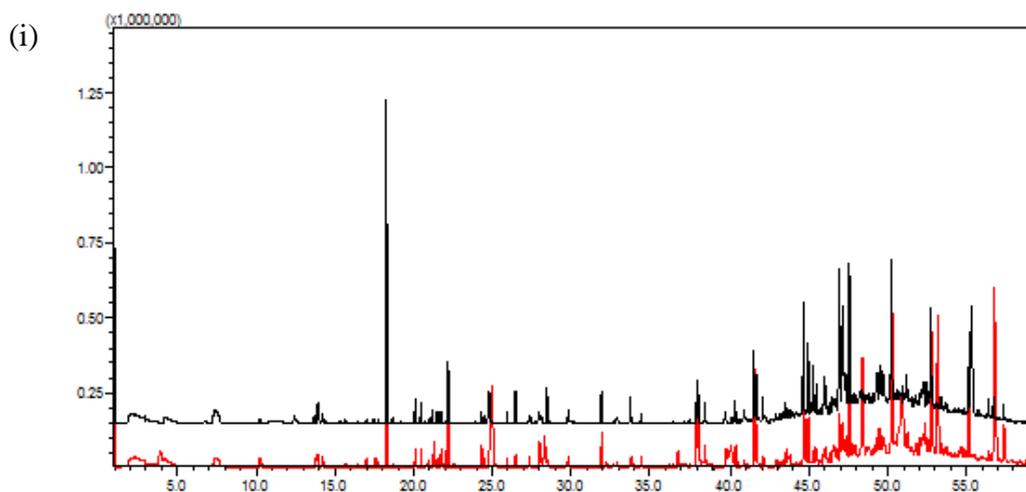
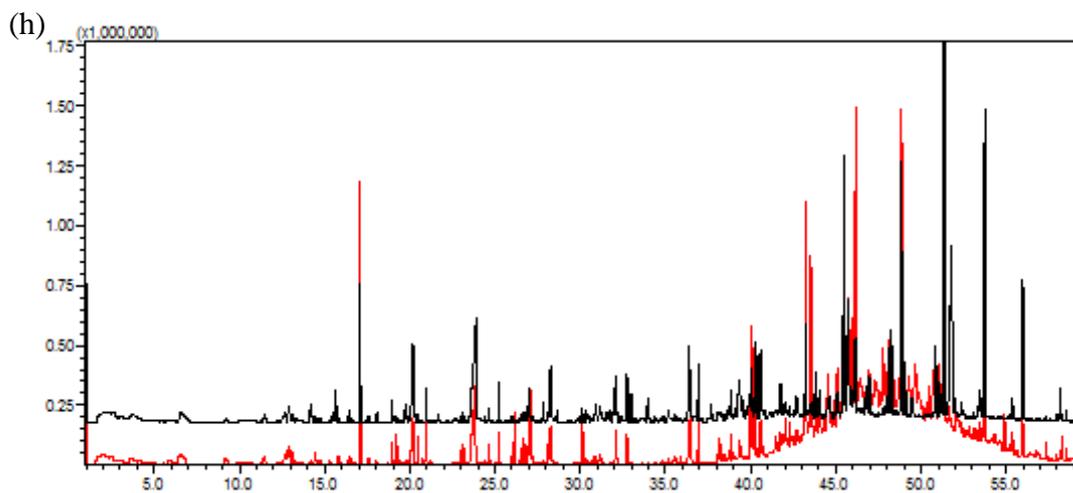
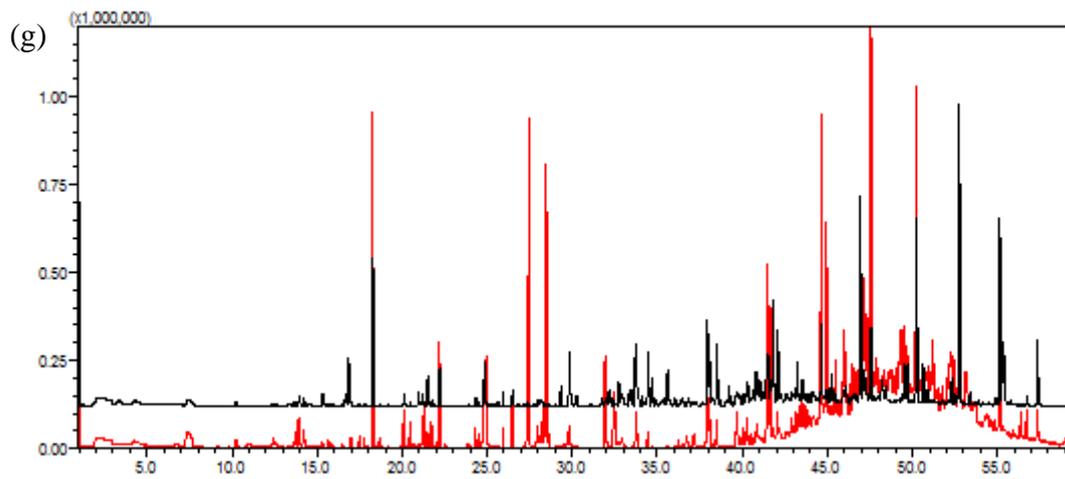
APÊNDICE C – Cromatogramas obtidos a partir de amostra de pelos de hamster sadio para as diferentes condições testadas em etapa de seleção de tempo e temperatura de extração dos compostos voláteis. (a) 50°C; (b) 70°C; (c) 90°C. Em cada imagem, de cima para baixo: 10, 30 e 50 minutos.



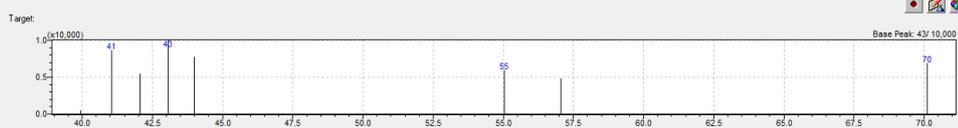
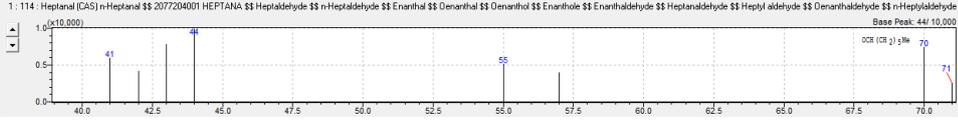
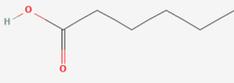
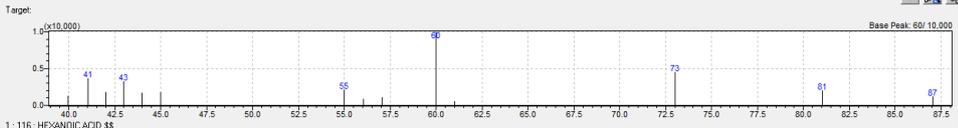
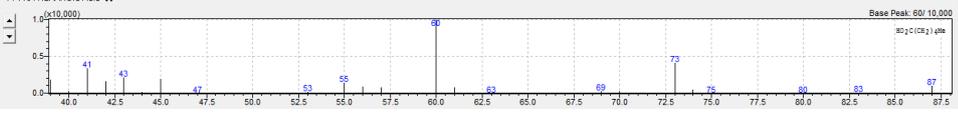
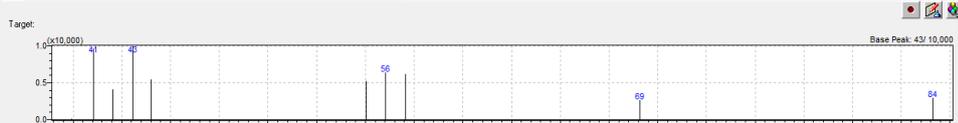
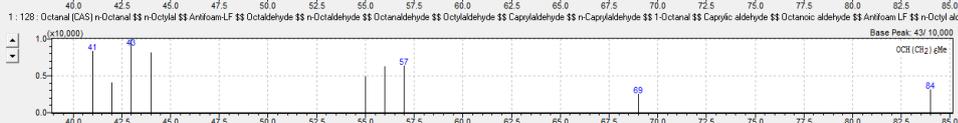
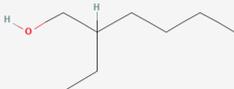
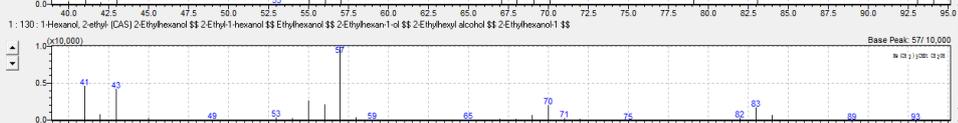
APÊNDICE D – Cromatogramas obtidos a partir da análise dos compostos voláteis presentes em amostras de pelos dos hamsters utilizados nos testes de atratividade para *Lu. longipalpis*. (a) H1; (b) H2; (c) H3; (d) H4; (e) H5; (f) H6; (g) H7; (h) H8; (i) H9; (j) H10. Preto: não infectado; vermelho: pós-infecção.

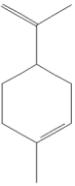
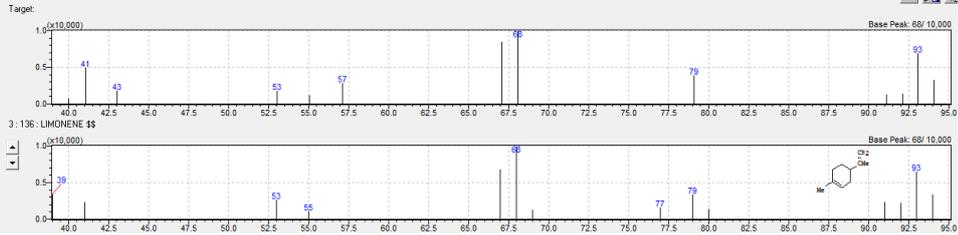
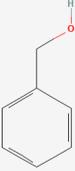
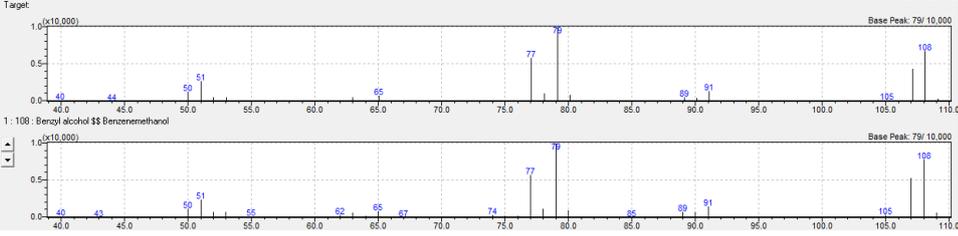
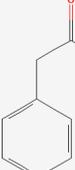
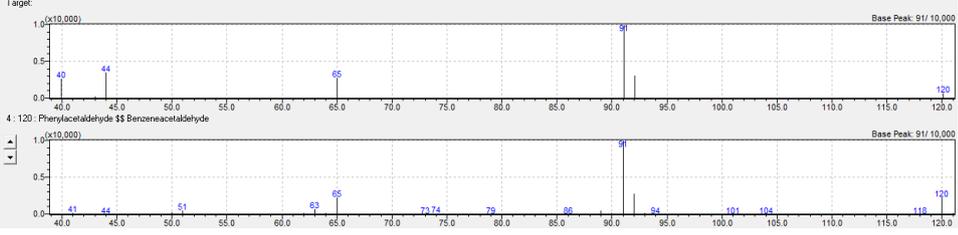
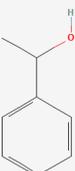
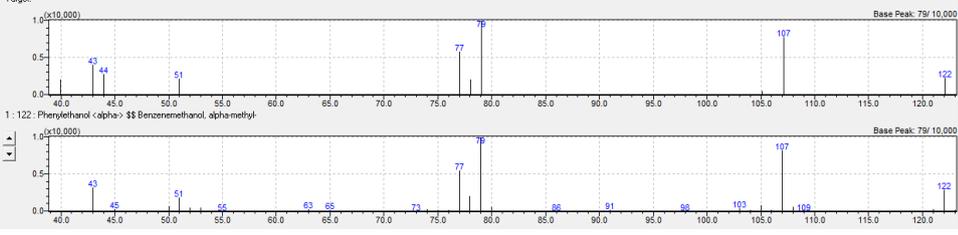


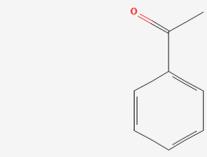
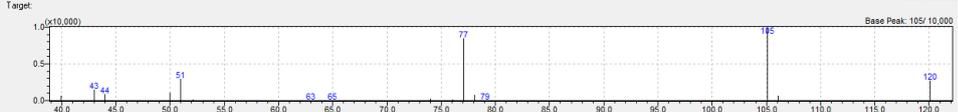
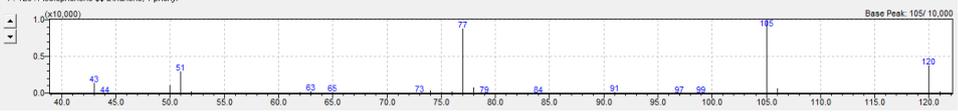
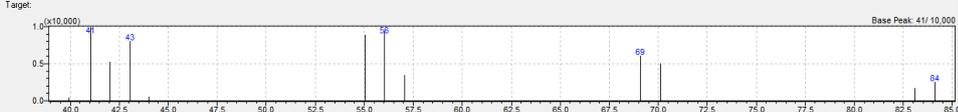
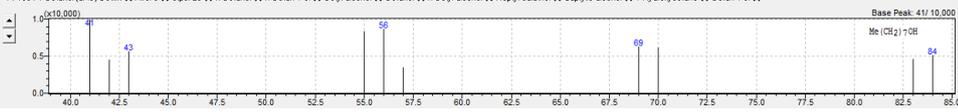
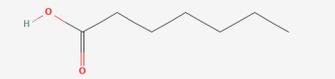
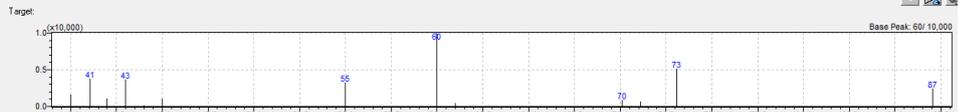
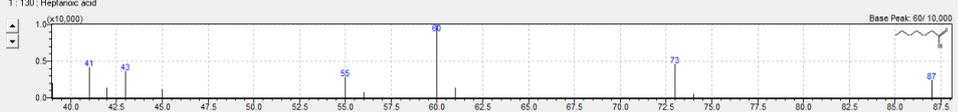
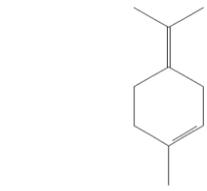
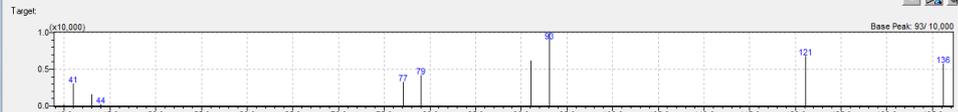
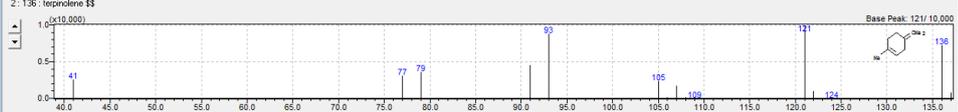


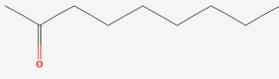
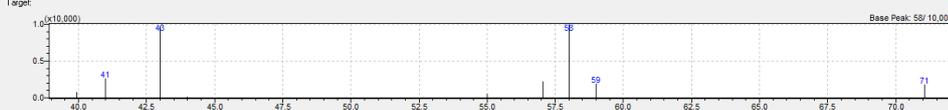
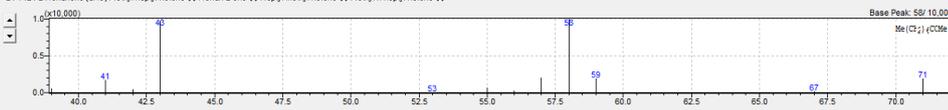
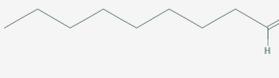
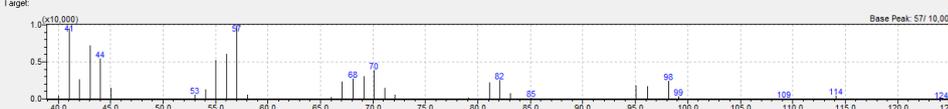
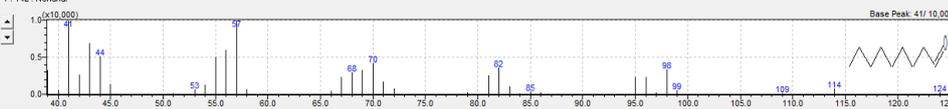
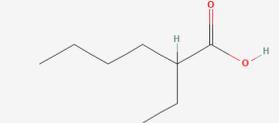
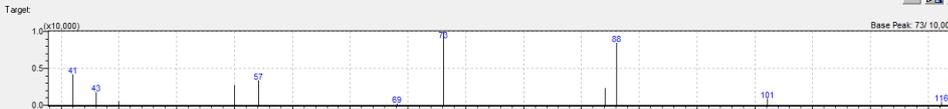
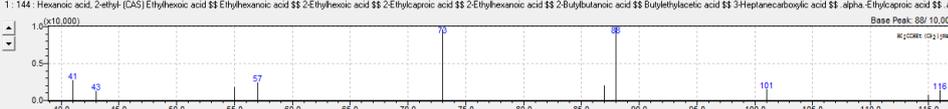
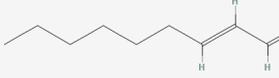
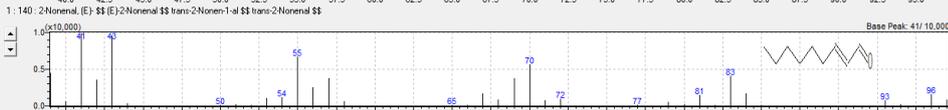


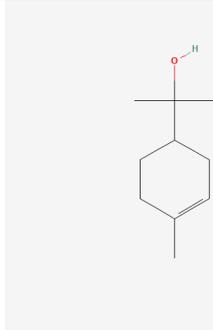
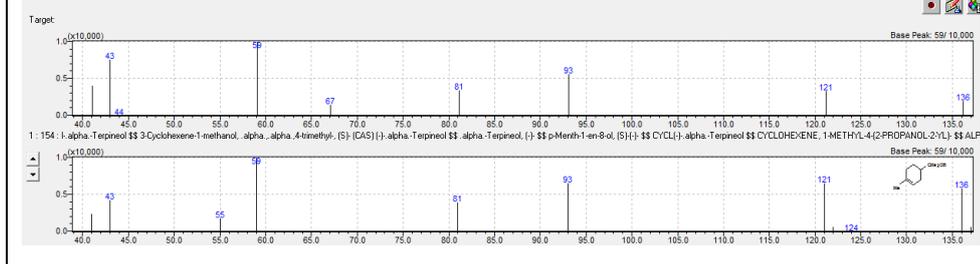
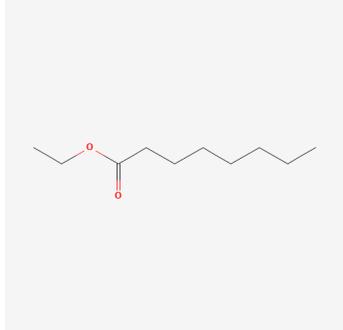
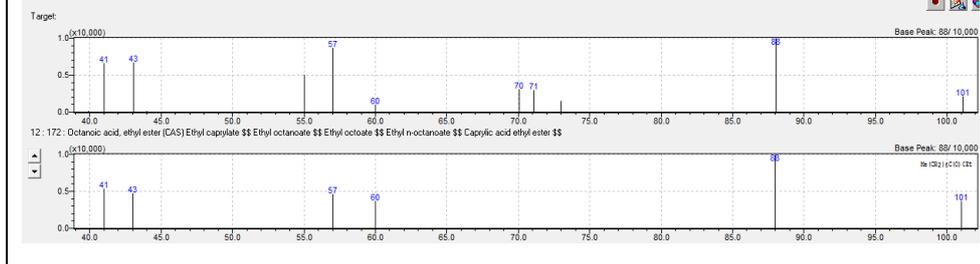
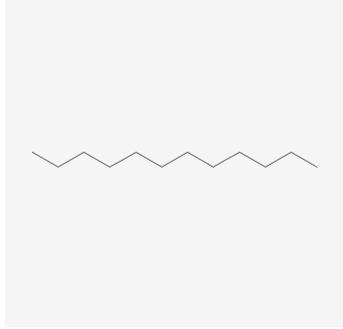
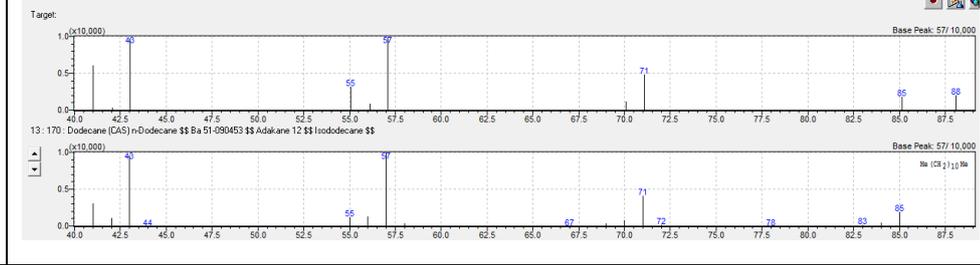
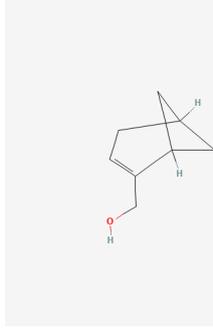
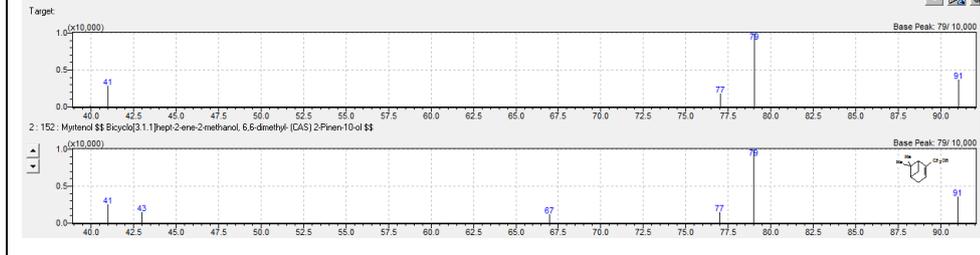
APÊNDICE E - Estruturas moleculares dos compostos voláteis identificados e comparação dos espectros de massas dos compostos presentes nas amostras de pelos dos hamsters (superiores) com as bibliotecas utilizadas (inferiores). Porcentagens indicam o grau de similaridade dos compostos.

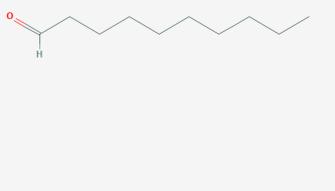
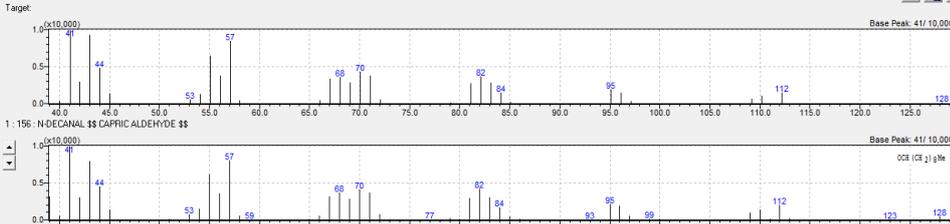
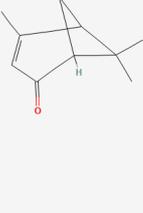
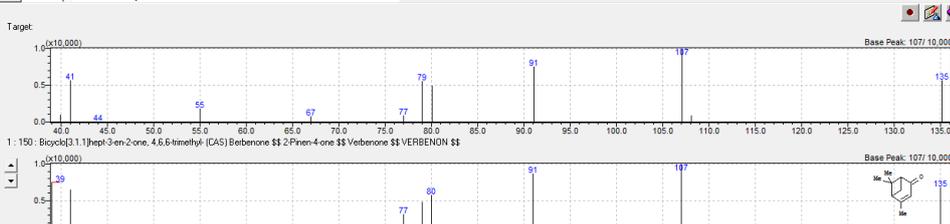
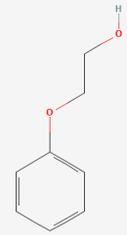
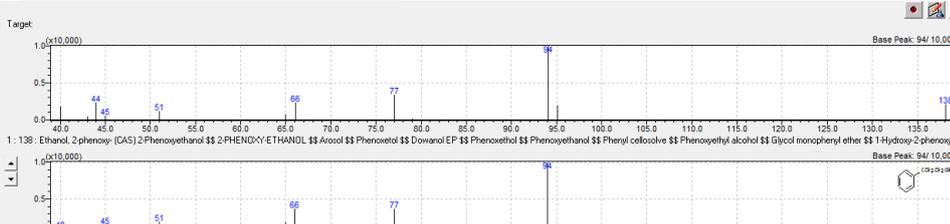
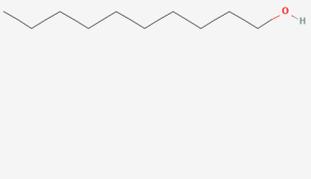
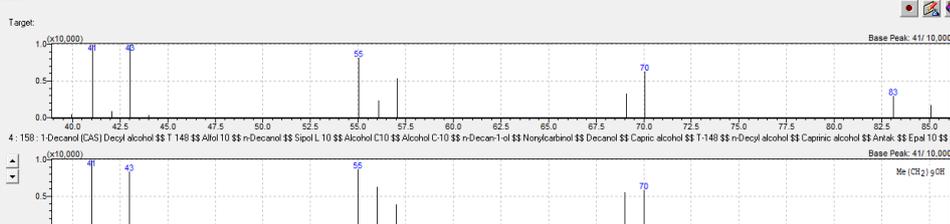
#	Compostos	Espectros de massas																																																																						
1	 <p>heptanal – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>92</td><td>✓</td><td>Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>53</td><td>✓</td><td>Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>86</td><td>✓</td><td>Heptanal \$S n-Heptaldehyde \$S n-Heptanal \$</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>86</td><td>✓</td><td>3-METHYLBUTAN-1-OL \$S</td><td>88</td><td>C5H12O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>85</td><td>✓</td><td>1-Butanol, 3-methyl- (pure) (CAS) 3-Methyl-1-</td><td>88</td><td>C5H12O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>85</td><td>✓</td><td>Butane, 1-chloro-3-methyl-</td><td>106</td><td>C5H11Cl</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>85</td><td>✓</td><td>Butane, 1-chloro-3-methyl-</td><td>106</td><td>C5H11Cl</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>85</td><td>✓</td><td>Butane, 1-chloro-3-methyl- (CAS) 1-Chloro-3-m</td><td>106</td><td>C5H11Cl</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>84</td><td>✓</td><td>Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI	2	53	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI	3	86	✓	Heptanal \$S n-Heptaldehyde \$S n-Heptanal \$	114	C7H14O	NIST107.LIB	4	86	✓	3-METHYLBUTAN-1-OL \$S	88	C5H12O	WILEY229.LI	5	85	✓	1-Butanol, 3-methyl- (pure) (CAS) 3-Methyl-1-	88	C5H12O	WILEY229.LI	6	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl-	106	C5H11Cl	NIST21.LIB	7	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl-	106	C5H11Cl	NIST21.LIB	8	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl- (CAS) 1-Chloro-3-m	106	C5H11Cl	WILEY229.LI	9	84	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI																																																																		
2	53	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI																																																																		
3	86	✓	Heptanal \$S n-Heptaldehyde \$S n-Heptanal \$	114	C7H14O	NIST107.LIB																																																																		
4	86	✓	3-METHYLBUTAN-1-OL \$S	88	C5H12O	WILEY229.LI																																																																		
5	85	✓	1-Butanol, 3-methyl- (pure) (CAS) 3-Methyl-1-	88	C5H12O	WILEY229.LI																																																																		
6	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl-	106	C5H11Cl	NIST21.LIB																																																																		
7	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl-	106	C5H11Cl	NIST21.LIB																																																																		
8	85	✓	Butane, 1-chloro-3-methyl- (CAS) 1-Chloro-3-m	106	C5H11Cl	WILEY229.LI																																																																		
9	84	✓	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S 2077204001 H	114	C7H14O	WILEY229.LI																																																																		
2	 <p>ácido hexanóico – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>✓</td><td>HEXANOIC ACID \$S</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>90</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>90</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>89</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid \$S Caproic acid</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>6</td><td>88</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid \$S n-Caproic acid \$S n-Hexano</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>88</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>87</td><td>✓</td><td>CAPROIC ACID \$S HEXANOIC ACID \$S</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex</td><td>116</td><td>C6H12O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	✓	HEXANOIC ACID \$S	116	C6H12O2	WILEY229.LI	2	90	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI	3	90	✓	Hexanoic acid	116	C6H12O2	NIST107.LIB	4	90	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI	5	89	✓	Hexanoic acid \$S Caproic acid	116	C6H12O2	FFNSC1.3lib	6	88	✓	Hexanoic acid \$S n-Caproic acid \$S n-Hexano	116	C6H12O2	NIST107.LIB	7	88	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI	8	87	✓	CAPROIC ACID \$S HEXANOIC ACID \$S	116	C6H12O2	WILEY229.LI	9	87	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	✓	HEXANOIC ACID \$S	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
2	90	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
3	90	✓	Hexanoic acid	116	C6H12O2	NIST107.LIB																																																																		
4	90	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
5	89	✓	Hexanoic acid \$S Caproic acid	116	C6H12O2	FFNSC1.3lib																																																																		
6	88	✓	Hexanoic acid \$S n-Caproic acid \$S n-Hexano	116	C6H12O2	NIST107.LIB																																																																		
7	88	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
8	87	✓	CAPROIC ACID \$S HEXANOIC ACID \$S	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
9	87	✓	Hexanoic acid (CAS) n-Hexanoic acid \$S Hex	116	C6H12O2	WILEY229.LI																																																																		
3	 <p>octanal – 98%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>98</td><td>✓</td><td>Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde</td><td>128</td><td>C8H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>93</td><td>✓</td><td>n-OCTANAL \$S CAPRILIC ALDEHYDE \$S</td><td>128</td><td>C8H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td>✓</td><td>Hydroperoxide, hexyl \$S Hexyl hydroperoxide</td><td>118</td><td>C8H16O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>89</td><td>✓</td><td>Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde</td><td>128</td><td>C8H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>86</td><td>✓</td><td>1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$</td><td>102</td><td>C6H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>86</td><td>✓</td><td>1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$</td><td>102</td><td>C6H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>86</td><td>✓</td><td>1-Hexene \$S Hexene-1 \$S 1-Hexene \$S 1-C</td><td>84</td><td>C6H12</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>86</td><td>✓</td><td>Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>86</td><td>✓</td><td>1-Hexene (CAS) Hexene-1 \$S 1-n-Hexene \$S</td><td>84</td><td>C6H12</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	98	✓	Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde	128	C8H16O	WILEY229.LI	2	93	✓	n-OCTANAL \$S CAPRILIC ALDEHYDE \$S	128	C8H16O	WILEY229.LI	3	90	✓	Hydroperoxide, hexyl \$S Hexyl hydroperoxide	118	C8H16O2	NIST08.LIB	4	89	✓	Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde	128	C8H16O	WILEY229.LI	5	86	✓	1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$	102	C6H14O	WILEY229.LI	6	86	✓	1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$	102	C6H14O	WILEY229.LI	7	86	✓	1-Hexene \$S Hexene-1 \$S 1-Hexene \$S 1-C	84	C6H12	NIST08.LIB	8	86	✓	Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI	9	86	✓	1-Hexene (CAS) Hexene-1 \$S 1-n-Hexene \$S	84	C6H12	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	98	✓	Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde	128	C8H16O	WILEY229.LI																																																																		
2	93	✓	n-OCTANAL \$S CAPRILIC ALDEHYDE \$S	128	C8H16O	WILEY229.LI																																																																		
3	90	✓	Hydroperoxide, hexyl \$S Hexyl hydroperoxide	118	C8H16O2	NIST08.LIB																																																																		
4	89	✓	Octanal (CAS) n-Octanal \$S n-Octyl \$S Alde	128	C8H16O	WILEY229.LI																																																																		
5	86	✓	1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$	102	C6H14O	WILEY229.LI																																																																		
6	86	✓	1-Hexanol (CAS) n-Hexanol \$S Amylcarbinol \$	102	C6H14O	WILEY229.LI																																																																		
7	86	✓	1-Hexene \$S Hexene-1 \$S 1-Hexene \$S 1-C	84	C6H12	NIST08.LIB																																																																		
8	86	✓	Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
9	86	✓	1-Hexene (CAS) Hexene-1 \$S 1-n-Hexene \$S	84	C6H12	WILEY229.LI																																																																		
4	 <p>2-etilhexan-1-ol – 84%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>84</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>84</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>84</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>84</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl-4-methyl-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>84</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>83</td><td>✓</td><td>Hexanol -2-ethyl- \$S 1-Hexanol, 2-ethyl-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>7</td><td>83</td><td>✓</td><td>2 ETHYL HEXANOL \$S</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>83</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>83</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl-</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table>  	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI	2	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI	3	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB	4	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-4-methyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB	5	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI	6	83	✓	Hexanol -2-ethyl- \$S 1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	FFNSC1.3lib	7	83	✓	2 ETHYL HEXANOL \$S	130	C8H18O	WILEY229.LI	8	83	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI	9	83	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
2	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
3	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB																																																																		
4	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-4-methyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB																																																																		
5	84	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
6	83	✓	Hexanol -2-ethyl- \$S 1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	FFNSC1.3lib																																																																		
7	83	✓	2 ETHYL HEXANOL \$S	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
8	83	✓	1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$S 2-	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
9	83	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C8H18O	NIST21.LIB																																																																		

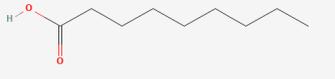
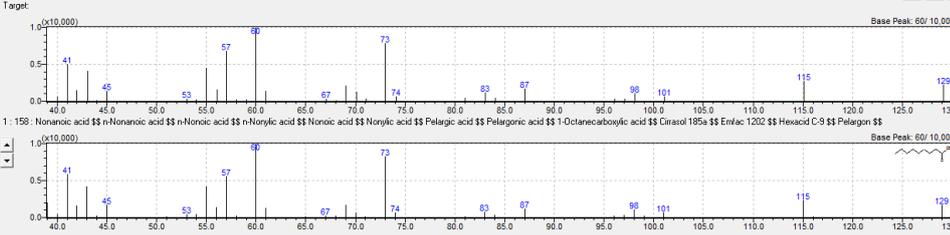
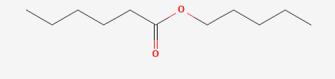
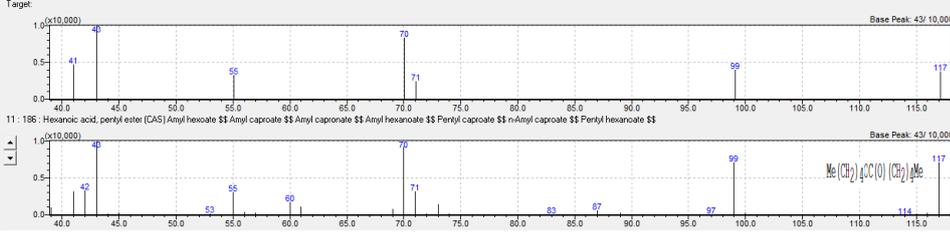
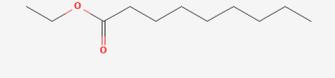
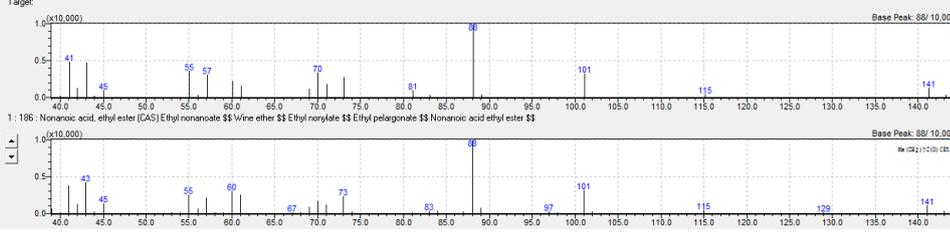
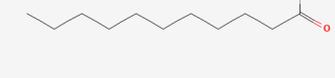
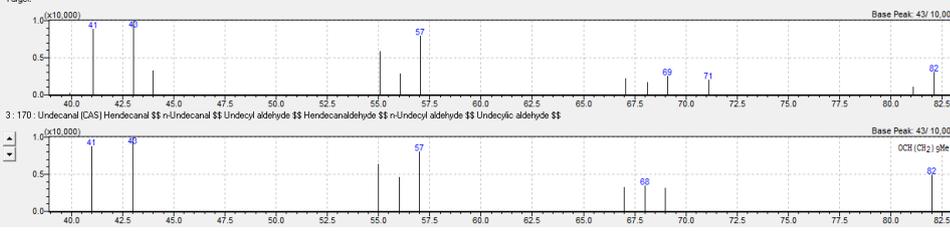
5	 <p>limoneno – 78%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Recip</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>77</td> <td>77</td> <td>LIMONENE \$S</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>78</td> <td>78</td> <td>Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-meth</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>FFNSC1.3.LI</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>78</td> <td>78</td> <td>1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$</td> <td>122</td> <td>C9H14</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>78</td> <td>78</td> <td>1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$ 2-Methylene-1</td> <td>122</td> <td>C9H14</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>78</td> <td>78</td> <td>d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>77</td> <td>77</td> <td>L-LIMONENE \$S\$</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>77</td> <td>77</td> <td>Cyclobutane, 1,3-disopropenyl-, trans</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>77</td> <td>77</td> <td>d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>11</td> <td>77</td> <td>77</td> <td>TRANS-1,3-DISOPROPENYL-CYCLOBUTA</td> <td>136</td> <td>C10H16</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 68/10,000</p> <p>3:136: LIMONENE \$S\$ Base Peak: 68/10,000</p>	Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	77	77	LIMONENE \$S	136	C10H16	WILEY229.LI	4	78	78	Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-meth	136	C10H16	FFNSC1.3.LI	5	78	78	1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$	122	C9H14	NIST107.LIB	6	78	78	1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$ 2-Methylene-1	122	C9H14	NIST08.LIB	7	78	78	d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me	136	C10H16	WILEY229.LI	8	77	77	L-LIMONENE \$S\$	136	C10H16	WILEY229.LI	9	77	77	Cyclobutane, 1,3-disopropenyl-, trans	136	C10H16	NIST08.LIB	10	77	77	d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me	136	C10H16	WILEY229.LI	11	77	77	TRANS-1,3-DISOPROPENYL-CYCLOBUTA	136	C10H16	WILEY229.LI
Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	77	77	LIMONENE \$S	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
4	78	78	Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-meth	136	C10H16	FFNSC1.3.LI																																																																		
5	78	78	1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$	122	C9H14	NIST107.LIB																																																																		
6	78	78	1,7-Octadiene, 3-methylene-\$S\$ 2-Methylene-1	122	C9H14	NIST08.LIB																																																																		
7	78	78	d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
8	77	77	L-LIMONENE \$S\$	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
9	77	77	Cyclobutane, 1,3-disopropenyl-, trans	136	C10H16	NIST08.LIB																																																																		
10	77	77	d-Limonene \$S\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-me	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
11	77	77	TRANS-1,3-DISOPROPENYL-CYCLOBUTA	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
6	 <p>álcool benzílico – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Recip</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>95</td> <td>95</td> <td>Benzyl alcohol \$S\$ Benzenemethanol</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>FFNSC1.3.LI</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>93</td> <td>93</td> <td>BENZYL ALCOHOL \$S\$</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>93</td> <td>93</td> <td>Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>meso-Hydrobenzoin \$S\$ meso-Stilbene glycol \$S\$</td> <td>214</td> <td>C14H14O2</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>BENZYL ALCOHOL \$S\$</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>Benzyl Alcohol</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>92</td> <td>92</td> <td>Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha</td> <td>108</td> <td>C7H8O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 79/10,000</p> <p>1:108: Benzyl alcohol \$S\$ Benzenemethanol Base Peak: 79/10,000</p>	Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	95	95	Benzyl alcohol \$S\$ Benzenemethanol	108	C7H8O	FFNSC1.3.LI	2	93	93	BENZYL ALCOHOL \$S\$	108	C7H8O	WILEY229.LI	3	93	93	Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be	108	C7H8O	WILEY229.LI	4	92	92	meso-Hydrobenzoin \$S\$ meso-Stilbene glycol \$S\$	214	C14H14O2	NIST107.LIB	5	92	92	BENZYL ALCOHOL \$S\$	108	C7H8O	WILEY229.LI	6	92	92	Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha	108	C7H8O	NIST08.LIB	7	92	92	Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be	108	C7H8O	WILEY229.LI	8	92	92	Benzyl Alcohol	108	C7H8O	NIST21.LIB	9	92	92	Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha	108	C7H8O	NIST107.LIB
Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	95	95	Benzyl alcohol \$S\$ Benzenemethanol	108	C7H8O	FFNSC1.3.LI																																																																		
2	93	93	BENZYL ALCOHOL \$S\$	108	C7H8O	WILEY229.LI																																																																		
3	93	93	Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be	108	C7H8O	WILEY229.LI																																																																		
4	92	92	meso-Hydrobenzoin \$S\$ meso-Stilbene glycol \$S\$	214	C14H14O2	NIST107.LIB																																																																		
5	92	92	BENZYL ALCOHOL \$S\$	108	C7H8O	WILEY229.LI																																																																		
6	92	92	Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha	108	C7H8O	NIST08.LIB																																																																		
7	92	92	Benzenemethanol (CAS) Benzyl alcohol \$S\$ Be	108	C7H8O	WILEY229.LI																																																																		
8	92	92	Benzyl Alcohol	108	C7H8O	NIST21.LIB																																																																		
9	92	92	Benzyl Alcohol \$S\$ Benzenemethanol \$S\$ alpha	108	C7H8O	NIST107.LIB																																																																		
7	 <p>2-fenilacetaldeído – 81%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Recip</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>Phenylacetaldehyde \$S\$ Benzeneacetaldehyde</td> <td>120</td> <td>C8H8O</td> <td>FFNSC1.3.LI</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>Benzeneacetaldehyde \$S\$ Acetaldehyde, phen</td> <td>120</td> <td>C8H8O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>METHYLFULVENE \$S\$</td> <td>92</td> <td>C7H8</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>ETHINYLCYCLOPENTENE(2) \$S\$</td> <td>92</td> <td>C7H8</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>ETHINYLCYCLOPENTENE(1) \$S\$</td> <td>92</td> <td>C7H8</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>81</td> <td>81</td> <td>Tetracyclo[4.1.0.0(2,4).0(3,5)]heptane (CAS)</td> <td>92</td> <td>C7H8</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>80</td> <td>80</td> <td>Benzeneacetaldehyde</td> <td>120</td> <td>C8H8O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>11</td> <td>80</td> <td>80</td> <td>Benzene, 2-benzylpropyl 1-methoxy-4-(2-nitroeth</td> <td>285</td> <td>C16H18NO4</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>12</td> <td>80</td> <td>80</td> <td>Benzeneacetaldehyde</td> <td>120</td> <td>C8H8O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 91/10,000</p> <p>4:120: Phenylacetaldehyde \$S\$ Benzeneacetaldehyde Base Peak: 91/10,000</p>	Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	81	81	Phenylacetaldehyde \$S\$ Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	FFNSC1.3.LI	5	81	81	Benzeneacetaldehyde \$S\$ Acetaldehyde, phen	120	C8H8O	NIST08.LIB	6	81	81	METHYLFULVENE \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI	7	81	81	ETHINYLCYCLOPENTENE(2) \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI	8	81	81	ETHINYLCYCLOPENTENE(1) \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI	9	81	81	Tetracyclo[4.1.0.0(2,4).0(3,5)]heptane (CAS)	92	C7H8	WILEY229.LI	10	80	80	Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	NIST21.LIB	11	80	80	Benzene, 2-benzylpropyl 1-methoxy-4-(2-nitroeth	285	C16H18NO4	NIST08.LIB	12	80	80	Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	NIST21.LIB
Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	81	81	Phenylacetaldehyde \$S\$ Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	FFNSC1.3.LI																																																																		
5	81	81	Benzeneacetaldehyde \$S\$ Acetaldehyde, phen	120	C8H8O	NIST08.LIB																																																																		
6	81	81	METHYLFULVENE \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI																																																																		
7	81	81	ETHINYLCYCLOPENTENE(2) \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI																																																																		
8	81	81	ETHINYLCYCLOPENTENE(1) \$S\$	92	C7H8	WILEY229.LI																																																																		
9	81	81	Tetracyclo[4.1.0.0(2,4).0(3,5)]heptane (CAS)	92	C7H8	WILEY229.LI																																																																		
10	80	80	Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	NIST21.LIB																																																																		
11	80	80	Benzene, 2-benzylpropyl 1-methoxy-4-(2-nitroeth	285	C16H18NO4	NIST08.LIB																																																																		
12	80	80	Benzeneacetaldehyde	120	C8H8O	NIST21.LIB																																																																		
8	 <p>1-feniletanol – 87%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Recip</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>87</td> <td>87</td> <td>Phenylethanol (R)-\$S\$ Benzenemethanol, alpha-methyl-</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>FFNSC1.3.LI</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>85</td> <td>85</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>85</td> <td>85</td> <td>acetylphenylcarbinol \$S\$</td> <td>150</td> <td>C9H10O2</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>84</td> <td>84</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>84</td> <td>84</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl-, (S)- \$S\$</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>83</td> <td>83</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>82</td> <td>82</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>82</td> <td>82</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>82</td> <td>82</td> <td>Benzenemethanol, alpha-methyl-, (R)- \$S\$</td> <td>122</td> <td>C9H10O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 79/10,000</p> <p>1:122: Phenylethanol (alpha)- \$S\$ Benzenemethanol, alpha-methyl- Base Peak: 79/10,000</p>	Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	87	87	Phenylethanol (R)-\$S\$ Benzenemethanol, alpha-methyl-	122	C9H10O	FFNSC1.3.LI	2	85	85	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI	3	85	85	acetylphenylcarbinol \$S\$	150	C9H10O2	WILEY229.LI	4	84	84	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI	5	84	84	Benzenemethanol, alpha-methyl-, (S)- \$S\$	122	C9H10O	NIST107.LIB	6	83	83	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI	7	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI	8	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI	9	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl-, (R)- \$S\$	122	C9H10O	NIST107.LIB
Hit	Similar	Recip	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	87	87	Phenylethanol (R)-\$S\$ Benzenemethanol, alpha-methyl-	122	C9H10O	FFNSC1.3.LI																																																																		
2	85	85	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI																																																																		
3	85	85	acetylphenylcarbinol \$S\$	150	C9H10O2	WILEY229.LI																																																																		
4	84	84	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI																																																																		
5	84	84	Benzenemethanol, alpha-methyl-, (S)- \$S\$	122	C9H10O	NIST107.LIB																																																																		
6	83	83	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI																																																																		
7	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI																																																																		
8	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl- (CAS) 1-Ph	122	C9H10O	WILEY229.LI																																																																		
9	82	82	Benzenemethanol, alpha-methyl-, (R)- \$S\$	122	C9H10O	NIST107.LIB																																																																		

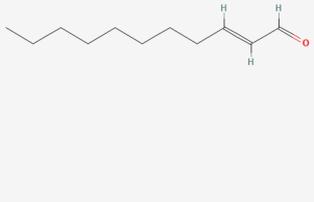
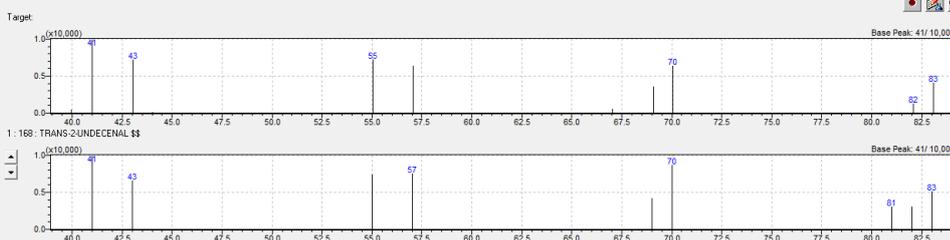
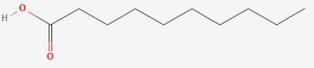
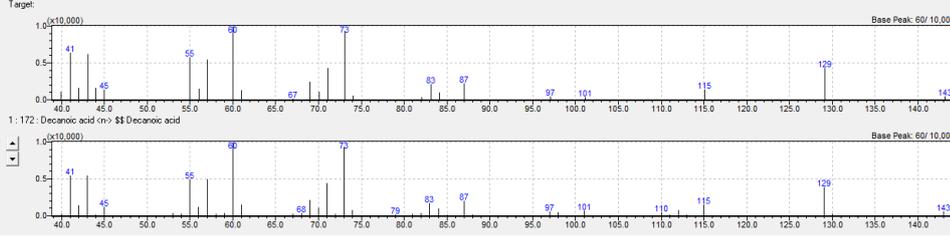
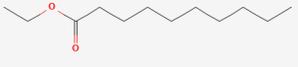
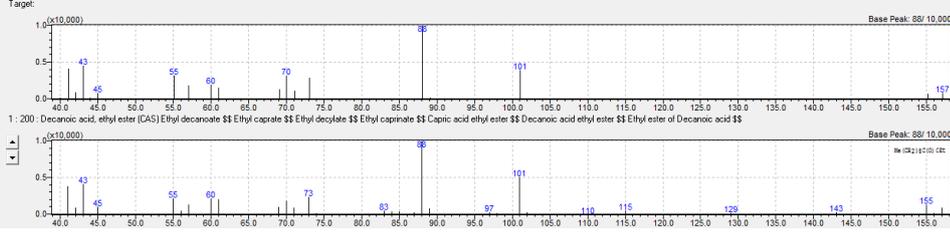
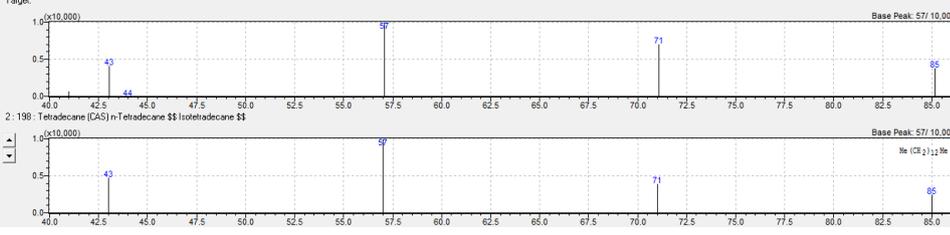
9	 <p>1-feniletanona – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Reg</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>95</td><td>✓</td><td>Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl-</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>2</td><td>95</td><td>✓</td><td>Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>95</td><td>✓</td><td>Acetophenone</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>95</td><td>✓</td><td>Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>94</td><td>✓</td><td>Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>94</td><td>✓</td><td>Acetophenone</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>94</td><td>✓</td><td>Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>94</td><td>✓</td><td>Acetophenone</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>94</td><td>✓</td><td>Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac</td><td>120</td><td>C8H8O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	95	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl-	120	C8H8O	FFNSC1.3lib	2	95	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac	120	C8H8O	NIST107.LIB	3	95	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB	4	95	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI	5	94	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI	6	94	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB	7	94	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI	8	94	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB	9	94	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac	120	C8H8O	NIST08.LIB
Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	95	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl-	120	C8H8O	FFNSC1.3lib																																																																		
2	95	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac	120	C8H8O	NIST107.LIB																																																																		
3	95	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB																																																																		
4	95	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI																																																																		
5	94	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI																																																																		
6	94	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB																																																																		
7	94	✓	Ethanone, 1-phenyl- (CAS) Acetophenone \$\$	120	C8H8O	WILEY229.LI																																																																		
8	94	✓	Acetophenone	120	C8H8O	NIST21.LIB																																																																		
9	94	✓	Acetophenone \$\$ Ethanone, 1-phenyl- \$\$ Ac	120	C8H8O	NIST08.LIB																																																																		
10	 <p>octan-1-ol – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Reg</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>93</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>93</td><td>✓</td><td>1,1-Dioctyloctane \$\$</td><td>370</td><td>C24H50O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>93</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>92</td><td>✓</td><td>1-Octanol</td><td>130</td><td>C8H18O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	93	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	2	93	✓	1,1-Dioctyloctane \$\$	370	C24H50O2	WILEY229.LI	3	93	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	4	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	5	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	6	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	7	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI	8	92	✓	1-Octanol	130	C8H18O	NIST21.LIB	9	92	✓	1-Octanol	130	C8H18O	NIST21.LIB
Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	93	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
2	93	✓	1,1-Dioctyloctane \$\$	370	C24H50O2	WILEY229.LI																																																																		
3	93	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
4	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
5	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
6	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
7	92	✓	1-Octanol (CAS) Octlin \$\$ Afal B \$\$ Spol L8	130	C8H18O	WILEY229.LI																																																																		
8	92	✓	1-Octanol	130	C8H18O	NIST21.LIB																																																																		
9	92	✓	1-Octanol	130	C8H18O	NIST21.LIB																																																																		
11	 <p>ácido heptánico – 90%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Reg</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>80</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid \$\$ Enanthic acid \$\$ n-Heptan</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>88</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid <math>\langle\text{chem}> \$\$ Heptanoic acid</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>4</td><td>88</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>88</td><td>✓</td><td>heptanoic acid \$\$</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>88</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>88</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>87</td><td>✓</td><td>Heptanoic acid</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td>✓</td><td>HEPTANOIC ACID \$\$</td><td>130</td><td>C7H14O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	80	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB	2	89	✓	Heptanoic acid \$\$ Enanthic acid \$\$ n-Heptan	130	C7H14O2	NIST08.LIB	3	88	✓	Heptanoic acid <math>\langle\text{chem}> \$\$ Heptanoic acid	130	C7H14O2	FFNSC1.3lib	4	88	✓	Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi	130	C7H14O2	WILEY229.LI	5	88	✓	heptanoic acid \$\$	130	C7H14O2	WILEY229.LI	6	88	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB	7	88	✓	Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi	130	C7H14O2	WILEY229.LI	8	87	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB	9	87	✓	HEPTANOIC ACID \$\$	130	C7H14O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	80	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB																																																																		
2	89	✓	Heptanoic acid \$\$ Enanthic acid \$\$ n-Heptan	130	C7H14O2	NIST08.LIB																																																																		
3	88	✓	Heptanoic acid <math>\langle\text{chem}> \$\$ Heptanoic acid	130	C7H14O2	FFNSC1.3lib																																																																		
4	88	✓	Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi	130	C7H14O2	WILEY229.LI																																																																		
5	88	✓	heptanoic acid \$\$	130	C7H14O2	WILEY229.LI																																																																		
6	88	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB																																																																		
7	88	✓	Heptanoic acid (CAS) Heptic acid \$\$ Enanthi	130	C7H14O2	WILEY229.LI																																																																		
8	87	✓	Heptanoic acid	130	C7H14O2	NIST21.LIB																																																																		
9	87	✓	HEPTANOIC ACID \$\$	130	C7H14O2	WILEY229.LI																																																																		
12	 <p>terpinoleno – 85%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Reg</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>89</td><td>✓</td><td>alpha-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-m</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td>✓</td><td>terpinolene \$\$</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>83</td><td>✓</td><td>2,5,5-Trimethylbicyclo[4.1.0]heptan-2-ol \$\$ Bic</td><td>154</td><td>C10H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>83</td><td>✓</td><td>Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dime</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>82</td><td>✓</td><td>alpha-Terpinene \$\$ ALPHA-TERPINENE \$\$</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>82</td><td>✓</td><td>Alpha-Terpinene \$\$</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>82</td><td>✓</td><td>4-Terpinenyl acetate \$\$ 3-Cyclohexen-1-ol, 4-</td><td>196</td><td>C12H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>82</td><td>✓</td><td>terpinolene \$\$</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>82</td><td>✓</td><td>gamma-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-</td><td>136</td><td>C10H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	89	✓	alpha-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-m	136	C10H16	WILEY229.LI	2	89	✓	terpinolene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI	3	83	✓	2,5,5-Trimethylbicyclo[4.1.0]heptan-2-ol \$\$ Bic	154	C10H18O	WILEY229.LI	4	83	✓	Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dime	136	C10H16	WILEY229.LI	5	82	✓	alpha-Terpinene \$\$ ALPHA-TERPINENE \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI	6	82	✓	Alpha-Terpinene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI	7	82	✓	4-Terpinenyl acetate \$\$ 3-Cyclohexen-1-ol, 4-	196	C12H20O2	WILEY229.LI	8	82	✓	terpinolene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI	9	82	✓	gamma-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-	136	C10H16	WILEY229.LI
Hit	Similar	Reg	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	89	✓	alpha-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-m	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
2	89	✓	terpinolene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
3	83	✓	2,5,5-Trimethylbicyclo[4.1.0]heptan-2-ol \$\$ Bic	154	C10H18O	WILEY229.LI																																																																		
4	83	✓	Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dime	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
5	82	✓	alpha-Terpinene \$\$ ALPHA-TERPINENE \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
6	82	✓	Alpha-Terpinene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
7	82	✓	4-Terpinenyl acetate \$\$ 3-Cyclohexen-1-ol, 4-	196	C12H20O2	WILEY229.LI																																																																		
8	82	✓	terpinolene \$\$	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		
9	82	✓	gamma-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-	136	C10H16	WILEY229.LI																																																																		

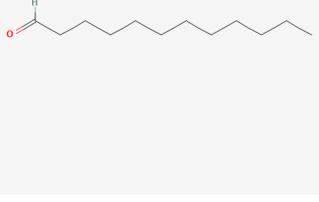
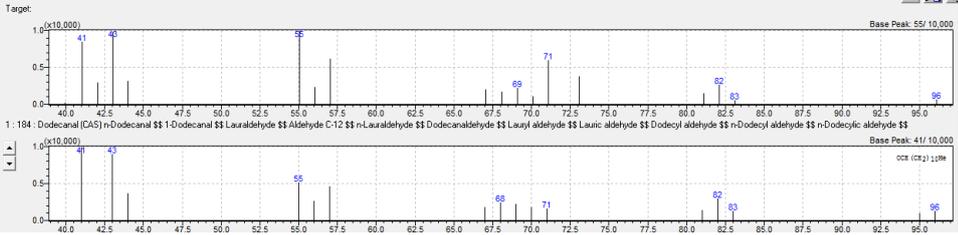
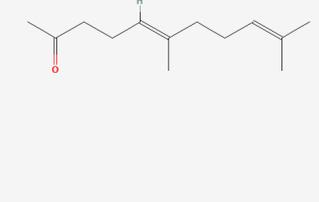
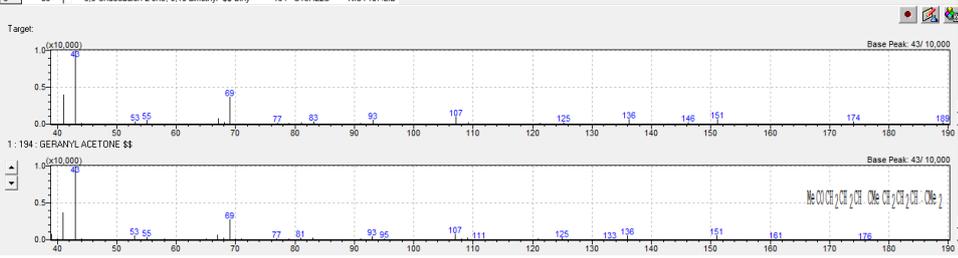
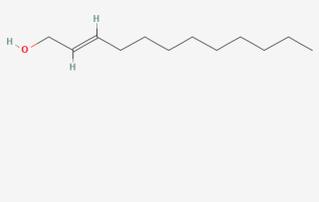
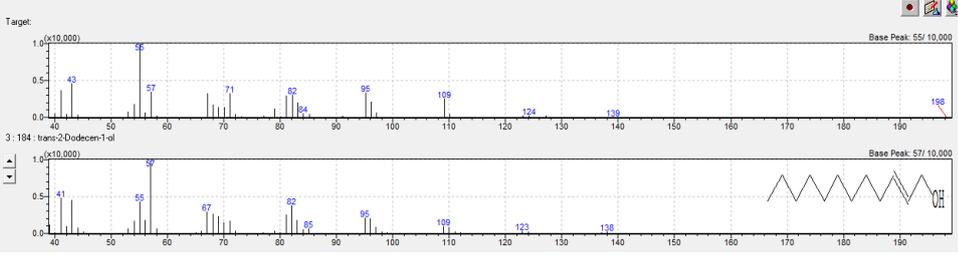
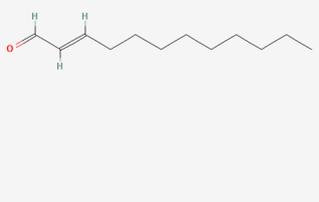
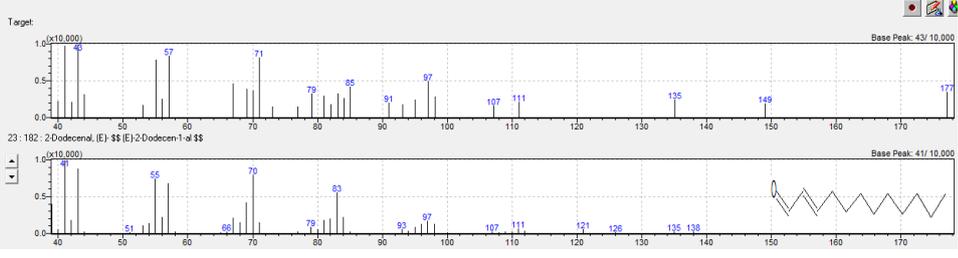
13	 <p>nonan-2-ona – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2</td><td>92</td><td></td><td>2-Nonanone (CAS) Methyl heptyl ketone \$N</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>92</td><td></td><td>Pentanal, 2-methyl-</td><td>100</td><td>C8H16O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>92</td><td></td><td>Pentanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylpentanal \$S</td><td>100</td><td>C8H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td></td><td>Z-nonanone \$S</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td></td><td>2-Nonanone</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>91</td><td></td><td>Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>91</td><td></td><td>Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td></td><td>Hexanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylhexanal \$S</td><td>114</td><td>C7H14O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>10</td><td>90</td><td></td><td>Methyl lavender ketone \$S 2-Nonanone, 3-fury</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 58/10,000</p> <p>2: 142: 2-Nonanone (CAS) Methyl heptyl ketone \$N Nonan-2-one \$S Heptyl methyl ketone \$S Methyl n-heptyl ketone \$S</p>  <p>Base Peak: 58/10,000</p> <p>Me (C21) (C36)</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	2	92		2-Nonanone (CAS) Methyl heptyl ketone \$N	142	C9H18O	WILEY229.LI	3	92		Pentanal, 2-methyl-	100	C8H16O	NIST1.LIB	4	92		Pentanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylpentanal \$S	100	C8H16O	WILEY229.LI	5	91		Z-nonanone \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI	6	91		2-Nonanone	142	C9H18O	NIST1.LIB	7	91		Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M	114	C7H14O	NIST08.LIB	8	91		Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M	114	C7H14O	NIST107.LIB	9	90		Hexanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylhexanal \$S	114	C7H14O	WILEY229.LI	10	90		Methyl lavender ketone \$S 2-Nonanone, 3-fury	172	C10H20O2	FFNSC1.3lib
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
2	92		2-Nonanone (CAS) Methyl heptyl ketone \$N	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
3	92		Pentanal, 2-methyl-	100	C8H16O	NIST1.LIB																																																																		
4	92		Pentanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylpentanal \$S	100	C8H16O	WILEY229.LI																																																																		
5	91		Z-nonanone \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
6	91		2-Nonanone	142	C9H18O	NIST1.LIB																																																																		
7	91		Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M	114	C7H14O	NIST08.LIB																																																																		
8	91		Hexanal, 2-methyl- \$S 2-Methylhexanal \$S 2-M	114	C7H14O	NIST107.LIB																																																																		
9	90		Hexanal, 2-methyl- (CAS) 2-Methylhexanal \$S	114	C7H14O	WILEY229.LI																																																																		
10	90		Methyl lavender ketone \$S 2-Nonanone, 3-fury	172	C10H20O2	FFNSC1.3lib																																																																		
14	 <p>nonanal – 97%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>97</td><td></td><td>Nonanal</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>97</td><td></td><td>Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>97</td><td></td><td>Nonanal (n-> \$S Nonanal</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>4</td><td>96</td><td></td><td>Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>96</td><td></td><td>NONANAL \$S</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>96</td><td></td><td>Nonanal</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>96</td><td></td><td>NONANAL \$S</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>96</td><td></td><td>Nonanal \$S n-Nonaldehyde \$S n-Nonanal \$S</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>95</td><td></td><td>Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde</td><td>142</td><td>C9H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 57/10,000</p> <p>1: 142: Nonanal</p>  <p>Base Peak: 41/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	97		Nonanal	142	C9H18O	NIST1.LIB	2	97		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI	3	97		Nonanal (n-> \$S Nonanal	142	C9H18O	FFNSC1.3lib	4	96		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI	5	96		NONANAL \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI	6	96		Nonanal	142	C9H18O	NIST1.LIB	7	96		NONANAL \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI	8	96		Nonanal \$S n-Nonaldehyde \$S n-Nonanal \$S	142	C9H18O	NIST08.LIB	9	95		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	97		Nonanal	142	C9H18O	NIST1.LIB																																																																		
2	97		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
3	97		Nonanal (n-> \$S Nonanal	142	C9H18O	FFNSC1.3lib																																																																		
4	96		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
5	96		NONANAL \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
6	96		Nonanal	142	C9H18O	NIST1.LIB																																																																		
7	96		NONANAL \$S	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
8	96		Nonanal \$S n-Nonaldehyde \$S n-Nonanal \$S	142	C9H18O	NIST08.LIB																																																																		
9	95		Nonanal (CAS) n-Nonanal \$S n-Nonyl aldehyde	142	C9H18O	WILEY229.LI																																																																		
15	 <p>ácido 2-etil hexánico – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>92</td><td></td><td>Hexanoic acid, 2-ethyl- (CAS) Ethylhexanoic acid</td><td>144</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td></td><td>Hexanoic acid, 2-ethyl-> \$S Hexanoic acid, 2-</td><td>144</td><td>C8H16O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>3</td><td>89</td><td></td><td>Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic</td><td>144</td><td>C8H16O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>88</td><td></td><td>Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic</td><td>144</td><td>C8H16O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>87</td><td></td><td>2-ETHYLHEXANOIC ACID \$S</td><td>144</td><td>C8H16O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>84</td><td></td><td>Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>84</td><td></td><td>Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>84</td><td></td><td>Hexanoic acid, 2-ethyl-</td><td>144</td><td>C8H16O2</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>84</td><td></td><td>Heptanoic acid, 2-ethyl- (CAS) 2-ETHYL-HEP</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 73/10,000</p> <p>1: 144: Hexanoic acid, 2-ethyl- (CAS) Ethylhexanoic acid \$S Ethylhexanoic acid \$S 2-Ethylhexanoic acid \$S 2-Ethylcaproic acid \$S 2-Ethylhexanoic acid \$S 2-Butylbutanoic acid \$S Butylacetic acid \$S 3-Heptanecarboxylic acid \$S alpha-Ethylacetic acid \$S</p>  <p>Base Peak: 88/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92		Hexanoic acid, 2-ethyl- (CAS) Ethylhexanoic acid	144	C9H18O2	WILEY229.LI	2	89		Hexanoic acid, 2-ethyl-> \$S Hexanoic acid, 2-	144	C8H16O2	FFNSC1.3lib	3	89		Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic	144	C8H16O2	NIST08.LIB	4	88		Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic	144	C8H16O2	NIST107.LIB	5	87		2-ETHYLHEXANOIC ACID \$S	144	C8H16O2	WILEY229.LI	6	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a	158	C9H18O2	NIST107.LIB	7	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a	158	C9H18O2	NIST08.LIB	8	84		Hexanoic acid, 2-ethyl-	144	C8H16O2	NIST1.LIB	9	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- (CAS) 2-ETHYL-HEP	158	C9H18O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92		Hexanoic acid, 2-ethyl- (CAS) Ethylhexanoic acid	144	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
2	89		Hexanoic acid, 2-ethyl-> \$S Hexanoic acid, 2-	144	C8H16O2	FFNSC1.3lib																																																																		
3	89		Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic	144	C8H16O2	NIST08.LIB																																																																		
4	88		Hexanoic acid, 2-ethyl- \$S alpha-Ethylcaproic	144	C8H16O2	NIST107.LIB																																																																		
5	87		2-ETHYLHEXANOIC ACID \$S	144	C8H16O2	WILEY229.LI																																																																		
6	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a	158	C9H18O2	NIST107.LIB																																																																		
7	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- \$S 2-Ethylheptanoic a	158	C9H18O2	NIST08.LIB																																																																		
8	84		Hexanoic acid, 2-ethyl-	144	C8H16O2	NIST1.LIB																																																																		
9	84		Heptanoic acid, 2-ethyl- (CAS) 2-ETHYL-HEP	158	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
16	 <p>(E)-non-2-enal – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td></td><td>2-Nonenal (E) \$S (E)-2-Nonenal \$S trans-2-N</td><td>140</td><td>C9H16O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>90</td><td></td><td>2-Nonenal (E)</td><td>140</td><td>C9H16O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td></td><td>2-Nonenal (E) (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2</td><td>140</td><td>C9H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>89</td><td></td><td>1-Undecene (CAS) n-1-Undecene \$S alpha-</td><td>154</td><td>C11H22</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>89</td><td></td><td>1-Undecene</td><td>154</td><td>C11H22</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>89</td><td></td><td>1-Decene (CAS) Dec-1-ene \$S n-1-Decene \$S</td><td>140</td><td>C10H20</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>89</td><td></td><td>Octene alpha-> \$S 1-Octene</td><td>112</td><td>C8H16</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>8</td><td>89</td><td></td><td>1-Octene (CAS) Capylene \$S n-1-Octene \$S</td><td>112</td><td>C8H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>89</td><td></td><td>1-Octene</td><td>112</td><td>C8H16</td><td>NIST1.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 41/10,000</p> <p>1: 140: 2-Nonenal (E) \$S (E)-2-Nonenal \$S trans-2-Nonenal \$S</p>  <p>Base Peak: 41/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91		2-Nonenal (E) \$S (E)-2-Nonenal \$S trans-2-N	140	C9H16O	NIST1.LIB	2	90		2-Nonenal (E)	140	C9H16O	NIST107.LIB	3	90		2-Nonenal (E) (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2	140	C9H16O	WILEY229.LI	4	89		1-Undecene (CAS) n-1-Undecene \$S alpha-	154	C11H22	WILEY229.LI	5	89		1-Undecene	154	C11H22	NIST1.LIB	6	89		1-Decene (CAS) Dec-1-ene \$S n-1-Decene \$S	140	C10H20	WILEY229.LI	7	89		Octene alpha-> \$S 1-Octene	112	C8H16	FFNSC1.3lib	8	89		1-Octene (CAS) Capylene \$S n-1-Octene \$S	112	C8H16	WILEY229.LI	9	89		1-Octene	112	C8H16	NIST1.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91		2-Nonenal (E) \$S (E)-2-Nonenal \$S trans-2-N	140	C9H16O	NIST1.LIB																																																																		
2	90		2-Nonenal (E)	140	C9H16O	NIST107.LIB																																																																		
3	90		2-Nonenal (E) (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2	140	C9H16O	WILEY229.LI																																																																		
4	89		1-Undecene (CAS) n-1-Undecene \$S alpha-	154	C11H22	WILEY229.LI																																																																		
5	89		1-Undecene	154	C11H22	NIST1.LIB																																																																		
6	89		1-Decene (CAS) Dec-1-ene \$S n-1-Decene \$S	140	C10H20	WILEY229.LI																																																																		
7	89		Octene alpha-> \$S 1-Octene	112	C8H16	FFNSC1.3lib																																																																		
8	89		1-Octene (CAS) Capylene \$S n-1-Octene \$S	112	C8H16	WILEY229.LI																																																																		
9	89		1-Octene	112	C8H16	NIST1.LIB																																																																		

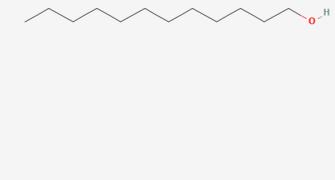
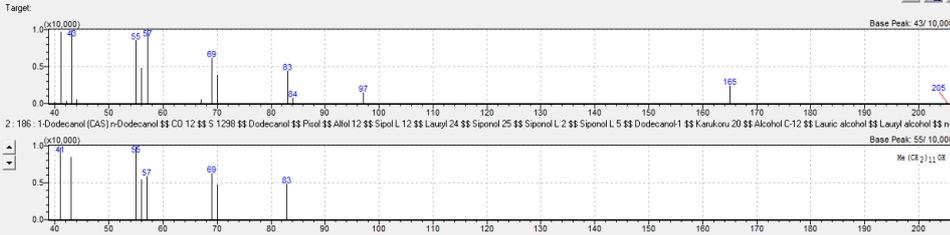
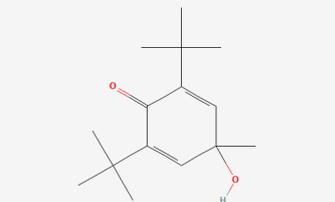
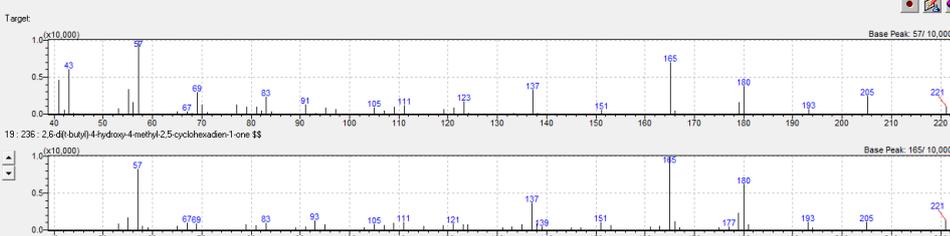
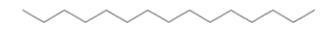
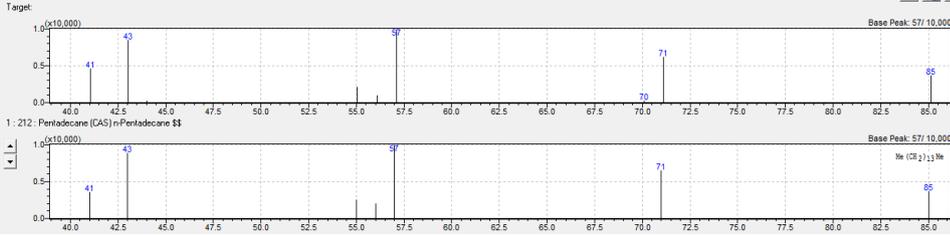
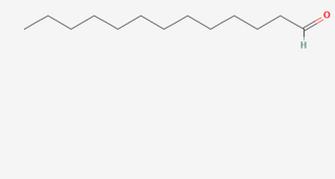
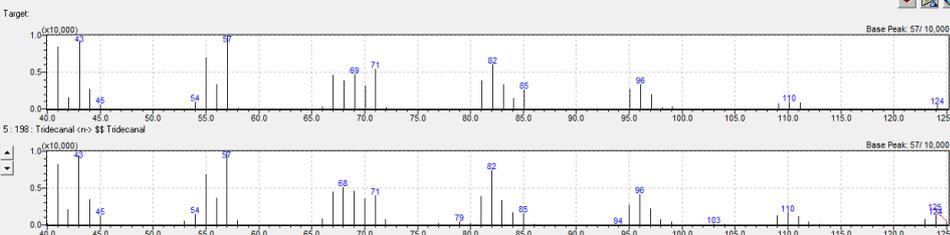
21	 <p>α-terpineol – 86%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>87</td><td>C</td><td>1-α-Terpineol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methanol</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>85</td><td></td><td>3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>81</td><td></td><td>3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>81</td><td></td><td>FORMIC ACID, ISOBORNYL ESTER \$\$ ALP</td><td>162</td><td>C₁₁H₁₈O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>81</td><td></td><td>delta-terpineol \$\$</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>81</td><td></td><td>Myrcenol \$\$ 7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylen</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>79</td><td></td><td>terpinyl acetate \$\$ Terpineol, acetate \$\$</td><td>196</td><td>C₁₂H₂₀O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>78</td><td></td><td>1-alpha-Terpeneol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methan</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>78</td><td></td><td>(endo)-1-(1-hydroxy-1-methyl-2-vinylcyclo</td><td>154</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 59/10,000</p> <p>1: 154: 1-α-Terpineol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-trimethyl-, (S)- [(CAS)] (+)-α-Terpineol \$\$ alpha-Terpeneol, (-)- \$\$ p-Menth-1-en-8-ol, (S)-(+)- \$\$ CYCLI)-alpha-Terpeneol \$\$ CYCLOHEXENE, 1-METHYL-4-(2-FORPROPANOL-2-YL)- \$\$ ALP</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	87	C	1- α -Terpineol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methanol	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	2	85		3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	3	81		3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	4	81		FORMIC ACID, ISOBORNYL ESTER \$\$ ALP	162	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI	5	81		delta-terpineol \$\$	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	6	81		Myrcenol \$\$ 7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylen	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	7	79		terpinyl acetate \$\$ Terpineol, acetate \$\$	196	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	WILEY229.LI	8	78		1-alpha-Terpeneol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methan	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	9	78		(endo)-1-(1-hydroxy-1-methyl-2-vinylcyclo	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	87	C	1- α -Terpineol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methanol	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
2	85		3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
3	81		3-Cyclohexene-1-methanol, alpha, alpha, 4-tri	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
4	81		FORMIC ACID, ISOBORNYL ESTER \$\$ ALP	162	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
5	81		delta-terpineol \$\$	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
6	81		Myrcenol \$\$ 7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylen	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
7	79		terpinyl acetate \$\$ Terpineol, acetate \$\$	196	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
8	78		1-alpha-Terpeneol \$\$ 3-Cyclohexene-1-methan	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
9	78		(endo)-1-(1-hydroxy-1-methyl-2-vinylcyclo	154	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
22	 <p>octanoato de etila – 77%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>12</td><td>77</td><td></td><td>Octanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl caprylat</td><td>172</td><td>C₁₀H₂₀O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>13</td><td>77</td><td></td><td>Oxalic acid, isobutyl pentyl ester</td><td>216</td><td>C₁₁H₂₀O₄</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>14</td><td>76</td><td></td><td>Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester</td><td>130</td><td>C₇H₁₄O₂</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>15</td><td>76</td><td></td><td>Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester \$\$ B</td><td>130</td><td>C₇H₁₄O₂</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>76</td><td></td><td>Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester (CAS</td><td>130</td><td>C₇H₁₄O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>17</td><td>76</td><td></td><td>Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester \$\$ Val</td><td>130</td><td>C₇H₁₄O₂</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>18</td><td>76</td><td></td><td>Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester</td><td>130</td><td>C₇H₁₄O₂</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>76</td><td></td><td>Heptadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl n-</td><td>258</td><td>C₁₉H₃₈O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>20</td><td>76</td><td></td><td>Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$</td><td>326</td><td>C₂₁H₄₂O₂</td><td>NIST107.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 88/10,000</p> <p>12: 172: Octanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl caprylate \$\$ Ethyl octanoate \$\$ Ethyl octoate \$\$ Ethyl n-octanoate \$\$ Caprylic acid ethyl ester \$\$</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	12	77		Octanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl caprylat	172	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	WILEY229.LI	13	77		Oxalic acid, isobutyl pentyl ester	216	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	NIST08.LIB	14	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST21.LIB	15	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester \$\$ B	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST08.LIB	16	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester (CAS	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	WILEY229.LI	17	76		Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester \$\$ Val	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST08.LIB	18	76		Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST21.LIB	19	76		Heptadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl n-	258	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	WILEY229.LI	20	76		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$	326	C ₂₁ H ₄₂ O ₂	NIST107.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
12	77		Octanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl caprylat	172	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
13	77		Oxalic acid, isobutyl pentyl ester	216	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	NIST08.LIB																																																																		
14	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST21.LIB																																																																		
15	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester \$\$ B	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
16	76		Butanoic acid, 2,3-dimethyl-, methyl ester (CAS	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
17	76		Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester \$\$ Val	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
18	76		Pentanoic acid, 2-methyl-, methyl ester	130	C ₇ H ₁₄ O ₂	NIST21.LIB																																																																		
19	76		Heptadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl n-	258	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
20	76		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$	326	C ₂₁ H ₄₂ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
23	 <p>dodecano – 88%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>13</td><td>88</td><td></td><td>Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>14</td><td>88</td><td></td><td>Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>15</td><td>88</td><td></td><td>Octane, 3,5-dimethyl-</td><td>142</td><td>C₁₀H₂₂</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>88</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl- \$\$ Neohexane \$\$ 2,2-Di</td><td>86</td><td>C₆H₁₄</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>17</td><td>88</td><td></td><td>Octane, 3,5-dimethyl- (CAS) 3,5-Dimethyloctan</td><td>142</td><td>C₁₀H₂₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>18</td><td>88</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl-</td><td>86</td><td>C₆H₁₄</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>87</td><td></td><td>Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>20</td><td>87</td><td></td><td>Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane</td><td>156</td><td>C₁₁H₂₄</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>21</td><td>87</td><td></td><td>Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane</td><td>156</td><td>C₁₁H₂₄</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>13: 170: Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904 \$\$ Adakane 12 \$\$ Iodododecane \$\$</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	13	88		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI	14	88		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI	15	88		Octane, 3,5-dimethyl-	142	C ₁₀ H ₂₂	NIST21.LIB	16	88		Butane, 2,2-dimethyl- \$\$ Neohexane \$\$ 2,2-Di	86	C ₆ H ₁₄	NIST08.LIB	17	88		Octane, 3,5-dimethyl- (CAS) 3,5-Dimethyloctan	142	C ₁₀ H ₂₂	WILEY229.LI	18	88		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C ₆ H ₁₄	NIST21.LIB	19	87		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI	20	87		Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane	156	C ₁₁ H ₂₄	NIST21.LIB	21	87		Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane	156	C ₁₁ H ₂₄	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
13	88		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI																																																																		
14	88		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI																																																																		
15	88		Octane, 3,5-dimethyl-	142	C ₁₀ H ₂₂	NIST21.LIB																																																																		
16	88		Butane, 2,2-dimethyl- \$\$ Neohexane \$\$ 2,2-Di	86	C ₆ H ₁₄	NIST08.LIB																																																																		
17	88		Octane, 3,5-dimethyl- (CAS) 3,5-Dimethyloctan	142	C ₁₀ H ₂₂	WILEY229.LI																																																																		
18	88		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C ₆ H ₁₄	NIST21.LIB																																																																		
19	87		Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 51-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI																																																																		
20	87		Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane	156	C ₁₁ H ₂₄	NIST21.LIB																																																																		
21	87		Undecane (CAS) n-Undecane \$\$ Hendecane	156	C ₁₁ H ₂₄	WILEY229.LI																																																																		
24	 <p>mirtenol – 81%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>3</td><td>81</td><td></td><td>Historal \$\$ Cyclo[3.1.1]hept-2-ene</td><td>150</td><td>C₁₁H₁₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>81</td><td></td><td>(2Z,5E)-1,3,5-undecatriene \$\$ 1,3,5-Undecatri</td><td>150</td><td>C₁₁H₁₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>80</td><td></td><td>1,5-Cyclohexadiene-1-methanol, 4-(1-methyl-2</td><td>152</td><td>C₁₀H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>79</td><td></td><td>Bicyclo[3.1.0]hexane, 6-methylene-</td><td>94</td><td>C₇H₁₀</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>79</td><td></td><td>11-Methyl-10Z,13,16-tridecatriene-1,11-diol</td><td>194</td><td>C₁₂H₁₈O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>78</td><td></td><td>Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene \$\$</td><td>94</td><td>C₇H₁₀</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>78</td><td></td><td>Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene</td><td>94</td><td>C₇H₁₀</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>77</td><td></td><td>N,N-Bis[1-(benzoyloxymethyl)methyl]formacet</td><td>431</td><td>C₂₀H₂₂BR</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>77</td><td></td><td>FUCOSERRATEN \$\$ 1,3,5-Octatriene, (Z,E)-</td><td>108</td><td>C₈H₁₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 79/10,000</p> <p>2: 152: Mirtenol \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene-2-methanol, 6,6-dimethyl- (CAS) 2-Pirane-10-ol \$\$</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	3	81		Historal \$\$ Cyclo[3.1.1]hept-2-ene	150	C ₁₁ H ₁₈	WILEY229.LI	4	81		(2Z,5E)-1,3,5-undecatriene \$\$ 1,3,5-Undecatri	150	C ₁₁ H ₁₈	WILEY229.LI	5	80		1,5-Cyclohexadiene-1-methanol, 4-(1-methyl-2	152	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI	6	79		Bicyclo[3.1.0]hexane, 6-methylene-	94	C ₇ H ₁₀	NIST21.LIB	7	79		11-Methyl-10Z,13,16-tridecatriene-1,11-diol	194	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI	8	78		Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene \$\$	94	C ₇ H ₁₀	NIST107.LIB	9	78		Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene	94	C ₇ H ₁₀	NIST08.LIB	10	77		N,N-Bis[1-(benzoyloxymethyl)methyl]formacet	431	C ₂₀ H ₂₂ BR	WILEY229.LI	11	77		FUCOSERRATEN \$\$ 1,3,5-Octatriene, (Z,E)-	108	C ₈ H ₁₂	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
3	81		Historal \$\$ Cyclo[3.1.1]hept-2-ene	150	C ₁₁ H ₁₈	WILEY229.LI																																																																		
4	81		(2Z,5E)-1,3,5-undecatriene \$\$ 1,3,5-Undecatri	150	C ₁₁ H ₁₈	WILEY229.LI																																																																		
5	80		1,5-Cyclohexadiene-1-methanol, 4-(1-methyl-2	152	C ₁₀ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
6	79		Bicyclo[3.1.0]hexane, 6-methylene-	94	C ₇ H ₁₀	NIST21.LIB																																																																		
7	79		11-Methyl-10Z,13,16-tridecatriene-1,11-diol	194	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
8	78		Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene \$\$	94	C ₇ H ₁₀	NIST107.LIB																																																																		
9	78		Bicyclo[3.2.0]hept-6-ene	94	C ₇ H ₁₀	NIST08.LIB																																																																		
10	77		N,N-Bis[1-(benzoyloxymethyl)methyl]formacet	431	C ₂₀ H ₂₂ BR	WILEY229.LI																																																																		
11	77		FUCOSERRATEN \$\$ 1,3,5-Octatriene, (Z,E)-	108	C ₈ H ₁₂	WILEY229.LI																																																																		

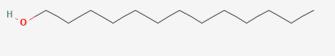
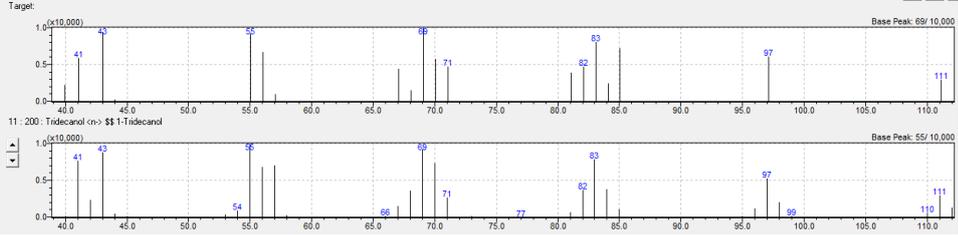
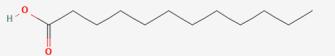
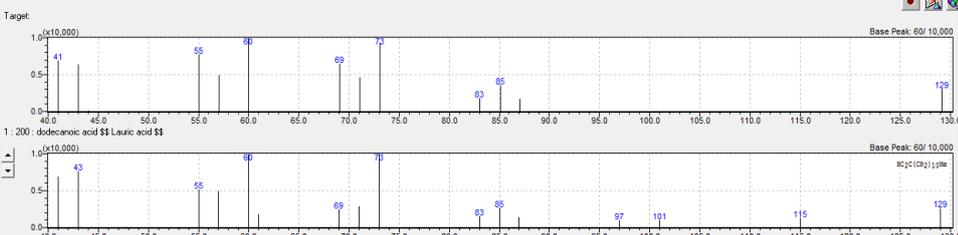
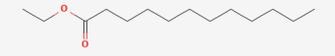
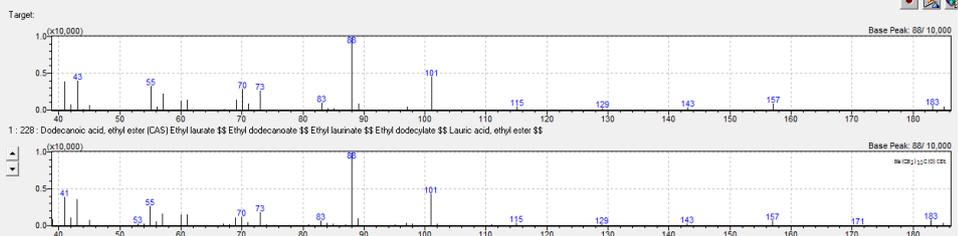
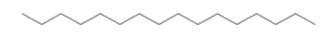
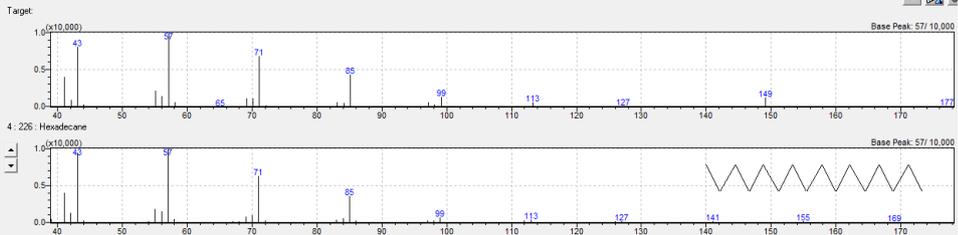
25	 <p>decanal – 97%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>97</td><td>✓</td><td>N-DECANAL \$\$ CAPRIC ALDEHYDE \$\$</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>96</td><td></td><td>Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$</td><td>156</td><td>C10H20O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>96</td><td></td><td>Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>96</td><td></td><td>Decanal</td><td>156</td><td>C10H20O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>96</td><td></td><td>Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>96</td><td></td><td>Decanal</td><td>156</td><td>C10H20O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>96</td><td></td><td>Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$</td><td>156</td><td>C10H20O</td><td>NIST108.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>95</td><td></td><td>Decanal <n> \$\$ Decanal</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>FRISC1.3lib</td></tr> <tr><td>9</td><td>94</td><td></td><td>DECANAL \$\$</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 41/10,000</p>	#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	97	✓	N-DECANAL \$\$ CAPRIC ALDEHYDE \$\$	156	C10 H20 O	WILEY229.LI	2	96		Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$	156	C10H20O	NIST107.LIB	3	96		Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde	156	C10 H20 O	WILEY229.LI	4	96		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB	5	96		Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde	156	C10 H20 O	WILEY229.LI	6	96		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB	7	96		Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$	156	C10H20O	NIST108.LIB	8	95		Decanal <n> \$\$ Decanal	156	C10 H20 O	FRISC1.3lib	9	94		DECANAL \$\$	156	C10 H20 O	WILEY229.LI
#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	97	✓	N-DECANAL \$\$ CAPRIC ALDEHYDE \$\$	156	C10 H20 O	WILEY229.LI																																																																		
2	96		Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$	156	C10H20O	NIST107.LIB																																																																		
3	96		Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde	156	C10 H20 O	WILEY229.LI																																																																		
4	96		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB																																																																		
5	96		Decanal (CAS) n-Decanal \$\$ Decyl aldehyde	156	C10 H20 O	WILEY229.LI																																																																		
6	96		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB																																																																		
7	96		Decanal \$\$ n-Decaldehyde \$\$ n-Decanal \$\$	156	C10H20O	NIST108.LIB																																																																		
8	95		Decanal <n> \$\$ Decanal	156	C10 H20 O	FRISC1.3lib																																																																		
9	94		DECANAL \$\$	156	C10 H20 O	WILEY229.LI																																																																		
26	 <p>verbenona – 84%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>84</td><td>✓</td><td>Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-</td><td>150</td><td>C10 H14 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>82</td><td></td><td>Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-</td><td>150</td><td>C10 H14 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>76</td><td></td><td>5-Methyl-2-methylene-3-vinyl-4-hexenal \$\$ 4-</td><td>150</td><td>C10 H14 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>75</td><td></td><td>MIXTURE OF 2-HYDROXY-1,4,6,7-TETRAM</td><td>178</td><td>C12 H18 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>74</td><td></td><td>Bicyclo[3.1.0]hept-2-en-2-one, 4-methyl-1(1-me</td><td>150</td><td>C10 H14 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>74</td><td></td><td>2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-</td><td>164</td><td>C12 H20</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>74</td><td></td><td>2,5-CYCLOHEXADIENE, 1,4-DIETHYL-1,4-DI</td><td>164</td><td>C12 H20</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>74</td><td></td><td>2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-</td><td>164</td><td>C12 H20</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>73</td><td></td><td>1,5,6,7-Tetrahydro-4-indolone \$\$ 1,5,6,7-Tetra</td><td>135</td><td>C8 H9 NO</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 107/10,000</p>	#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	84	✓	Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI	2	82		Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI	3	76		5-Methyl-2-methylene-3-vinyl-4-hexenal \$\$ 4-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI	4	75		MIXTURE OF 2-HYDROXY-1,4,6,7-TETRAM	178	C12 H18 O	WILEY229.LI	5	74		Bicyclo[3.1.0]hept-2-en-2-one, 4-methyl-1(1-me	150	C10 H14 O	WILEY229.LI	6	74		2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-	164	C12 H20	NIST08.LIB	7	74		2,5-CYCLOHEXADIENE, 1,4-DIETHYL-1,4-DI	164	C12 H20	WILEY229.LI	8	74		2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-	164	C12 H20	NIST107.LIB	9	73		1,5,6,7-Tetrahydro-4-indolone \$\$ 1,5,6,7-Tetra	135	C8 H9 NO	NIST08.LIB
#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	84	✓	Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI																																																																		
2	82		Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-one, 4,6,6-trimethyl-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI																																																																		
3	76		5-Methyl-2-methylene-3-vinyl-4-hexenal \$\$ 4-	150	C10 H14 O	WILEY229.LI																																																																		
4	75		MIXTURE OF 2-HYDROXY-1,4,6,7-TETRAM	178	C12 H18 O	WILEY229.LI																																																																		
5	74		Bicyclo[3.1.0]hept-2-en-2-one, 4-methyl-1(1-me	150	C10 H14 O	WILEY229.LI																																																																		
6	74		2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-	164	C12 H20	NIST08.LIB																																																																		
7	74		2,5-CYCLOHEXADIENE, 1,4-DIETHYL-1,4-DI	164	C12 H20	WILEY229.LI																																																																		
8	74		2,5-Cyclohexadiene, 1,4-diethyl-1,4-dimethyl-	164	C12 H20	NIST107.LIB																																																																		
9	73		1,5,6,7-Tetrahydro-4-indolone \$\$ 1,5,6,7-Tetra	135	C8 H9 NO	NIST08.LIB																																																																		
27	 <p>2-fenoxietanol – 87%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>87</td><td>✓</td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8 H10 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>86</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph</td><td>138</td><td>C8H10O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>86</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph</td><td>138</td><td>C8H10O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>85</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8 H10 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>85</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8H10O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>84</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8H10O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>83</td><td></td><td>2-PHENOXYETHANOL-D \$\$ Ethanol-d, 2phe</td><td>138</td><td>C8 H9 D O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>82</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8 H10 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>81</td><td></td><td>Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol</td><td>138</td><td>C8 H10 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 94/10,000</p>	#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	87	✓	Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI	2	86		Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph	138	C8H10O2	NIST107.LIB	3	86		Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph	138	C8H10O2	NIST08.LIB	4	85		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI	5	85		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8H10O2	NIST21.LIB	6	84		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8H10O2	NIST21.LIB	7	83		2-PHENOXYETHANOL-D \$\$ Ethanol-d, 2phe	138	C8 H9 D O2	WILEY229.LI	8	82		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI	9	81		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI
#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	87	✓	Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI																																																																		
2	86		Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph	138	C8H10O2	NIST107.LIB																																																																		
3	86		Ethanol, 2-phenoxy-, \$\$ beta-Hydroxyethyl ph	138	C8H10O2	NIST08.LIB																																																																		
4	85		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI																																																																		
5	85		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8H10O2	NIST21.LIB																																																																		
6	84		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8H10O2	NIST21.LIB																																																																		
7	83		2-PHENOXYETHANOL-D \$\$ Ethanol-d, 2phe	138	C8 H9 D O2	WILEY229.LI																																																																		
8	82		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI																																																																		
9	81		Ethanol, 2-phenoxy-, (CAS) 2-Phenoxyethanol	138	C8 H10 O2	WILEY229.LI																																																																		
28	 <p>decan-1-ol – 88%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>4</td><td>88</td><td>✓</td><td>Decanal (CAS) Decyl aldehyde \$\$ 1-DECAL</td><td>156</td><td>C10 H20 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>88</td><td></td><td>1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$\$ n-Pe</td><td>228</td><td>C15 H32 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>88</td><td></td><td>2,4-Dimethyl-1-heptene</td><td>126</td><td>C9H18</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>87</td><td></td><td>2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$\$ (E)-2</td><td>140</td><td>C9 H16 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>87</td><td></td><td>1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$ 3,4-Dimethyl-1-pe</td><td>116</td><td>C7H16O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td></td><td>1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$</td><td>116</td><td>C7H16O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>87</td><td></td><td>1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, (CAS) 3,4-DIMETHY</td><td>116</td><td>C7 H16 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>87</td><td></td><td>1,1-Dicyclohexane \$\$</td><td>370</td><td>C24 H50 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>12</td><td>87</td><td></td><td>1-Octene (CAS) Caprylene \$\$ n-1-Octene \$\$</td><td>112</td><td>C8 H16</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 41/10,000</p>	#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	4	88	✓	Decanal (CAS) Decyl aldehyde \$\$ 1-DECAL	156	C10 H20 O	WILEY229.LI	5	88		1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$\$ n-Pe	228	C15 H32 O	WILEY229.LI	6	88		2,4-Dimethyl-1-heptene	126	C9H18	NIST21.LIB	7	87		2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$\$ (E)-2	140	C9 H16 O	WILEY229.LI	8	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$ 3,4-Dimethyl-1-pe	116	C7H16O	NIST08.LIB	9	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$	116	C7H16O	NIST107.LIB	10	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, (CAS) 3,4-DIMETHY	116	C7 H16 O	WILEY229.LI	11	87		1,1-Dicyclohexane \$\$	370	C24 H50 O2	WILEY229.LI	12	87		1-Octene (CAS) Caprylene \$\$ n-1-Octene \$\$	112	C8 H16	WILEY229.LI
#	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
4	88	✓	Decanal (CAS) Decyl aldehyde \$\$ 1-DECAL	156	C10 H20 O	WILEY229.LI																																																																		
5	88		1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$\$ n-Pe	228	C15 H32 O	WILEY229.LI																																																																		
6	88		2,4-Dimethyl-1-heptene	126	C9H18	NIST21.LIB																																																																		
7	87		2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$\$ (E)-2	140	C9 H16 O	WILEY229.LI																																																																		
8	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$ 3,4-Dimethyl-1-pe	116	C7H16O	NIST08.LIB																																																																		
9	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, \$\$	116	C7H16O	NIST107.LIB																																																																		
10	87		1-Pentanol, 3,4-dimethyl-, (CAS) 3,4-DIMETHY	116	C7 H16 O	WILEY229.LI																																																																		
11	87		1,1-Dicyclohexane \$\$	370	C24 H50 O2	WILEY229.LI																																																																		
12	87		1-Octene (CAS) Caprylene \$\$ n-1-Octene \$\$	112	C8 H16	WILEY229.LI																																																																		

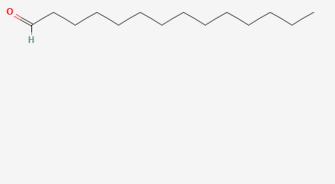
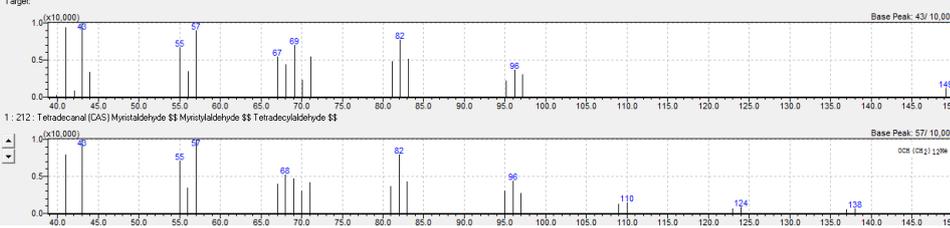
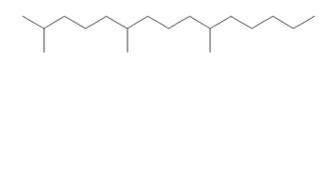
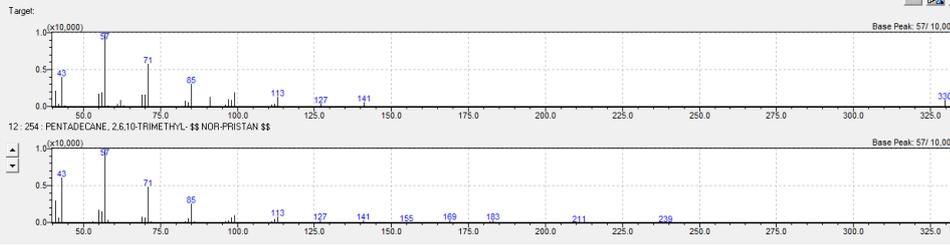
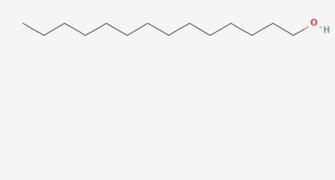
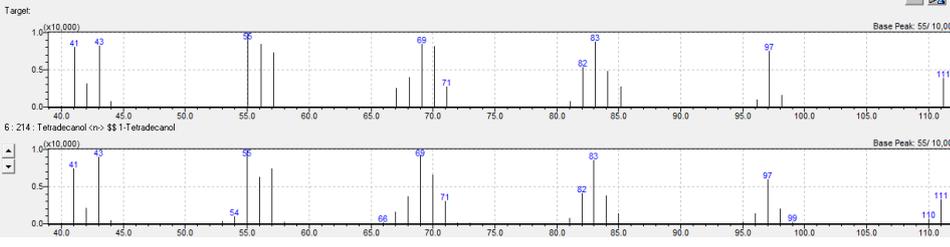
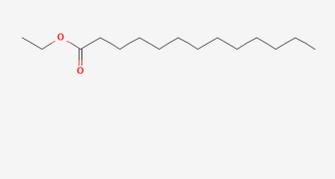
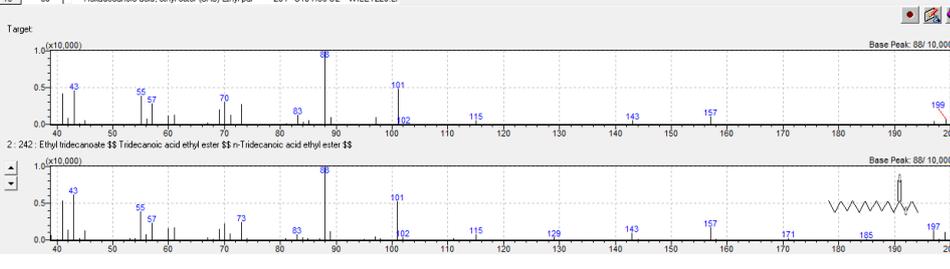
29	 <p>ácido nonánico – 96%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>HR</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>96</td><td>✓</td><td>Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>95</td><td></td><td>Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>FFNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>3</td><td>95</td><td></td><td>Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>95</td><td></td><td>Nonanoic acid</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>93</td><td></td><td>Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>93</td><td></td><td>Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>93</td><td></td><td>Nonanoic acid</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>92</td><td></td><td>Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>92</td><td></td><td>Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono</td><td>158</td><td>C9H18O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 60/10,000</p> <p>1: 158: Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ Nonylic acid \$\$ Nonanoic acid \$\$ Pelargonic acid \$\$ Pelargonic acid \$\$ 1-Octanecarboxylic acid \$\$ Cirsanol 185a \$\$ Emfac 1202 \$\$ Hexacid C-9 \$\$ Pelargon \$\$</p>	HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	96	✓	Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono	158	C9H18O2	NIST07.LIB	2	95		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid	158	C9H18O2	FFNSCI.3.lb	3	95		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI	4	95		Nonanoic acid	158	C9H18O2	NIST21.LIB	5	93		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI	6	93		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI	7	93		Nonanoic acid	158	C9H18O2	NIST21.LIB	8	92		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI	9	92		Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono	158	C9H18O2	NIST08.LIB
HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	96	✓	Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono	158	C9H18O2	NIST07.LIB																																																																		
2	95		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid	158	C9H18O2	FFNSCI.3.lb																																																																		
3	95		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
4	95		Nonanoic acid	158	C9H18O2	NIST21.LIB																																																																		
5	93		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
6	93		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
7	93		Nonanoic acid	158	C9H18O2	NIST21.LIB																																																																		
8	92		Nonanoic acid (CAS) Nonanoic acid \$\$ Nonylic	158	C9H18O2	WILEY229.LI																																																																		
9	92		Nonanoic acid \$\$ n-Nonanoic acid \$\$ n-Nono	158	C9H18O2	NIST08.LIB																																																																		
30	 <p>pentil hexanoato – 81%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>HR</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>11</td><td>81</td><td>✓</td><td>Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>12</td><td>81</td><td></td><td>Hexanoic acid, 1,1-dimethylpropyl ester \$ test</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>13</td><td>80</td><td></td><td>Hexanoic acid, pentyl ester</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>14</td><td>80</td><td></td><td>Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>15</td><td>80</td><td></td><td>Isopentyl hexanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>80</td><td></td><td>3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>17</td><td>80</td><td></td><td>3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>18</td><td>80</td><td></td><td>Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>19</td><td>79</td><td></td><td>Octanoic acid, 3-methylbutyl ester (CAS) 3-met</td><td>214</td><td>C13H26O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>11: 186: Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate \$\$ Amyl caproate \$\$ Amyl capronate \$\$ Amyl hexanoate \$\$ Pentyl caproate \$\$ n-Amyl caproate \$\$ Pentyl hexanoate \$\$</p>	HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	11	81	✓	Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	12	81		Hexanoic acid, 1,1-dimethylpropyl ester \$ test	186	C11H22O2	NIST08.LIB	13	80		Hexanoic acid, pentyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB	14	80		Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	15	80		Isopentyl hexanoate	186	C11H22O2	NIST21.LIB	16	80		3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN	186	C11H22O2	WILEY229.LI	17	80		3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN	186	C11H22O2	WILEY229.LI	18	80		Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	19	79		Octanoic acid, 3-methylbutyl ester (CAS) 3-met	214	C13H26O2	WILEY229.LI
HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
11	81	✓	Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
12	81		Hexanoic acid, 1,1-dimethylpropyl ester \$ test	186	C11H22O2	NIST08.LIB																																																																		
13	80		Hexanoic acid, pentyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB																																																																		
14	80		Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
15	80		Isopentyl hexanoate	186	C11H22O2	NIST21.LIB																																																																		
16	80		3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
17	80		3-methylbutyl hexanoate \$\$ ISOAMYL HEXAN	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
18	80		Hexanoic acid, pentyl ester (CAS) Amyl hexanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
19	79		Octanoic acid, 3-methylbutyl ester (CAS) 3-met	214	C13H26O2	WILEY229.LI																																																																		
31	 <p>nonanoato de etila – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>HR</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>✓</td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>91</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>89</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>FFNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>5</td><td>89</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>89</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>89</td><td></td><td>Nonanoic acid, ethyl ester</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>88</td><td></td><td>ETHYL NONANOATE \$\$</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td></td><td>Decanoic acid, ethyl ester</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 88/10,000</p> <p>1: 186: Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate \$\$ Wine ether \$\$ Ethyl nonylate \$\$ Ethyl pelargonate \$\$ Nonanoic acid ethyl ester \$\$</p>	HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	✓	Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	2	91		Nonanoic acid, ethyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB	3	90		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	4	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	FFNSCI.3.lb	5	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	6	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI	7	89		Nonanoic acid, ethyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB	8	88		ETHYL NONANOATE \$\$	186	C11H22O2	WILEY229.LI	9	87		Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB
HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	✓	Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
2	91		Nonanoic acid, ethyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB																																																																		
3	90		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
4	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	FFNSCI.3.lb																																																																		
5	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
6	89		Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonanoate	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
7	89		Nonanoic acid, ethyl ester	186	C11H22O2	NIST21.LIB																																																																		
8	88		ETHYL NONANOATE \$\$	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
9	87		Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB																																																																		
32	 <p>undecanal – 88%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>HR</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>3</td><td>88</td><td>✓</td><td>Undecanal (CAS) Hendecanal \$\$ n-Undecan</td><td>170</td><td>C11H22O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>88</td><td></td><td>Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan</td><td>184</td><td>C12H24O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>84</td><td></td><td>2-Methyldodecan-1-ol \$\$</td><td>200</td><td>C13H28O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>83</td><td></td><td>Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl</td><td>256</td><td>C18H36O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>82</td><td></td><td>2-Octen-1-ol (CAS) 2-Octenal \$\$ Oct-2-en-1-ol</td><td>128</td><td>C8H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>82</td><td></td><td>Eicosane, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-eicosane \$</td><td>296</td><td>C21H44</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>82</td><td></td><td>Butanoic acid, 3-oxo-, 1,1-dimethylethyl ester (</td><td>158</td><td>C8H14O3</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>10</td><td>81</td><td></td><td>2-UNDODECEN-1-OL \$\$</td><td>170</td><td>C11H22O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>81</td><td></td><td>Decanal</td><td>156</td><td>C10H20O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>3: 170: Undecanal (CAS) Hendecanal \$\$ n-Undecanal \$\$ Undecyl aldehyde \$\$ Hendecanalaldehyde \$\$ n-Undecyl aldehyde \$\$ Undecylic aldehyde \$\$</p>	HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	3	88	✓	Undecanal (CAS) Hendecanal \$\$ n-Undecan	170	C11H22O	WILEY229.LI	4	88		Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan	184	C12H24O	WILEY229.LI	5	84		2-Methyldodecan-1-ol \$\$	200	C13H28O	WILEY229.LI	6	83		Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl	256	C18H36O	WILEY229.LI	7	82		2-Octen-1-ol (CAS) 2-Octenal \$\$ Oct-2-en-1-ol	128	C8H16O	WILEY229.LI	8	82		Eicosane, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-eicosane \$	296	C21H44	WILEY229.LI	9	82		Butanoic acid, 3-oxo-, 1,1-dimethylethyl ester (158	C8H14O3	WILEY229.LI	10	81		2-UNDODECEN-1-OL \$\$	170	C11H22O	WILEY229.LI	11	81		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB
HR	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
3	88	✓	Undecanal (CAS) Hendecanal \$\$ n-Undecan	170	C11H22O	WILEY229.LI																																																																		
4	88		Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan	184	C12H24O	WILEY229.LI																																																																		
5	84		2-Methyldodecan-1-ol \$\$	200	C13H28O	WILEY229.LI																																																																		
6	83		Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl	256	C18H36O	WILEY229.LI																																																																		
7	82		2-Octen-1-ol (CAS) 2-Octenal \$\$ Oct-2-en-1-ol	128	C8H16O	WILEY229.LI																																																																		
8	82		Eicosane, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-eicosane \$	296	C21H44	WILEY229.LI																																																																		
9	82		Butanoic acid, 3-oxo-, 1,1-dimethylethyl ester (158	C8H14O3	WILEY229.LI																																																																		
10	81		2-UNDODECEN-1-OL \$\$	170	C11H22O	WILEY229.LI																																																																		
11	81		Decanal	156	C10H20O	NIST21.LIB																																																																		

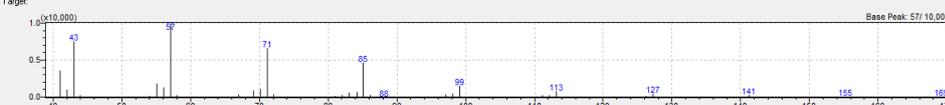
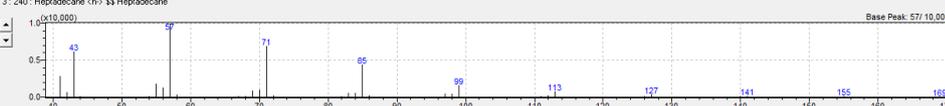
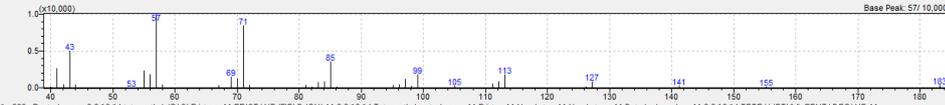
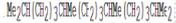
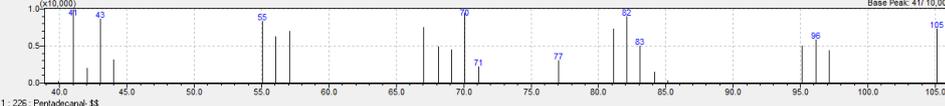
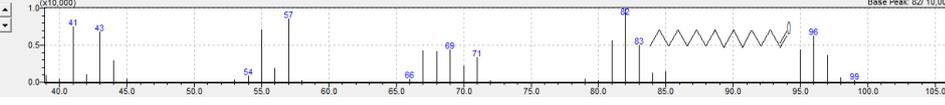
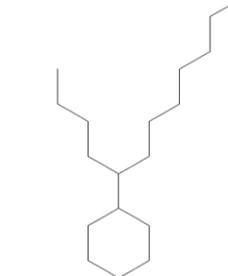
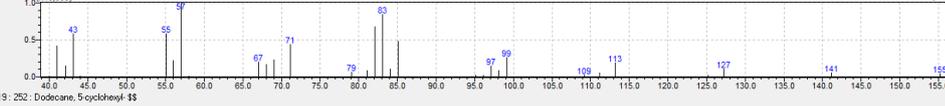
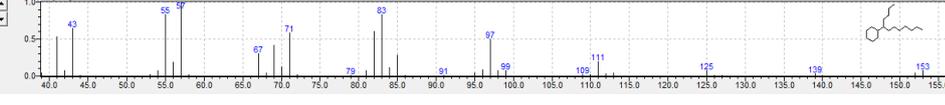
33	 <p>(E)-undec-2-enal – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>7</td><td>TRANS-2-UNDECENAL \$S</td><td>166</td><td>C11H20O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td>7</td><td>2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2</td><td>140</td><td>C9H16O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>87</td><td>7</td><td>1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S</td><td>186</td><td>C12H26O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>87</td><td>7</td><td>DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S</td><td>182</td><td>C12H22O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>86</td><td>7</td><td>1-Tetradecanol (CAS) Alfol 14 \$S\$ Tetradecano</td><td>214</td><td>C14H30O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>86</td><td>7</td><td>1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>85</td><td>7</td><td>DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S</td><td>182</td><td>C12H22O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>84</td><td>7</td><td>(E)-2-decenal \$S</td><td>154</td><td>C10H18O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>83</td><td>7</td><td>2-ETHYL-1,3-HEXANOL \$S\$ GLYCOL DIACETA</td><td>230</td><td>C12H22O4</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 41/10,000</p> <p>1: 168: TRANS-2-UNDECENAL \$S\$ Base Peak: 41/10,000</p>	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	7	TRANS-2-UNDECENAL \$S	166	C11H20O	WILEY229.LI	2	89	7	2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2	140	C9H16O	WILEY229.LI	3	87	7	1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	186	C12H26O	WILEY229.LI	4	87	7	DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S	182	C12H22O	WILEY229.LI	5	86	7	1-Tetradecanol (CAS) Alfol 14 \$S\$ Tetradecano	214	C14H30O	WILEY229.LI	6	86	7	1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe	228	C15H32O	WILEY229.LI	7	85	7	DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S	182	C12H22O	WILEY229.LI	8	84	7	(E)-2-decenal \$S	154	C10H18O	WILEY229.LI	9	83	7	2-ETHYL-1,3-HEXANOL \$S\$ GLYCOL DIACETA	230	C12H22O4	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	7	TRANS-2-UNDECENAL \$S	166	C11H20O	WILEY229.LI																																																																		
2	89	7	2-Nonenal, (E)- (CAS) trans-2-Nonenal \$S (E)-2	140	C9H16O	WILEY229.LI																																																																		
3	87	7	1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	186	C12H26O	WILEY229.LI																																																																		
4	87	7	DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S	182	C12H22O	WILEY229.LI																																																																		
5	86	7	1-Tetradecanol (CAS) Alfol 14 \$S\$ Tetradecano	214	C14H30O	WILEY229.LI																																																																		
6	86	7	1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe	228	C15H32O	WILEY229.LI																																																																		
7	85	7	DELTA-3-\$S\$ dodec-3-enal \$S	182	C12H22O	WILEY229.LI																																																																		
8	84	7	(E)-2-decenal \$S	154	C10H18O	WILEY229.LI																																																																		
9	83	7	2-ETHYL-1,3-HEXANOL \$S\$ GLYCOL DIACETA	230	C12H22O4	WILEY229.LI																																																																		
34	 <p>ácido decanoico – 93%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>93</td><td>7</td><td>Decanoic acid (n->\$S\$) Decanoic acid</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>FRISC13.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>92</td><td>7</td><td>n-Decanoic acid</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>92</td><td>7</td><td>Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td>7</td><td>decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td>7</td><td>Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td>7</td><td>n-Decanoic acid</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>91</td><td>7</td><td>DECANOIC ACID \$S\$</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>91</td><td>7</td><td>Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td>7</td><td>Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 60/10,000</p> <p>1: 172: Decanoic acid (n->\$S\$) Decanoic acid Base Peak: 60/10,000</p>	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	93	7	Decanoic acid (n->\$S\$) Decanoic acid	172	C10H20O2	FRISC13.LIB	2	92	7	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST1.LIB	3	92	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI	4	91	7	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI	5	91	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI	6	91	7	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST1.LIB	7	91	7	DECANOIC ACID \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI	8	91	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI	9	90	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	93	7	Decanoic acid (n->\$S\$) Decanoic acid	172	C10H20O2	FRISC13.LIB																																																																		
2	92	7	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST1.LIB																																																																		
3	92	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
4	91	7	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
5	91	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
6	91	7	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST1.LIB																																																																		
7	91	7	DECANOIC ACID \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
8	91	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
9	90	7	Decanoic acid (CAS) Capric acid \$S\$ Decoic a	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
35	 <p>decanoato de etila – 89%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>88</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td>7</td><td>Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonano</td><td>186</td><td>C11H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>89</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>89</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>89</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>89</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>88</td><td>7</td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>88</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>88</td><td>7</td><td>Decanoic acid, ethyl ester \$S\$ Capric acid, eth</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 89/10,000</p> <p>1: 200: Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decanoate \$S\$ Ethyl caprate \$S\$ Ethyl decylate \$S\$ Ethyl caprate \$S\$ Capric acid ethyl ester \$S\$ Decanoic acid ethyl ester \$S\$ Ethyl ester of Decanoic acid \$S\$ Base Peak: 89/10,000</p>	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	88	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI	2	89	7	Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonano	186	C11H22O2	WILEY229.LI	3	89	7	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST1.LIB	4	89	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI	5	89	7	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST1.LIB	6	89	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI	7	88	7	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	8	88	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI	9	88	7	Decanoic acid, ethyl ester \$S\$ Capric acid, eth	200	C12H24O2	NIST107.LIB
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	88	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
2	89	7	Nonanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl nonano	186	C11H22O2	WILEY229.LI																																																																		
3	89	7	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST1.LIB																																																																		
4	89	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
5	89	7	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST1.LIB																																																																		
6	89	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
7	88	7	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
8	88	7	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
9	88	7	Decanoic acid, ethyl ester \$S\$ Capric acid, eth	200	C12H24O2	NIST107.LIB																																																																		
36	 <p>tetradecano – 89%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Regr</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>89</td><td>7</td><td>Tetradecane (CAS) n-Tetradecane \$S\$ Iotetra</td><td>198</td><td>C14H30</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>89</td><td>7</td><td>Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane</td><td>156</td><td>C11H24</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>88</td><td>7</td><td>2-(Trimethylacetoxyl)-2-methyl-3-butanone \$S\$ P</td><td>186</td><td>C10H18O3</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>87</td><td>7</td><td>Dimethyl disulfide \$S\$ Disulfide, dioctyl (CAS)</td><td>290</td><td>C16H34S2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>87</td><td>7</td><td>Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane</td><td>156</td><td>C11H24</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>87</td><td>7</td><td>Undecane, 5-methyl-, (CAS) 5-Methylundecane</td><td>170</td><td>C12H26</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>86</td><td>7</td><td>Dodecane (CAS) n-Dodecane \$S\$ Ba 51-0904</td><td>170</td><td>C12H26</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>85</td><td>7</td><td>2,2,9-Trimethyl-5-decene-3-one \$S\$ 5-Dece</td><td>210</td><td>C13H22O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>84</td><td>7</td><td>Pentadecane (CAS) n-Pentadecane \$S\$</td><td>212</td><td>C15H32</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>2: 198: Tetradecane (CAS) n-Tetradecane \$S\$ Iotetradecane \$S\$ Base Peak: 57/10,000</p>	Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	89	7	Tetradecane (CAS) n-Tetradecane \$S\$ Iotetra	198	C14H30	WILEY229.LI	2	89	7	Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane	156	C11H24	WILEY229.LI	3	88	7	2-(Trimethylacetoxyl)-2-methyl-3-butanone \$S\$ P	186	C10H18O3	WILEY229.LI	4	87	7	Dimethyl disulfide \$S\$ Disulfide, dioctyl (CAS)	290	C16H34S2	WILEY229.LI	5	87	7	Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane	156	C11H24	WILEY229.LI	6	87	7	Undecane, 5-methyl-, (CAS) 5-Methylundecane	170	C12H26	WILEY229.LI	7	86	7	Dodecane (CAS) n-Dodecane \$S\$ Ba 51-0904	170	C12H26	WILEY229.LI	8	85	7	2,2,9-Trimethyl-5-decene-3-one \$S\$ 5-Dece	210	C13H22O2	WILEY229.LI	9	84	7	Pentadecane (CAS) n-Pentadecane \$S\$	212	C15H32	WILEY229.LI
Hit	Similar	Regr	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	89	7	Tetradecane (CAS) n-Tetradecane \$S\$ Iotetra	198	C14H30	WILEY229.LI																																																																		
2	89	7	Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane	156	C11H24	WILEY229.LI																																																																		
3	88	7	2-(Trimethylacetoxyl)-2-methyl-3-butanone \$S\$ P	186	C10H18O3	WILEY229.LI																																																																		
4	87	7	Dimethyl disulfide \$S\$ Disulfide, dioctyl (CAS)	290	C16H34S2	WILEY229.LI																																																																		
5	87	7	Undecane (CAS) n-Undecane \$S\$ Hendecane	156	C11H24	WILEY229.LI																																																																		
6	87	7	Undecane, 5-methyl-, (CAS) 5-Methylundecane	170	C12H26	WILEY229.LI																																																																		
7	86	7	Dodecane (CAS) n-Dodecane \$S\$ Ba 51-0904	170	C12H26	WILEY229.LI																																																																		
8	85	7	2,2,9-Trimethyl-5-decene-3-one \$S\$ 5-Dece	210	C13H22O2	WILEY229.LI																																																																		
9	84	7	Pentadecane (CAS) n-Pentadecane \$S\$	212	C15H32	WILEY229.LI																																																																		

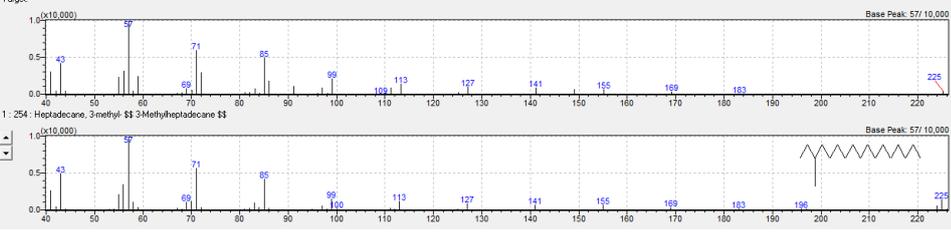
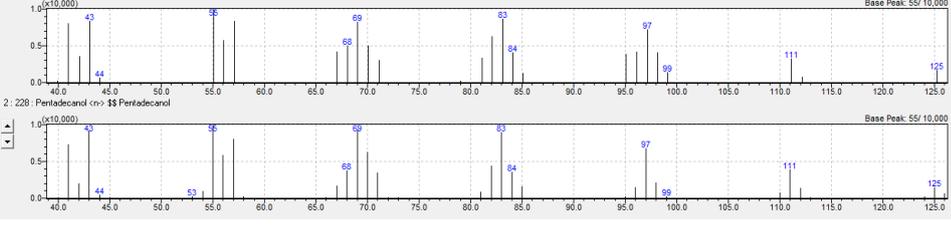
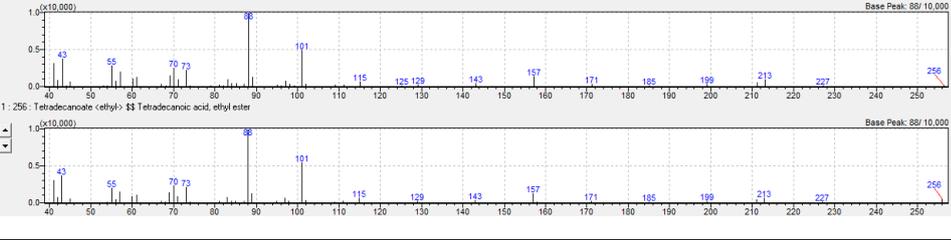
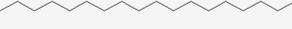
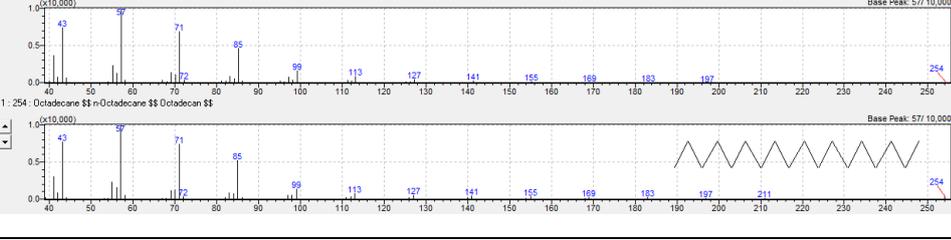
37	 <p>dodecanal – 84%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Peak</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>84</td> <td>42</td> <td>Dodecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ 1-Dodecanal</td> <td>184</td> <td>C₁₂H₂₄O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>84</td> <td>42</td> <td>Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Decanal (CAS) n-Decanal \$S\$ Decyl aldehyde</td> <td>156</td> <td>C₁₀H₂₀O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Decanal</td> <td>156</td> <td>C₁₀H₂₀O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Heptanal</td> <td>114</td> <td>C₇H₁₄O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S\$ 2077204001 H</td> <td>114</td> <td>C₇H₁₄O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>83</td> <td>42</td> <td>Decanal \$S\$ n-Decaldehyde \$S\$ n-Decanal \$S\$</td> <td>156</td> <td>C₁₀H₂₀O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>82</td> <td>42</td> <td>Isocotane, (ethenyl)oxy- \$S\$ Isocotyl vinyl ether</td> <td>156</td> <td>C₁₀H₂₀O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 55/ 10,000</p> <p>1: 184 Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$S\$ 1-Dodecanal \$S\$ Lauraldehyde \$S\$ Aldehyde C-12 \$S\$ n-Lauraldehyde \$S\$ Dodecanaldehyde \$S\$ Lauryl aldehyde \$S\$ Lauric aldehyde \$S\$ Dodecyl aldehyde \$S\$ n-Dodecyl aldehyde \$S\$ n-Dodecylc: aldehyde \$S\$</p>	Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	84	42	Dodecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ 1-Dodecanal	184	C ₁₂ H ₂₄ O	WILEY229.LI	2	84	42	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI	3	83	42	Decanal (CAS) n-Decanal \$S\$ Decyl aldehyde	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI	4	83	42	Decanal	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST21.LIB	5	83	42	Heptanal	114	C ₇ H ₁₄ O	NIST21.LIB	6	83	42	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S\$ 2077204001 H	114	C ₇ H ₁₄ O	WILEY229.LI	7	83	42	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI	8	83	42	Decanal \$S\$ n-Decaldehyde \$S\$ n-Decanal \$S\$	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB	9	82	42	Isocotane, (ethenyl)oxy- \$S\$ Isocotyl vinyl ether	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB
Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	84	42	Dodecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ 1-Dodecanal	184	C ₁₂ H ₂₄ O	WILEY229.LI																																																																		
2	84	42	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI																																																																		
3	83	42	Decanal (CAS) n-Decanal \$S\$ Decyl aldehyde	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI																																																																		
4	83	42	Decanal	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST21.LIB																																																																		
5	83	42	Heptanal	114	C ₇ H ₁₄ O	NIST21.LIB																																																																		
6	83	42	Heptanal (CAS) n-Heptanal \$S\$ 2077204001 H	114	C ₇ H ₁₄ O	WILEY229.LI																																																																		
7	83	42	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI																																																																		
8	83	42	Decanal \$S\$ n-Decaldehyde \$S\$ n-Decanal \$S\$	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB																																																																		
9	82	42	Isocotane, (ethenyl)oxy- \$S\$ Isocotyl vinyl ether	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB																																																																		
38	 <p>geranylacetona – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Peak</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>91</td> <td>43</td> <td>GERANYL ACETONE \$S\$</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>90</td> <td>43</td> <td>GERANYL ACETONE \$S\$</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>90</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>GERANYL ACETONE \$S\$</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)- (CA</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>89</td> <td>43</td> <td>5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl</td> <td>194</td> <td>C₁₃H₂₂O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/ 10,000</p> <p>1: 194 GERANYL ACETONE \$S\$</p>	Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI	2	90	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI	3	90	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB	4	89	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI	5	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB	6	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB	7	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST08.LIB	8	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)- (CA	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI	9	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST107.LIB
Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
2	90	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
3	90	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB																																																																		
4	89	43	GERANYL ACETONE \$S\$	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
5	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB																																																																		
6	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST21.LIB																																																																		
7	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST08.LIB																																																																		
8	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)- (CA	194	C ₁₃ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
9	89	43	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, \$S\$ Diethyl	194	C ₁₃ H ₂₂ O	NIST107.LIB																																																																		
39	 <p>(E)-dodec-2-en-1-ol – 87%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Peak</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>3</td> <td>87</td> <td>43</td> <td>trans-2-Dodecen-1-ol</td> <td>184</td> <td>C₁₂H₂₄O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>87</td> <td>43</td> <td>18-Nonadecen-1-ol</td> <td>262</td> <td>C₁₉H₃₈O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>87</td> <td>43</td> <td>18-Nonadecen-1-ol \$S\$</td> <td>262</td> <td>C₁₉H₃₈O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>E-2-Octadecadien-1-ol</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>E-2-Octadecadien-1-ol \$S\$</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>Undec-2-ene c1 Hydroxy> \$S\$ 2-Undecen-1-ol</td> <td>170</td> <td>C₁₁H₂₂O</td> <td>FFNSCI.3lib</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>Octadecenal (octadecenal ester) \$S\$ (Z)-9-</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>Pentanoic acid, 10undecenyl ester \$S\$</td> <td>254</td> <td>C₁₆H₃₀O₂</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>11</td> <td>86</td> <td>43</td> <td>Pentanoic acid, 10undecenyl ester</td> <td>254</td> <td>C₁₆H₃₀O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 55/ 10,000</p> <p>3: 184 trans-2-Dodecen-1-ol</p>	Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	3	87	43	trans-2-Dodecen-1-ol	184	C ₁₂ H ₂₄ O	NIST08.LIB	4	87	43	18-Nonadecen-1-ol	262	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST08.LIB	5	87	43	18-Nonadecen-1-ol \$S\$	262	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST107.LIB	6	86	43	E-2-Octadecadien-1-ol	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST08.LIB	7	86	43	E-2-Octadecadien-1-ol \$S\$	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST107.LIB	8	86	43	Undec-2-ene c1 Hydroxy> \$S\$ 2-Undecen-1-ol	170	C ₁₁ H ₂₂ O	FFNSCI.3lib	9	86	43	Octadecenal (octadecenal ester) \$S\$ (Z)-9-	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI	10	86	43	Pentanoic acid, 10undecenyl ester \$S\$	254	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST107.LIB	11	86	43	Pentanoic acid, 10undecenyl ester	254	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB
Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
3	87	43	trans-2-Dodecen-1-ol	184	C ₁₂ H ₂₄ O	NIST08.LIB																																																																		
4	87	43	18-Nonadecen-1-ol	262	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST08.LIB																																																																		
5	87	43	18-Nonadecen-1-ol \$S\$	262	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST107.LIB																																																																		
6	86	43	E-2-Octadecadien-1-ol	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST08.LIB																																																																		
7	86	43	E-2-Octadecadien-1-ol \$S\$	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST107.LIB																																																																		
8	86	43	Undec-2-ene c1 Hydroxy> \$S\$ 2-Undecen-1-ol	170	C ₁₁ H ₂₂ O	FFNSCI.3lib																																																																		
9	86	43	Octadecenal (octadecenal ester) \$S\$ (Z)-9-	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI																																																																		
10	86	43	Pentanoic acid, 10undecenyl ester \$S\$	254	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
11	86	43	Pentanoic acid, 10undecenyl ester	254	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
40	 <p>(E)-dodec-2-enal – 79%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Peak</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>18</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec</td> <td>288</td> <td>C₁₈H₃₇Cl</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>19</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec</td> <td>288</td> <td>C₁₈H₃₇Cl</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>20</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Dichloroacetic acid, 4-pentadecyl ester</td> <td>338</td> <td>C₁₇H₃₂O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>21</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Tridec-2(Enal \$S\$ 2-Thidecinal, (Z)-</td> <td>196</td> <td>C₁₃H₂₄O</td> <td>FFNSCI.3lib</td> </tr> <tr> <td>22</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester</td> <td>276</td> <td>C₁₆H₃₀O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>23</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>2-Dodecenal, (E)- \$S\$ (E)-2-Dodecen-1-ol \$S\$</td> <td>182</td> <td>C₁₂H₂₂O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>24</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>TRANS-2-DODECENAL \$S\$</td> <td>182</td> <td>C₁₂H₂₂O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>25</td> <td>79</td> <td>43</td> <td>Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester</td> <td>276</td> <td>C₁₆H₃₀O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/ 10,000</p> <p>23: 182 2-Dodecenal, (E)- \$S\$ (E)-2-Dodecen-1-ol \$S\$</p>	Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	18	79	43	Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec	288	C ₁₈ H ₃₇ Cl	NIST21.LIB	19	79	43	Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec	288	C ₁₈ H ₃₇ Cl	WILEY229.LI	20	79	43	Dichloroacetic acid, 4-pentadecyl ester	338	C ₁₇ H ₃₂ O ₂	NIST08.LIB	21	79	43	Tridec-2(Enal \$S\$ 2-Thidecinal, (Z)-	196	C ₁₃ H ₂₄ O	FFNSCI.3lib	22	79	43	Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester	276	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB	23	79	43	2-Dodecenal, (E)- \$S\$ (E)-2-Dodecen-1-ol \$S\$	182	C ₁₂ H ₂₂ O	NIST107.LIB	24	79	43	TRANS-2-DODECENAL \$S\$	182	C ₁₂ H ₂₂ O	WILEY229.LI	25	79	43	Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester	276	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB							
Hit	Similar	Peak	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
18	79	43	Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec	288	C ₁₈ H ₃₇ Cl	NIST21.LIB																																																																		
19	79	43	Octadecane, 1-chloro- (CAS) 1-Chlorooctadec	288	C ₁₈ H ₃₇ Cl	WILEY229.LI																																																																		
20	79	43	Dichloroacetic acid, 4-pentadecyl ester	338	C ₁₇ H ₃₂ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
21	79	43	Tridec-2(Enal \$S\$ 2-Thidecinal, (Z)-	196	C ₁₃ H ₂₄ O	FFNSCI.3lib																																																																		
22	79	43	Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester	276	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
23	79	43	2-Dodecenal, (E)- \$S\$ (E)-2-Dodecen-1-ol \$S\$	182	C ₁₂ H ₂₂ O	NIST107.LIB																																																																		
24	79	43	TRANS-2-DODECENAL \$S\$	182	C ₁₂ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
25	79	43	Chloroacetic acid, 3tetradecyl ester	276	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	NIST08.LIB																																																																		

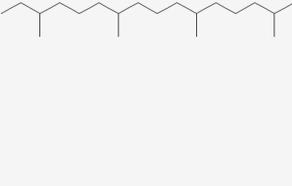
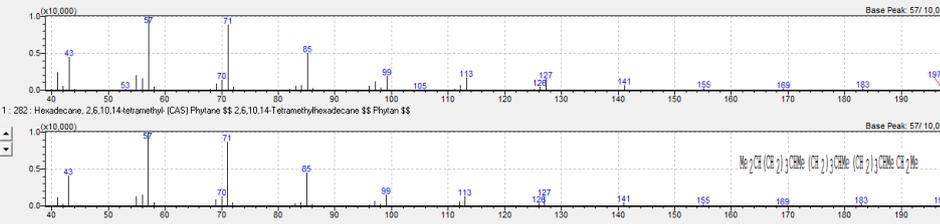
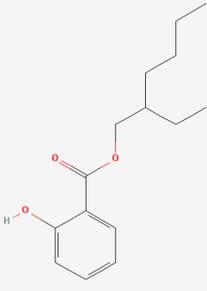
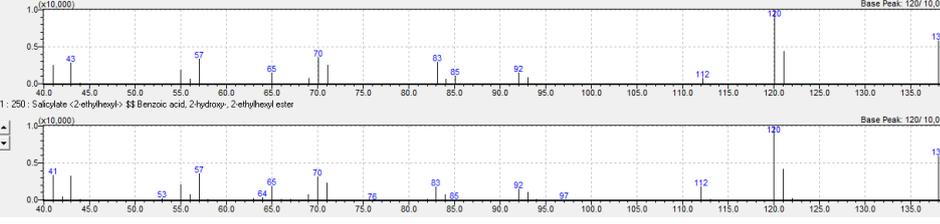
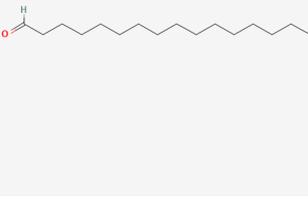
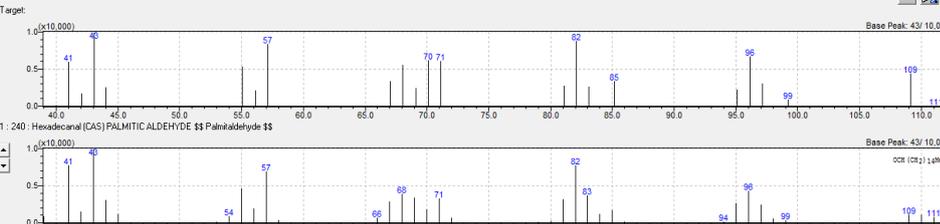
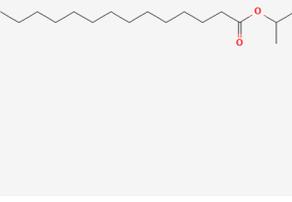
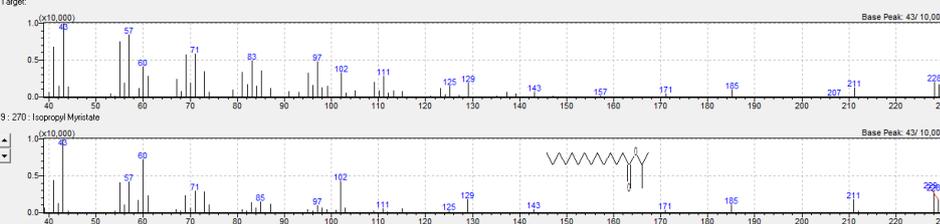
41	 <p>dodecan-1-ol – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2</td><td>91</td><td>✓</td><td>1-Dodecanol (CAS)n-Dodecanol \$S CD 12 \$S</td><td>196</td><td>C12 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>89</td><td></td><td>1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe</td><td>228</td><td>C15 H32 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>88</td><td></td><td>Ble (3,5,5-trimethylhexyl) ether \$S</td><td>270</td><td>C18 H38 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol \$S</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>87</td><td></td><td>Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S Ecol 8 \$S 6-</td><td>130</td><td>C8 H18 O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>2: 196: 1-Dodecanol (CAS)n-Dodecanol \$S CD 12 \$S 1:298 \$S Dodecanol \$S Pival \$S Alkol 12 \$S Sigol 12 \$S Lauyl 24 \$S Siponal 25 \$S Siponal L 2 \$S Siponal L 5 \$S Dodecanol-1 \$S Karakoru 20 \$S Alcohol C-12 \$S Lauroic alcohol \$S Lauyl alcohol \$S n-D</p> <p>Base Peak: 55/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	2	91	✓	1-Dodecanol (CAS)n-Dodecanol \$S CD 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI	3	89		1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe	228	C15 H32 O	WILEY229.LI	4	88		Ble (3,5,5-trimethylhexyl) ether \$S	270	C18 H38 O	WILEY229.LI	5	87		Isocetanol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI	6	87		Isocetanol	130	C8 H18 O	NIST1.LIB	7	87		Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI	8	87		Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI	9	87		Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	NIST107.LIB	10	87		Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S Ecol 8 \$S 6-	130	C8 H18 O	NIST08.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
2	91	✓	1-Dodecanol (CAS)n-Dodecanol \$S CD 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
3	89		1-Pentadecanol (CAS) Pentadecanol \$S n-Pe	228	C15 H32 O	WILEY229.LI																																																																		
4	88		Ble (3,5,5-trimethylhexyl) ether \$S	270	C18 H38 O	WILEY229.LI																																																																		
5	87		Isocetanol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI																																																																		
6	87		Isocetanol	130	C8 H18 O	NIST1.LIB																																																																		
7	87		Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI																																																																		
8	87		Isocetanol (CAS) Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	WILEY229.LI																																																																		
9	87		Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S	130	C8 H18 O	NIST107.LIB																																																																		
10	87		Isocetanol \$S Isocetyl alcohol \$S Ecol 8 \$S 6-	130	C8 H18 O	NIST08.LIB																																																																		
42	 <p>2,6-ditert-butyl-4-hidroxi-4-metilciclohexa-2,5-dien-1-ona – 72%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>18</td><td>72</td><td></td><td>2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,</td><td>180</td><td>C11H16O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>72</td><td></td><td>2,6-di-tert-butyl-4-hydroxy-4-methyl-2,5-cyclohexa</td><td>236</td><td>C15 H24 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>20</td><td>72</td><td></td><td>2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,</td><td>180</td><td>C11H16O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>21</td><td>72</td><td></td><td>2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,</td><td>180</td><td>C11H16O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>22</td><td>72</td><td></td><td>3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S 2-</td><td>194</td><td>C13H22O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>23</td><td>72</td><td></td><td>3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S</td><td>194</td><td>C13H22O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>24</td><td>72</td><td></td><td>3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- (CAS)</td><td>194</td><td>C14H26</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>25</td><td>72</td><td></td><td>3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- \$S (E)</td><td>194</td><td>C14H26</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>19: 236: 2,6-di(tert-butyl)-4-hydroxy-4-methyl-2,5-cyclohexadien-1-one \$S</p> <p>Base Peak: 165/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	18	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	NIST08.LIB	19	72		2,6-di-tert-butyl-4-hydroxy-4-methyl-2,5-cyclohexa	236	C15 H24 O2	WILEY229.LI	20	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	NIST107.LIB	21	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	WILEY229.LI	22	72		3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S 2-	194	C13H22O	NIST08.LIB	23	72		3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S	194	C13H22O	NIST107.LIB	24	72		3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- (CAS)	194	C14H26	WILEY229.LI	25	72		3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- \$S (E)	194	C14H26	NIST08.LIB							
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
18	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	NIST08.LIB																																																																		
19	72		2,6-di-tert-butyl-4-hydroxy-4-methyl-2,5-cyclohexa	236	C15 H24 O2	WILEY229.LI																																																																		
20	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	NIST107.LIB																																																																		
21	72		2,3,4-Benzofuranone, 3a,4,5,6-tetrahydro-3a,	180	C11H16O2	WILEY229.LI																																																																		
22	72		3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S 2-	194	C13H22O	NIST08.LIB																																																																		
23	72		3,4-Hexadienal, 2-butyl-2-ethyl-5-methyl- \$S	194	C13H22O	NIST107.LIB																																																																		
24	72		3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- (CAS)	194	C14H26	WILEY229.LI																																																																		
25	72		3,5-Octadecene, 4,5-diethyl-3,6-dimethyl- \$S (E)	194	C14H26	NIST08.LIB																																																																		
43	 <p>pentadecano – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>95</td><td>✓</td><td>Pentadecane (CAS)n-Pentadecane \$S</td><td>212</td><td>C15 H32</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>91</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl- (CAS) 2,2-Dimethylbutan</td><td>86</td><td>C6 H14</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>91</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl-</td><td>86</td><td>C6 H14</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di</td><td>86</td><td>C6 H14</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>90</td><td></td><td>dodecane, 1,1-difluoro- \$S</td><td>206</td><td>C12 H24 F2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>90</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di</td><td>86</td><td>C6 H14</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecane (CAS)n-Hexadecane \$S Cetane</td><td>226</td><td>C16 H34</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td></td><td>Docosane (CAS)n-Docosane \$S C22H46 ST</td><td>310</td><td>C22 H46</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td></td><td>Butane, 2,2-dimethyl-</td><td>86</td><td>C6 H14</td><td>NIST1.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>1: 212: Pentadecane (CAS)n-Pentadecane \$S</p> <p>Base Peak: 57/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	95	✓	Pentadecane (CAS)n-Pentadecane \$S	212	C15 H32	WILEY229.LI	2	91		Butane, 2,2-dimethyl- (CAS) 2,2-Dimethylbutan	86	C6 H14	WILEY229.LI	3	91		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C6 H14	NIST1.LIB	4	91		Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di	86	C6 H14	NIST08.LIB	5	90		dodecane, 1,1-difluoro- \$S	206	C12 H24 F2	WILEY229.LI	6	90		Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di	86	C6 H14	NIST107.LIB	7	90		Hexadecane (CAS)n-Hexadecane \$S Cetane	226	C16 H34	WILEY229.LI	8	90		Docosane (CAS)n-Docosane \$S C22H46 ST	310	C22 H46	WILEY229.LI	9	90		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C6 H14	NIST1.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	95	✓	Pentadecane (CAS)n-Pentadecane \$S	212	C15 H32	WILEY229.LI																																																																		
2	91		Butane, 2,2-dimethyl- (CAS) 2,2-Dimethylbutan	86	C6 H14	WILEY229.LI																																																																		
3	91		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C6 H14	NIST1.LIB																																																																		
4	91		Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di	86	C6 H14	NIST08.LIB																																																																		
5	90		dodecane, 1,1-difluoro- \$S	206	C12 H24 F2	WILEY229.LI																																																																		
6	90		Butane, 2,2-dimethyl- \$S Neohexane \$S 2,2-Di	86	C6 H14	NIST107.LIB																																																																		
7	90		Hexadecane (CAS)n-Hexadecane \$S Cetane	226	C16 H34	WILEY229.LI																																																																		
8	90		Docosane (CAS)n-Docosane \$S C22H46 ST	310	C22 H46	WILEY229.LI																																																																		
9	90		Butane, 2,2-dimethyl-	86	C6 H14	NIST1.LIB																																																																		
44	 <p>tridecanal – 94%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>5</td><td>94</td><td></td><td>Tridecanal (n->) \$S Tridecanal</td><td>198</td><td>C13 H26 O</td><td>FFNSC13.lib</td></tr> <tr><td>6</td><td>94</td><td></td><td>Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl</td><td>268</td><td>C18 H36 O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>94</td><td></td><td>Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S Stearyl</td><td>268</td><td>C18 H36 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>94</td><td></td><td>Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl</td><td>268</td><td>C18 H36 O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>93</td><td></td><td>TRIDECANAL \$S</td><td>198</td><td>C13 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>10</td><td>93</td><td></td><td>Tridecanal (CAS) Tridecanaldehyde \$S Tridec</td><td>198</td><td>C13 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>93</td><td></td><td>Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan</td><td>198</td><td>C13 H26 O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>12</td><td>93</td><td></td><td>Tetradecanal</td><td>212</td><td>C14 H28 O</td><td>NIST1.LIB</td></tr> <tr><td>13</td><td>93</td><td></td><td>Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan</td><td>198</td><td>C13 H26 O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>5: 198: Tridecanal (n->) \$S Tridecanal</p> <p>Base Peak: 57/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	5	94		Tridecanal (n->) \$S Tridecanal	198	C13 H26 O	FFNSC13.lib	6	94		Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl	268	C18 H36 O	NIST107.LIB	7	94		Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S Stearyl	268	C18 H36 O	WILEY229.LI	8	94		Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl	268	C18 H36 O	NIST08.LIB	9	93		TRIDECANAL \$S	198	C13 H26 O	WILEY229.LI	10	93		Tridecanal (CAS) Tridecanaldehyde \$S Tridec	198	C13 H26 O	WILEY229.LI	11	93		Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan	198	C13 H26 O	NIST107.LIB	12	93		Tetradecanal	212	C14 H28 O	NIST1.LIB	13	93		Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan	198	C13 H26 O	NIST08.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
5	94		Tridecanal (n->) \$S Tridecanal	198	C13 H26 O	FFNSC13.lib																																																																		
6	94		Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl	268	C18 H36 O	NIST107.LIB																																																																		
7	94		Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$S Stearyl	268	C18 H36 O	WILEY229.LI																																																																		
8	94		Octadecanal \$S Stearaldehyde \$S Octadecyl	268	C18 H36 O	NIST08.LIB																																																																		
9	93		TRIDECANAL \$S	198	C13 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
10	93		Tridecanal (CAS) Tridecanaldehyde \$S Tridec	198	C13 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
11	93		Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan	198	C13 H26 O	NIST107.LIB																																																																		
12	93		Tetradecanal	212	C14 H28 O	NIST1.LIB																																																																		
13	93		Tridecanal \$S n-Tridecylaldehyde \$S Tridecan	198	C13 H26 O	NIST08.LIB																																																																		

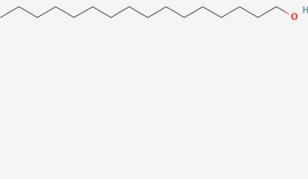
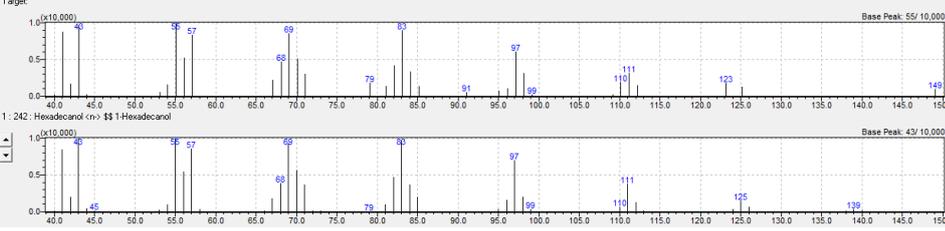
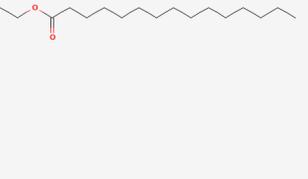
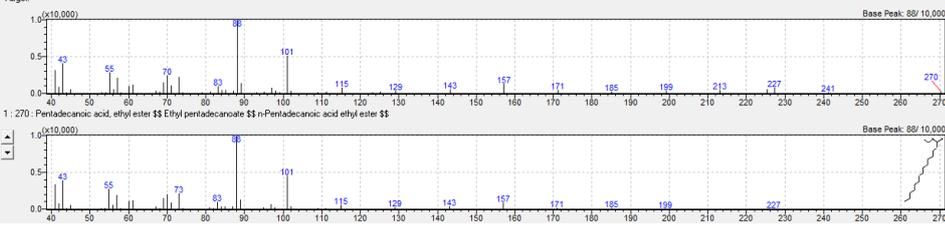
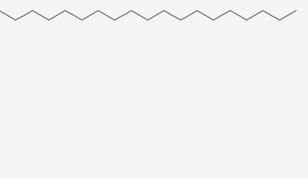
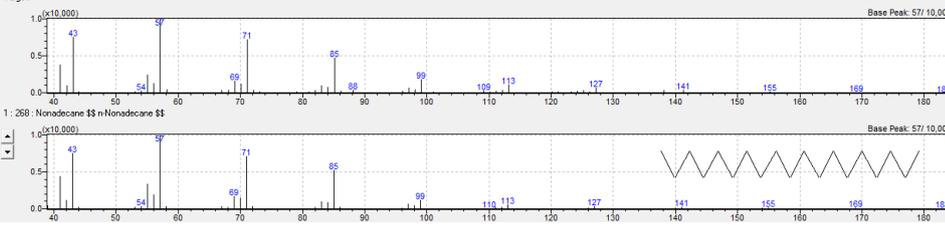
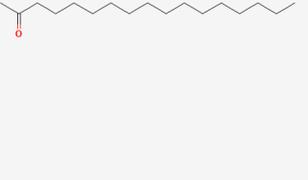
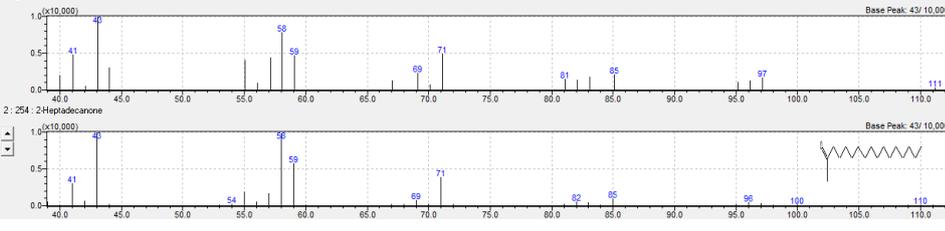
45	 <p>tridecan-1-ol – 85%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>11</td><td>85</td><td>1</td><td>Tridecanol <n> \$S\$ 1-Tridecanol</td><td>200</td><td>C13H26O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>12</td><td>85</td><td>1</td><td>Tetradecanol <n> \$S\$ 1-Tetradecanol</td><td>214</td><td>C14H30O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>13</td><td>85</td><td>1</td><td>9-Octadecene (E) \$S\$ (E)-9-Octadecene # \$</td><td>252</td><td>C18H36</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>14</td><td>85</td><td>1</td><td>3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #</td><td>224</td><td>C16H32</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>15</td><td>85</td><td>1</td><td>3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #</td><td>224</td><td>C16H32</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>85</td><td>1</td><td>3-Hexadecene (Z) (CAS) <n> 3-Hexadecene</td><td>224</td><td>C16H32</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>17</td><td>85</td><td>1</td><td>9-Octadecene (E) (CAS)</td><td>252</td><td>C18H36</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>18</td><td>85</td><td>1</td><td>9-Octadecene (E) \$S\$</td><td>252</td><td>C18H36</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>85</td><td>1</td><td>3-Hexadecene (Z) \$S\$</td><td>224</td><td>C16H32</td><td>NIST107.LIB</td></tr> </tbody> </table> 	#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	11	85	1	Tridecanol <n> \$S\$ 1-Tridecanol	200	C13H26O	FFNSC1.3lib	12	85	1	Tetradecanol <n> \$S\$ 1-Tetradecanol	214	C14H30O	FFNSC1.3lib	13	85	1	9-Octadecene (E) \$S\$ (E)-9-Octadecene # \$	252	C18H36	NIST08.LIB	14	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #	224	C16H32	NIST08.LIB	15	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #	224	C16H32	NIST21.LIB	16	85	1	3-Hexadecene (Z) (CAS) <n> 3-Hexadecene	224	C16H32	WILEY229.LI	17	85	1	9-Octadecene (E) (CAS)	252	C18H36	WILEY229.LI	18	85	1	9-Octadecene (E) \$S\$	252	C18H36	NIST107.LIB	19	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$	224	C16H32	NIST107.LIB
#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
11	85	1	Tridecanol <n> \$S\$ 1-Tridecanol	200	C13H26O	FFNSC1.3lib																																																																		
12	85	1	Tetradecanol <n> \$S\$ 1-Tetradecanol	214	C14H30O	FFNSC1.3lib																																																																		
13	85	1	9-Octadecene (E) \$S\$ (E)-9-Octadecene # \$	252	C18H36	NIST08.LIB																																																																		
14	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #	224	C16H32	NIST08.LIB																																																																		
15	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$ (Z)-3-Hexadecene #	224	C16H32	NIST21.LIB																																																																		
16	85	1	3-Hexadecene (Z) (CAS) <n> 3-Hexadecene	224	C16H32	WILEY229.LI																																																																		
17	85	1	9-Octadecene (E) (CAS)	252	C18H36	WILEY229.LI																																																																		
18	85	1	9-Octadecene (E) \$S\$	252	C18H36	NIST107.LIB																																																																		
19	85	1	3-Hexadecene (Z) \$S\$	224	C16H32	NIST107.LIB																																																																		
46	 <p>ácido dodecanóico – 88%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>88</td><td>1</td><td>dodecanoic acid \$S\$ Lauroic acid \$S\$</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>96</td><td>1</td><td>decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>86</td><td>1</td><td>Tetradecanoic acid (CAS) Myristic acid \$S\$ MY</td><td>228</td><td>C14H28O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>85</td><td>1</td><td>decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>84</td><td>1</td><td>Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>84</td><td>1</td><td>Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$S\$ n-O</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>84</td><td>1</td><td>Pentadecanoic acid (CAS) Pentadecylic acid</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>83</td><td>1</td><td>Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>82</td><td>1</td><td>n-Decanoic acid</td><td>172</td><td>C10H20O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table> 	#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	88	1	dodecanoic acid \$S\$ Lauroic acid \$S\$	200	C12H24O2	WILEY229.LI	2	96	1	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI	3	86	1	Tetradecanoic acid (CAS) Myristic acid \$S\$ MY	228	C14H28O2	WILEY229.LI	4	85	1	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI	5	84	1	Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI	6	84	1	Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$S\$ n-O	284	C18H36O2	WILEY229.LI	7	84	1	Pentadecanoic acid (CAS) Pentadecylic acid	242	C15H30O2	WILEY229.LI	8	83	1	Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI	9	82	1	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST21.LIB
#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	88	1	dodecanoic acid \$S\$ Lauroic acid \$S\$	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
2	96	1	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
3	86	1	Tetradecanoic acid (CAS) Myristic acid \$S\$ MY	228	C14H28O2	WILEY229.LI																																																																		
4	85	1	decanoic acid \$S\$ Capric acid \$S\$	172	C10H20O2	WILEY229.LI																																																																		
5	84	1	Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
6	84	1	Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$S\$ n-O	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
7	84	1	Pentadecanoic acid (CAS) Pentadecylic acid	242	C15H30O2	WILEY229.LI																																																																		
8	83	1	Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$S\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
9	82	1	n-Decanoic acid	172	C10H20O2	NIST21.LIB																																																																		
47	 <p>dodecanoato de etila – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>92</td><td>1</td><td>dodecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl lauro</td><td>228</td><td>C14H28O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>92</td><td>1</td><td>Dodecanoic acid, ethyl ester</td><td>228</td><td>C14H28O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>92</td><td>1</td><td>Pentadecanoic acid, ethyl ester \$S\$ Ethyl pent</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>92</td><td>1</td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td>1</td><td>Dodecanoic acid, ethyl- \$S\$ Dodecanoic acid, et</td><td>228</td><td>C14H28O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td>1</td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>91</td><td>1</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>91</td><td>1</td><td>Decanoic acid, ethyl ester</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>91</td><td>1</td><td>Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano</td><td>200</td><td>C12H24O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> 	#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92	1	dodecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl lauro	228	C14H28O2	WILEY229.LI	2	92	1	Dodecanoic acid, ethyl ester	228	C14H28O2	NIST21.LIB	3	92	1	Pentadecanoic acid, ethyl ester \$S\$ Ethyl pent	270	C17H34O2	NIST107.LIB	4	92	1	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	5	91	1	Dodecanoic acid, ethyl- \$S\$ Dodecanoic acid, et	228	C14H28O2	FFNSC1.3lib	6	91	1	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	7	91	1	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI	8	91	1	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB	9	91	1	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI
#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92	1	dodecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl lauro	228	C14H28O2	WILEY229.LI																																																																		
2	92	1	Dodecanoic acid, ethyl ester	228	C14H28O2	NIST21.LIB																																																																		
3	92	1	Pentadecanoic acid, ethyl ester \$S\$ Ethyl pent	270	C17H34O2	NIST107.LIB																																																																		
4	92	1	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
5	91	1	Dodecanoic acid, ethyl- \$S\$ Dodecanoic acid, et	228	C14H28O2	FFNSC1.3lib																																																																		
6	91	1	Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
7	91	1	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
8	91	1	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB																																																																		
9	91	1	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI																																																																		
48	 <p>hexadecano – 93%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Similar</th> <th>Resp</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>4</td><td>93</td><td>1</td><td>Hexadecane</td><td>226</td><td>C16H34</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>93</td><td>1</td><td>Pentadecane <n> \$S\$ Pentadecane</td><td>212</td><td>C15H32</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>6</td><td>93</td><td>1</td><td>Eicosane</td><td>282</td><td>C20H42</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>93</td><td>1</td><td>Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$S\$ Cetane</td><td>226</td><td>C16H34</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>92</td><td>1</td><td>Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>92</td><td>1</td><td>Tridecane</td><td>184</td><td>C13H28</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>92</td><td>1</td><td>Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>92</td><td>1</td><td>Heptadecane</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>12</td><td>92</td><td>1</td><td>Heptadecane</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table> 	#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	4	93	1	Hexadecane	226	C16H34	WILEY229.LI	5	93	1	Pentadecane <n> \$S\$ Pentadecane	212	C15H32	FFNSC1.3lib	6	93	1	Eicosane	282	C20H42	NIST21.LIB	7	93	1	Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$S\$ Cetane	226	C16H34	WILEY229.LI	8	92	1	Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$	240	C17H36	WILEY229.LI	9	92	1	Tridecane	184	C13H28	NIST21.LIB	10	92	1	Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$	240	C17H36	WILEY229.LI	11	92	1	Heptadecane	240	C17H36	NIST21.LIB	12	92	1	Heptadecane	240	C17H36	NIST21.LIB
#	Similar	Resp	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
4	93	1	Hexadecane	226	C16H34	WILEY229.LI																																																																		
5	93	1	Pentadecane <n> \$S\$ Pentadecane	212	C15H32	FFNSC1.3lib																																																																		
6	93	1	Eicosane	282	C20H42	NIST21.LIB																																																																		
7	93	1	Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$S\$ Cetane	226	C16H34	WILEY229.LI																																																																		
8	92	1	Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$	240	C17H36	WILEY229.LI																																																																		
9	92	1	Tridecane	184	C13H28	NIST21.LIB																																																																		
10	92	1	Heptadecane (CAS) n-Heptadecane \$S\$	240	C17H36	WILEY229.LI																																																																		
11	92	1	Heptadecane	240	C17H36	NIST21.LIB																																																																		
12	92	1	Heptadecane	240	C17H36	NIST21.LIB																																																																		

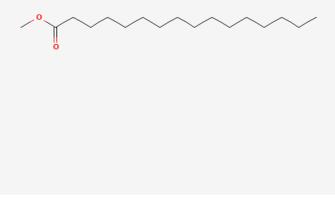
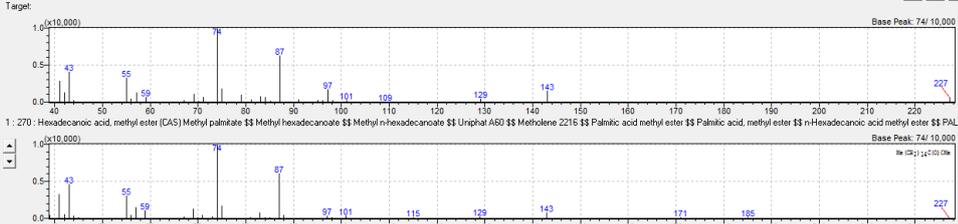
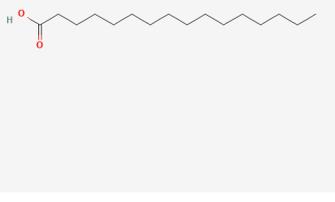
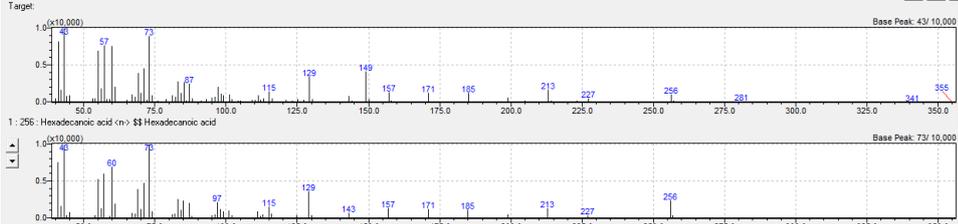
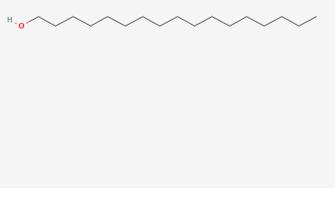
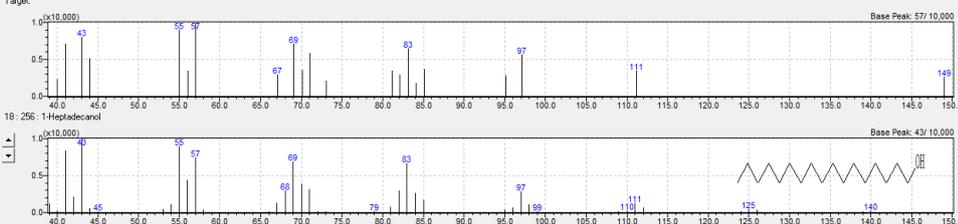
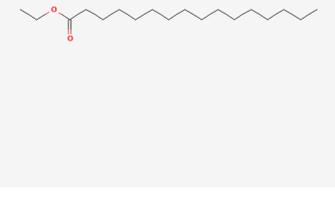
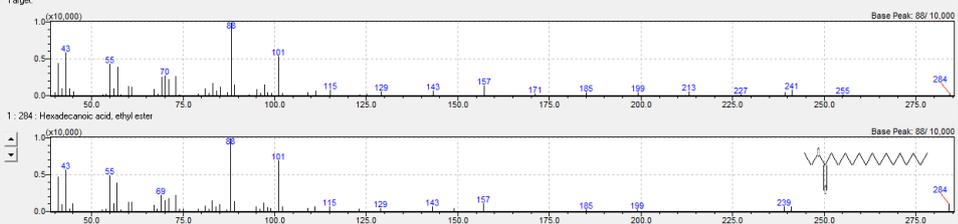
49	 <p>tetradecanal – 89%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>88</td><td>✓</td><td>Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$S Myrist</td><td>212</td><td>C14 H28 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>88</td><td></td><td>.delta.-[2]-dodecanol \$S</td><td>196</td><td>C12 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>87</td><td></td><td>Tetradecanal <n> \$S Tetradecanal</td><td>212</td><td>C14 H28 O</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>4</td><td>87</td><td></td><td>1-Hexadecanal \$S</td><td>252</td><td>C17 H32 O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>87</td><td></td><td>Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$S 1-Dodecan</td><td>194</td><td>C12 H24 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>86</td><td></td><td>Pentadecanal- \$S</td><td>226</td><td>C15H30O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>86</td><td></td><td>Pentadecanal- \$S</td><td>226</td><td>C15H30O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>86</td><td></td><td>Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S</td><td>240</td><td>C16H32O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>86</td><td></td><td>Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S</td><td>240</td><td>C16H32O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 43/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	88	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$S Myrist	212	C14 H28 O	WILEY229.LI	2	88		.delta.-[2]-dodecanol \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI	3	87		Tetradecanal <n> \$S Tetradecanal	212	C14 H28 O	FFNSC1.3.IB	4	87		1-Hexadecanal \$S	252	C17 H32 O	NIST107.LIB	5	87		Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$S 1-Dodecan	194	C12 H24 O	WILEY229.LI	6	86		Pentadecanal- \$S	226	C15H30O	NIST107.LIB	7	86		Pentadecanal- \$S	226	C15H30O	NIST08.LIB	8	86		Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S	240	C16H32O	NIST107.LIB	9	86		Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S	240	C16H32O	NIST08.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	88	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$S Myrist	212	C14 H28 O	WILEY229.LI																																																																		
2	88		.delta.-[2]-dodecanol \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
3	87		Tetradecanal <n> \$S Tetradecanal	212	C14 H28 O	FFNSC1.3.IB																																																																		
4	87		1-Hexadecanal \$S	252	C17 H32 O	NIST107.LIB																																																																		
5	87		Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$S 1-Dodecan	194	C12 H24 O	WILEY229.LI																																																																		
6	86		Pentadecanal- \$S	226	C15H30O	NIST107.LIB																																																																		
7	86		Pentadecanal- \$S	226	C15H30O	NIST08.LIB																																																																		
8	86		Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S	240	C16H32O	NIST107.LIB																																																																		
9	86		Hexadecanal \$S Palmitaldehyde \$S	240	C16H32O	NIST08.LIB																																																																		
50	 <p>2,6,10-trimetilpentadecano – 85%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>12</td><td>85</td><td></td><td>PENTADECANE, 2,6,10-TRIMETHYL- \$S NO</td><td>254</td><td>C18 H38</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>13</td><td>85</td><td></td><td>Pentadecane <n> \$S Pentadecane</td><td>212</td><td>C15 H32</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>14</td><td>85</td><td></td><td>Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S 2,6,10-Trim</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>15</td><td>85</td><td></td><td>Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>85</td><td></td><td>Tetracosane <n> \$S Tetracosane</td><td>338</td><td>C24 H50</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>17</td><td>85</td><td></td><td>Tetradecane <n> \$S Tetradecane</td><td>198</td><td>C14 H30</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>18</td><td>85</td><td></td><td>Sulfuric acid, 2-ethylhexyl nonyl ester</td><td>320</td><td>C17H36O3S</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>85</td><td></td><td>Heptacosane (CAS) Utrascantone \$S n-He</td><td>437</td><td>C31 H64</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>20</td><td>85</td><td></td><td>Heptacosane</td><td>436</td><td>C31H64</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 57/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	12	85		PENTADECANE, 2,6,10-TRIMETHYL- \$S NO	254	C18 H38	WILEY229.LI	13	85		Pentadecane <n> \$S Pentadecane	212	C15 H32	FFNSC1.3.IB	14	85		Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S 2,6,10-Trim	254	C18H38	NIST08.LIB	15	85		Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S	254	C18H38	NIST107.LIB	16	85		Tetracosane <n> \$S Tetracosane	338	C24 H50	FFNSC1.3.IB	17	85		Tetradecane <n> \$S Tetradecane	198	C14 H30	FFNSC1.3.IB	18	85		Sulfuric acid, 2-ethylhexyl nonyl ester	320	C17H36O3S	NIST08.LIB	19	85		Heptacosane (CAS) Utrascantone \$S n-He	437	C31 H64	WILEY229.LI	20	85		Heptacosane	436	C31H64	NIST21.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
12	85		PENTADECANE, 2,6,10-TRIMETHYL- \$S NO	254	C18 H38	WILEY229.LI																																																																		
13	85		Pentadecane <n> \$S Pentadecane	212	C15 H32	FFNSC1.3.IB																																																																		
14	85		Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S 2,6,10-Trim	254	C18H38	NIST08.LIB																																																																		
15	85		Pentadecane, 2,6,10-trimethyl- \$S	254	C18H38	NIST107.LIB																																																																		
16	85		Tetracosane <n> \$S Tetracosane	338	C24 H50	FFNSC1.3.IB																																																																		
17	85		Tetradecane <n> \$S Tetradecane	198	C14 H30	FFNSC1.3.IB																																																																		
18	85		Sulfuric acid, 2-ethylhexyl nonyl ester	320	C17H36O3S	NIST08.LIB																																																																		
19	85		Heptacosane (CAS) Utrascantone \$S n-He	437	C31 H64	WILEY229.LI																																																																		
20	85		Heptacosane	436	C31H64	NIST21.LIB																																																																		
51	 <p>tetradecan-1-ol – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>6</td><td>92</td><td></td><td>Tetradecanol <n> \$S 1-Tetradecanol</td><td>214</td><td>C14 H30 O</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>7</td><td>92</td><td></td><td>1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S</td><td>196</td><td>C12 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>92</td><td></td><td>1-Dodecanol</td><td>196</td><td>C12H26O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>92</td><td></td><td>Pentadecanol <n> \$S Pentadecanol</td><td>228</td><td>C15 H32 O</td><td>FFNSC1.3.IB</td></tr> <tr><td>10</td><td>92</td><td></td><td>1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec</td><td>196</td><td>C12H26O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>11</td><td>92</td><td></td><td>1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec</td><td>196</td><td>C12H26O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>12</td><td>91</td><td></td><td>1-Undecanol (CAS) n-Undecanol \$S 1-Unde</td><td>172</td><td>C11 H24 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>13</td><td>91</td><td></td><td>1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S</td><td>196</td><td>C12 H26 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>14</td><td>91</td><td></td><td>1-TETRADECANOL \$S</td><td>214</td><td>C14 H30 O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 55/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	6	92		Tetradecanol <n> \$S 1-Tetradecanol	214	C14 H30 O	FFNSC1.3.IB	7	92		1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI	8	92		1-Dodecanol	196	C12H26O	NIST21.LIB	9	92		Pentadecanol <n> \$S Pentadecanol	228	C15 H32 O	FFNSC1.3.IB	10	92		1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec	196	C12H26O	NIST107.LIB	11	92		1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec	196	C12H26O	NIST08.LIB	12	91		1-Undecanol (CAS) n-Undecanol \$S 1-Unde	172	C11 H24 O	WILEY229.LI	13	91		1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI	14	91		1-TETRADECANOL \$S	214	C14 H30 O	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
6	92		Tetradecanol <n> \$S 1-Tetradecanol	214	C14 H30 O	FFNSC1.3.IB																																																																		
7	92		1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
8	92		1-Dodecanol	196	C12H26O	NIST21.LIB																																																																		
9	92		Pentadecanol <n> \$S Pentadecanol	228	C15 H32 O	FFNSC1.3.IB																																																																		
10	92		1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec	196	C12H26O	NIST107.LIB																																																																		
11	92		1-Dodecanol \$S Dodecyl alcohol \$S n-Dodec	196	C12H26O	NIST08.LIB																																																																		
12	91		1-Undecanol (CAS) n-Undecanol \$S 1-Unde	172	C11 H24 O	WILEY229.LI																																																																		
13	91		1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$S CO 12 \$S	196	C12 H26 O	WILEY229.LI																																																																		
14	91		1-TETRADECANOL \$S	214	C14 H30 O	WILEY229.LI																																																																		
52	 <p>tridecanoato de etila – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2</td><td>91</td><td></td><td>Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>91</td><td></td><td>Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td></td><td>Tridecanoic acid, ethyl ester \$S Ethyl pent</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td></td><td>Nonadecanoic acid, ethyl ester \$S</td><td>326</td><td>C21H42O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>90</td><td></td><td>Octadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste</td><td>312</td><td>C20 H40 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>90</td><td></td><td>Octadecanoic acid, ethyl ester</td><td>312</td><td>C20H40O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td></td><td>ETHYL TRIDECANOATE \$S</td><td>242</td><td>C15 H30 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>89</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18 H36 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>10</td><td>89</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18 H36 O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p>  <p>Base Peak: 88/10,000</p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	2	91		Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e	242	C15H30O2	NIST107.LIB	3	91		Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e	242	C15H30O2	NIST08.LIB	4	91		Tridecanoic acid, ethyl ester \$S Ethyl pent	270	C17H34O2	NIST107.LIB	5	91		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$S	326	C21H42O2	NIST107.LIB	6	90		Octadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste	312	C20 H40 O2	WILEY229.LI	7	90		Octadecanoic acid, ethyl ester	312	C20H40O2	NIST21.LIB	8	90		ETHYL TRIDECANOATE \$S	242	C15 H30 O2	WILEY229.LI	9	89		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18 H36 O2	WILEY229.LI	10	89		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18 H36 O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
2	91		Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e	242	C15H30O2	NIST107.LIB																																																																		
3	91		Ethyl tridecanoate \$S Tridecanoic acid ethyl e	242	C15H30O2	NIST08.LIB																																																																		
4	91		Tridecanoic acid, ethyl ester \$S Ethyl pent	270	C17H34O2	NIST107.LIB																																																																		
5	91		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$S	326	C21H42O2	NIST107.LIB																																																																		
6	90		Octadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste	312	C20 H40 O2	WILEY229.LI																																																																		
7	90		Octadecanoic acid, ethyl ester	312	C20H40O2	NIST21.LIB																																																																		
8	90		ETHYL TRIDECANOATE \$S	242	C15 H30 O2	WILEY229.LI																																																																		
9	89		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18 H36 O2	WILEY229.LI																																																																		
10	89		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18 H36 O2	WILEY229.LI																																																																		

53	 <p>heptadecano – 97%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>3</td> <td>97</td> <td>✓</td> <td>Heptadecane (n) \$\$ Heptadecane</td> <td>240</td> <td>C17H36</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>97</td> <td>✓</td> <td>Tetradecane (n) \$\$ Tetradecane</td> <td>198</td> <td>C14H30</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Tetradecane</td> <td>198</td> <td>C14H30</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Nonadecane (CAS) n Nonadecane \$\$</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Nonadecane</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Tetradecane</td> <td>198</td> <td>C14H30</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Octadecane (n) \$\$ Octadecane</td> <td>254</td> <td>C18H38</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Tridecane (n) \$\$ Tridecane</td> <td>184</td> <td>C13H28</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> <tr> <td>11</td> <td>96</td> <td>✓</td> <td>Eicosane</td> <td>282</td> <td>C20H42</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> </tbody> </table> <p>Target: </p> <p>3: 240: Heptadecane (n) \$\$ Heptadecane </p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	3	97	✓	Heptadecane (n) \$\$ Heptadecane	240	C17H36	FFNSC1.3Ib	4	97	✓	Tetradecane (n) \$\$ Tetradecane	198	C14H30	FFNSC1.3Ib	5	96	✓	Tetradecane	198	C14H30	NIST21.LIB	6	96	✓	Nonadecane (CAS) n Nonadecane \$\$	268	C19H40	WILEY229.LI	7	96	✓	Nonadecane	268	C19H40	NIST21.LIB	8	96	✓	Tetradecane	198	C14H30	NIST21.LIB	9	96	✓	Octadecane (n) \$\$ Octadecane	254	C18H38	FFNSC1.3Ib	10	96	✓	Tridecane (n) \$\$ Tridecane	184	C13H28	FFNSC1.3Ib	11	96	✓	Eicosane	282	C20H42	NIST21.LIB
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
3	97	✓	Heptadecane (n) \$\$ Heptadecane	240	C17H36	FFNSC1.3Ib																																																																		
4	97	✓	Tetradecane (n) \$\$ Tetradecane	198	C14H30	FFNSC1.3Ib																																																																		
5	96	✓	Tetradecane	198	C14H30	NIST21.LIB																																																																		
6	96	✓	Nonadecane (CAS) n Nonadecane \$\$	268	C19H40	WILEY229.LI																																																																		
7	96	✓	Nonadecane	268	C19H40	NIST21.LIB																																																																		
8	96	✓	Tetradecane	198	C14H30	NIST21.LIB																																																																		
9	96	✓	Octadecane (n) \$\$ Octadecane	254	C18H38	FFNSC1.3Ib																																																																		
10	96	✓	Tridecane (n) \$\$ Tridecane	184	C13H28	FFNSC1.3Ib																																																																		
11	96	✓	Eicosane	282	C20H42	NIST21.LIB																																																																		
54	 <p>2,6,10,14-tetrametilpentadecano – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>95</td> <td>✓</td> <td>Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>95</td> <td>✓</td> <td>Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>94</td> <td>✓</td> <td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn</td> <td>282</td> <td>C20H42</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>94</td> <td>✓</td> <td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn</td> <td>282</td> <td>C20H42</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>93</td> <td>✓</td> <td>Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$</td> <td>296</td> <td>C21H44</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>93</td> <td>✓</td> <td>Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$ 2,6,1</td> <td>296</td> <td>C21H44</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>93</td> <td>✓</td> <td>Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- (CAS) 2</td> <td>296</td> <td>C21H44</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>93</td> <td>✓</td> <td>Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) 2</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>93</td> <td>✓</td> <td>Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn</td> <td>268</td> <td>C19H40</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> </tbody> </table> <p>Target: </p> <p>1: 268: Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pristane \$\$ PRISTANE (FIELD IDN) \$\$ 2,6,10,14-Tetramethylpentadecane \$\$ Pristan \$\$ Noplytan \$\$ Noplytane \$\$ Bute hydrocarbon \$\$ 2,6,10,14-TETRAMETHYL PENTADECANE \$\$ </p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	95	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	WILEY229.LI	2	95	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	NIST21.LIB	3	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	282	C20H42	WILEY229.LI	4	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	282	C20H42	NIST21.LIB	5	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$	296	C21H44	NIST107.LIB	6	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$ 2,6,1	296	C21H44	NIST08.LIB	7	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- (CAS) 2	296	C21H44	WILEY229.LI	8	93	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) 2	268	C19H40	NIST21.LIB	9	93	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	95	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	WILEY229.LI																																																																		
2	95	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	NIST21.LIB																																																																		
3	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	282	C20H42	WILEY229.LI																																																																		
4	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	282	C20H42	NIST21.LIB																																																																		
5	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$	296	C21H44	NIST107.LIB																																																																		
6	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$ 2,6,1	296	C21H44	NIST08.LIB																																																																		
7	93	✓	Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- (CAS) 2	296	C21H44	WILEY229.LI																																																																		
8	93	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) 2	268	C19H40	NIST21.LIB																																																																		
9	93	✓	Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Pn	268	C19H40	WILEY229.LI																																																																		
55	 <p>pentadecanal – 84%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>84</td> <td>✓</td> <td>Pentadecanal \$\$</td> <td>226</td> <td>C19H38O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>84</td> <td>✓</td> <td>Pentadecanal</td> <td>226</td> <td>C19H38O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>82</td> <td>✓</td> <td>Oxirane, tetradecyl-</td> <td>240</td> <td>C18H36O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>82</td> <td>✓</td> <td>Tetradecanal \$\$ Myristaldehyde \$\$ Myristald</td> <td>212</td> <td>C14H28O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>82</td> <td>✓</td> <td>Tetradecanal (n) \$\$ Tetradecanal</td> <td>212</td> <td>C14H28O</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>81</td> <td>✓</td> <td>Cyclododecanal</td> <td>184</td> <td>C12H24O</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>81</td> <td>✓</td> <td>1-Octadecyne \$\$</td> <td>250</td> <td>C18H34</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>81</td> <td>✓</td> <td>1-Octadecyne</td> <td>250</td> <td>C18H34</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>81</td> <td>✓</td> <td>Tridecanal (n) \$\$ Tridecanal</td> <td>198</td> <td>C13H26O</td> <td>FFNSC1.3Ib</td> </tr> </tbody> </table> <p>Target: </p> <p>1: 226: Pentadecanal \$\$ </p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	84	✓	Pentadecanal \$\$	226	C19H38O	NIST107.LIB	2	84	✓	Pentadecanal	226	C19H38O	NIST08.LIB	3	82	✓	Oxirane, tetradecyl-	240	C18H36O	NIST21.LIB	4	82	✓	Tetradecanal \$\$ Myristaldehyde \$\$ Myristald	212	C14H28O	NIST107.LIB	5	82	✓	Tetradecanal (n) \$\$ Tetradecanal	212	C14H28O	FFNSC1.3Ib	6	81	✓	Cyclododecanal	184	C12H24O	NIST21.LIB	7	81	✓	1-Octadecyne \$\$	250	C18H34	NIST107.LIB	8	81	✓	1-Octadecyne	250	C18H34	NIST08.LIB	9	81	✓	Tridecanal (n) \$\$ Tridecanal	198	C13H26O	FFNSC1.3Ib
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	84	✓	Pentadecanal \$\$	226	C19H38O	NIST107.LIB																																																																		
2	84	✓	Pentadecanal	226	C19H38O	NIST08.LIB																																																																		
3	82	✓	Oxirane, tetradecyl-	240	C18H36O	NIST21.LIB																																																																		
4	82	✓	Tetradecanal \$\$ Myristaldehyde \$\$ Myristald	212	C14H28O	NIST107.LIB																																																																		
5	82	✓	Tetradecanal (n) \$\$ Tetradecanal	212	C14H28O	FFNSC1.3Ib																																																																		
6	81	✓	Cyclododecanal	184	C12H24O	NIST21.LIB																																																																		
7	81	✓	1-Octadecyne \$\$	250	C18H34	NIST107.LIB																																																																		
8	81	✓	1-Octadecyne	250	C18H34	NIST08.LIB																																																																		
9	81	✓	Tridecanal (n) \$\$ Tridecanal	198	C13H26O	FFNSC1.3Ib																																																																		
56	 <p>dodecan-5-ilciclohexano – 86%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flag</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>18</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Dodecane, 4-cyclohexyl- \$\$ (1-Propyl)homily</td> <td>252</td> <td>C18H36</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>19</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$</td> <td>252</td> <td>C18H36</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>20</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>DODECANE, 5-CYCLOHEXYL- \$\$</td> <td>252</td> <td>C18H36</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>21</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$ (1-Butyl)cyclohexyl</td> <td>252</td> <td>C18H36</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>22</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- (CAS) 7-Cycl</td> <td>364</td> <td>C26H52</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>23</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane</td> <td>364</td> <td>C26H52</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>24</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane</td> <td>364</td> <td>C26H52</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>25</td> <td>86</td> <td>✓</td> <td>Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$</td> <td>238</td> <td>C17H34</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table> <p>Target: </p> <p>19: 252: Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$ </p>	Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	18	86	✓	Dodecane, 4-cyclohexyl- \$\$ (1-Propyl)homily	252	C18H36	NIST08.LIB	19	86	✓	Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$	252	C18H36	NIST107.LIB	20	86	✓	DODECANE, 5-CYCLOHEXYL- \$\$	252	C18H36	WILEY229.LI	21	86	✓	Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$ (1-Butyl)cyclohexyl	252	C18H36	NIST08.LIB	22	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- (CAS) 7-Cycl	364	C26H52	WILEY229.LI	23	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane	364	C26H52	NIST107.LIB	24	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane	364	C26H52	NIST08.LIB	25	86	✓	Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$	238	C17H34	NIST107.LIB							
Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
18	86	✓	Dodecane, 4-cyclohexyl- \$\$ (1-Propyl)homily	252	C18H36	NIST08.LIB																																																																		
19	86	✓	Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$	252	C18H36	NIST107.LIB																																																																		
20	86	✓	DODECANE, 5-CYCLOHEXYL- \$\$	252	C18H36	WILEY229.LI																																																																		
21	86	✓	Dodecane, 5-cyclohexyl- \$\$ (1-Butyl)cyclohexyl	252	C18H36	NIST08.LIB																																																																		
22	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- (CAS) 7-Cycl	364	C26H52	WILEY229.LI																																																																		
23	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane	364	C26H52	NIST107.LIB																																																																		
24	86	✓	Cyclohexane, (1-heptyltetradecyl- \$\$ Eicosane	364	C26H52	NIST08.LIB																																																																		
25	86	✓	Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$	238	C17H34	NIST107.LIB																																																																		

57	 <p>3-metilheptadecano – 90%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>90</td><td>✓</td><td>Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>90</td><td></td><td>Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>88</td><td></td><td>Tetradecane, 3-methyl- \$\$ Tetradecane</td><td>214</td><td>C18H38</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>87</td><td></td><td>Heptadecane, 1-iodo- \$\$ 1-Iodoheptadecane</td><td>478</td><td>C18H37I</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>87</td><td></td><td>Docosane -n-> \$\$ Docosane</td><td>352</td><td>C22H44</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>6</td><td>87</td><td></td><td>Tetradecane -n-> \$\$ Tetradecane</td><td>310</td><td>C22H44</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>7</td><td>87</td><td></td><td>Pentacosane -n-> \$\$ Pentacosane</td><td>338</td><td>C24H50</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>8</td><td>87</td><td></td><td>Hexacosane -n-> \$\$ Hexacosane</td><td>352</td><td>C25H52</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td></td><td>Eicosane -n-> \$\$ Eicosane</td><td>296</td><td>C21H44</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>9</td><td>87</td><td></td><td>Eicosane -n-> \$\$ Eicosane</td><td>282</td><td>C20H42</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	90	✓	Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane	254	C18H38	NIST07.LIB	2	90		Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane	254	C18H38	NIST07.LIB	3	88		Tetradecane, 3-methyl- \$\$ Tetradecane	214	C18H38	NIST07.LIB	4	87		Heptadecane, 1-iodo- \$\$ 1-Iodoheptadecane	478	C18H37I	NIST07.LIB	5	87		Docosane -n-> \$\$ Docosane	352	C22H44	FFNSC1.3lib	6	87		Tetradecane -n-> \$\$ Tetradecane	310	C22H44	FFNSC1.3lib	7	87		Pentacosane -n-> \$\$ Pentacosane	338	C24H50	FFNSC1.3lib	8	87		Hexacosane -n-> \$\$ Hexacosane	352	C25H52	FFNSC1.3lib	9	87		Eicosane -n-> \$\$ Eicosane	296	C21H44	FFNSC1.3lib	9	87		Eicosane -n-> \$\$ Eicosane	282	C20H42	FFNSC1.3lib
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																									
1	90	✓	Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane	254	C18H38	NIST07.LIB																																																																									
2	90		Heptadecane, 3-methyl- \$\$ 3-Methylheptadecane	254	C18H38	NIST07.LIB																																																																									
3	88		Tetradecane, 3-methyl- \$\$ Tetradecane	214	C18H38	NIST07.LIB																																																																									
4	87		Heptadecane, 1-iodo- \$\$ 1-Iodoheptadecane	478	C18H37I	NIST07.LIB																																																																									
5	87		Docosane -n-> \$\$ Docosane	352	C22H44	FFNSC1.3lib																																																																									
6	87		Tetradecane -n-> \$\$ Tetradecane	310	C22H44	FFNSC1.3lib																																																																									
7	87		Pentacosane -n-> \$\$ Pentacosane	338	C24H50	FFNSC1.3lib																																																																									
8	87		Hexacosane -n-> \$\$ Hexacosane	352	C25H52	FFNSC1.3lib																																																																									
9	87		Eicosane -n-> \$\$ Eicosane	296	C21H44	FFNSC1.3lib																																																																									
9	87		Eicosane -n-> \$\$ Eicosane	282	C20H42	FFNSC1.3lib																																																																									
58	 <p>pentadecan-1-ol – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2</td><td>91</td><td></td><td>Pentadecanol -n-> \$\$ Pentadecanol</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>3</td><td>91</td><td></td><td>Tetradecanol -n-> \$\$ 1-Tetradecanol</td><td>214</td><td>C14H30O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td></td><td>1-Heptadecanol \$\$ n-Heptadecanol \$\$ Hepta</td><td>256</td><td>C17H36O</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td></td><td>1-Pentadecanol \$\$ n-Pentadecanol \$\$ n-1-Pe</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td></td><td>1-Pentadecanol \$\$</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>91</td><td></td><td>1-Pentadecanol</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td></td><td>Tridecanol -n-> \$\$ 1-Tridecanol</td><td>200</td><td>C13H28O</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td></td><td>1-Tridecanol</td><td>200</td><td>C13H28O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>90</td><td></td><td>1-Pentadecanol</td><td>228</td><td>C15H32O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	2	91		Pentadecanol -n-> \$\$ Pentadecanol	228	C15H32O	FFNSC1.3lib	3	91		Tetradecanol -n-> \$\$ 1-Tetradecanol	214	C14H30O	FFNSC1.3lib	4	91		1-Heptadecanol \$\$ n-Heptadecanol \$\$ Hepta	256	C17H36O	NIST07.LIB	5	91		1-Pentadecanol \$\$ n-Pentadecanol \$\$ n-1-Pe	228	C15H32O	NIST07.LIB	6	91		1-Pentadecanol \$\$	228	C15H32O	WILEY229.LI	7	91		1-Pentadecanol	228	C15H32O	NIST21.LIB	8	90		Tridecanol -n-> \$\$ 1-Tridecanol	200	C13H28O	FFNSC1.3lib	9	90		1-Tridecanol	200	C13H28O	NIST21.LIB	10	90		1-Pentadecanol	228	C15H32O	NIST21.LIB							
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																									
2	91		Pentadecanol -n-> \$\$ Pentadecanol	228	C15H32O	FFNSC1.3lib																																																																									
3	91		Tetradecanol -n-> \$\$ 1-Tetradecanol	214	C14H30O	FFNSC1.3lib																																																																									
4	91		1-Heptadecanol \$\$ n-Heptadecanol \$\$ Hepta	256	C17H36O	NIST07.LIB																																																																									
5	91		1-Pentadecanol \$\$ n-Pentadecanol \$\$ n-1-Pe	228	C15H32O	NIST07.LIB																																																																									
6	91		1-Pentadecanol \$\$	228	C15H32O	WILEY229.LI																																																																									
7	91		1-Pentadecanol	228	C15H32O	NIST21.LIB																																																																									
8	90		Tridecanol -n-> \$\$ 1-Tridecanol	200	C13H28O	FFNSC1.3lib																																																																									
9	90		1-Tridecanol	200	C13H28O	NIST21.LIB																																																																									
10	90		1-Pentadecanol	228	C15H32O	NIST21.LIB																																																																									
59	 <p>tetradecanoato de etila – 96%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>96</td><td>✓</td><td>Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent</td><td>256</td><td>C17H34O2</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>2</td><td>96</td><td></td><td>Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent</td><td>256</td><td>C17H34O2</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>95</td><td></td><td>Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>94</td><td></td><td>ethyl pentadecanoate \$\$</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>94</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>94</td><td></td><td>ETHYL MYRISTATE \$\$ ETHYL TETRADEC</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>93</td><td></td><td>ETHYL HEPTADECANOATE \$\$</td><td>298</td><td>C19H38O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>93</td><td></td><td>Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>93</td><td></td><td>ETHYL TRIDECANOATE \$\$</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	96	✓	Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent	256	C17H34O2	FFNSC1.3lib	2	96		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent	256	C17H34O2	NIST07.LIB	3	95		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI	4	94		ethyl pentadecanoate \$\$	270	C17H34O2	WILEY229.LI	5	94		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	6	94		ETHYL MYRISTATE \$\$ ETHYL TETRADEC	256	C16H32O2	WILEY229.LI	7	93		ETHYL HEPTADECANOATE \$\$	298	C19H38O2	WILEY229.LI	8	93		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI	9	93		ETHYL TRIDECANOATE \$\$	242	C15H30O2	WILEY229.LI							
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																									
1	96	✓	Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent	256	C17H34O2	FFNSC1.3lib																																																																									
2	96		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pent	256	C17H34O2	NIST07.LIB																																																																									
3	95		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																									
4	94		ethyl pentadecanoate \$\$	270	C17H34O2	WILEY229.LI																																																																									
5	94		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																									
6	94		ETHYL MYRISTATE \$\$ ETHYL TETRADEC	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																									
7	93		ETHYL HEPTADECANOATE \$\$	298	C19H38O2	WILEY229.LI																																																																									
8	93		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																									
9	93		ETHYL TRIDECANOATE \$\$	242	C15H30O2	WILEY229.LI																																																																									
60	 <p>octadecano – 96%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>96</td><td>✓</td><td>Octadecane, 3-methyl- \$\$ Octadecane</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>2</td><td>96</td><td></td><td>Heptadecane -n-> \$\$ Heptadecane</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>3</td><td>96</td><td></td><td>Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Normal-h</td><td>240</td><td>C17H36</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>96</td><td></td><td>Octadecane -n-> \$\$ Octadecane</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>FFNSC1.3lib</td></tr> <tr><td>5</td><td>96</td><td></td><td>Nonadecane (CAS) n-Nonadecane \$\$</td><td>268</td><td>C19H40</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>96</td><td></td><td>Octadecane (CAS) n-Octadecane \$\$</td><td>254</td><td>C18H38</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>96</td><td></td><td>Nonadecane</td><td>268</td><td>C19H40</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>96</td><td></td><td>Eicosane, 10-methyl- \$\$</td><td>296</td><td>C21H44</td><td>NIST07.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>96</td><td></td><td>Eicosane, 10-methyl- \$\$ 10-Methylicosane # \$</td><td>296</td><td>C21H44</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table> <p>Target:</p> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	96	✓	Octadecane, 3-methyl- \$\$ Octadecane	254	C18H38	NIST07.LIB	2	96		Heptadecane -n-> \$\$ Heptadecane	240	C17H36	FFNSC1.3lib	3	96		Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Normal-h	240	C17H36	NIST07.LIB	4	96		Octadecane -n-> \$\$ Octadecane	254	C18H38	FFNSC1.3lib	5	96		Nonadecane (CAS) n-Nonadecane \$\$	268	C19H40	WILEY229.LI	6	96		Octadecane (CAS) n-Octadecane \$\$	254	C18H38	WILEY229.LI	7	96		Nonadecane	268	C19H40	NIST21.LIB	8	96		Eicosane, 10-methyl- \$\$	296	C21H44	NIST07.LIB	9	96		Eicosane, 10-methyl- \$\$ 10-Methylicosane # \$	296	C21H44	NIST08.LIB							
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																									
1	96	✓	Octadecane, 3-methyl- \$\$ Octadecane	254	C18H38	NIST07.LIB																																																																									
2	96		Heptadecane -n-> \$\$ Heptadecane	240	C17H36	FFNSC1.3lib																																																																									
3	96		Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Normal-h	240	C17H36	NIST07.LIB																																																																									
4	96		Octadecane -n-> \$\$ Octadecane	254	C18H38	FFNSC1.3lib																																																																									
5	96		Nonadecane (CAS) n-Nonadecane \$\$	268	C19H40	WILEY229.LI																																																																									
6	96		Octadecane (CAS) n-Octadecane \$\$	254	C18H38	WILEY229.LI																																																																									
7	96		Nonadecane	268	C19H40	NIST21.LIB																																																																									
8	96		Eicosane, 10-methyl- \$\$	296	C21H44	NIST07.LIB																																																																									
9	96		Eicosane, 10-methyl- \$\$ 10-Methylicosane # \$	296	C21H44	NIST08.LIB																																																																									

61	 <p>2,6,10,14-tetrametilhexadecano – 94%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Respl</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph</td><td>282</td><td>C₂₀H₄₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>94</td><td>✓</td><td>Docosane <n>-> \$\$ Docosane</td><td>310</td><td>C₂₂H₄₆</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>3</td><td>94</td><td>✓</td><td>Eicosane <n>-> \$\$ Eicosane</td><td>282</td><td>C₂₀H₄₂</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>4</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexacosane <n>-> \$\$ Hexacosane</td><td>296</td><td>C₂₁H₄₄</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>5</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-</td><td>282</td><td>C₂₀H₄₂</td><td>NIST17.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph</td><td>282</td><td>C₂₀H₄₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexacosane \$\$ n-Hexacosane \$\$</td><td>296</td><td>C₂₁H₄₄</td><td>NIST17.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>94</td><td>✓</td><td>Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-</td><td>282</td><td>C₂₀H₄₂</td><td>NIST17.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>94</td><td>✓</td><td>Tetracosane <n>-> \$\$ Tetracosane</td><td>338</td><td>C₂₄H₅₀</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>1: 282: Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Phytane \$\$ 2,6,10,14-tetramethylhexadecane \$\$ Phytane \$\$</p>	Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI	2	94	✓	Docosane <n>-> \$\$ Docosane	310	C ₂₂ H ₄₆	FFNSC1.3.Ib	3	94	✓	Eicosane <n>-> \$\$ Eicosane	282	C ₂₀ H ₄₂	FFNSC1.3.Ib	4	94	✓	Hexacosane <n>-> \$\$ Hexacosane	296	C ₂₁ H ₄₄	FFNSC1.3.Ib	5	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST17.LIB	6	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI	7	94	✓	Hexacosane \$\$ n-Hexacosane \$\$	296	C ₂₁ H ₄₄	NIST17.LIB	8	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST17.LIB	9	94	✓	Tetracosane <n>-> \$\$ Tetracosane	338	C ₂₄ H ₅₀	FFNSC1.3.Ib
Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI																																																																		
2	94	✓	Docosane <n>-> \$\$ Docosane	310	C ₂₂ H ₄₆	FFNSC1.3.Ib																																																																		
3	94	✓	Eicosane <n>-> \$\$ Eicosane	282	C ₂₀ H ₄₂	FFNSC1.3.Ib																																																																		
4	94	✓	Hexacosane <n>-> \$\$ Hexacosane	296	C ₂₁ H ₄₄	FFNSC1.3.Ib																																																																		
5	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST17.LIB																																																																		
6	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI																																																																		
7	94	✓	Hexacosane \$\$ n-Hexacosane \$\$	296	C ₂₁ H ₄₄	NIST17.LIB																																																																		
8	94	✓	Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST17.LIB																																																																		
9	94	✓	Tetracosane <n>-> \$\$ Tetracosane	338	C ₂₄ H ₅₀	FFNSC1.3.Ib																																																																		
62	 <p>2-etil-hexil salicilato – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Respl</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>✓</td><td>Salicylate <2-ethylhexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr</td><td>250</td><td>C₁₅H₂₂O₃</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>2</td><td>63</td><td>✓</td><td>2-Ethylhexyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydr</td><td>250</td><td>C₁₅H₂₂O₃</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>79</td><td>✓</td><td>Salicylate <isopentyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>4</td><td>78</td><td>✓</td><td>Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester (</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>78</td><td>✓</td><td>Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester \$</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>78</td><td>✓</td><td>Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>78</td><td>✓</td><td>Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>78</td><td>✓</td><td>Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester \$</td><td>208</td><td>C₁₂H₁₆O₃</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>78</td><td>✓</td><td>Salicylate <hexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy</td><td>222</td><td>C₁₃H₁₈O₃</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 120/10,000</p> <p>1: 250: Salicylate <2-ethylhexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-ethylhexyl ester</p>	Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	✓	Salicylate <2-ethylhexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	FFNSC1.3.Ib	2	63	✓	2-Ethylhexyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST08.LIB	3	79	✓	Salicylate <isopentyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	FFNSC1.3.Ib	4	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester (208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	WILEY229.LI	5	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester \$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB	6	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB	7	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST08.LIB	8	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester \$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB	9	78	✓	Salicylate <hexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy	222	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	FFNSC1.3.Ib
Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	✓	Salicylate <2-ethylhexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	FFNSC1.3.Ib																																																																		
2	63	✓	2-Ethylhexyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST08.LIB																																																																		
3	79	✓	Salicylate <isopentyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	FFNSC1.3.Ib																																																																		
4	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester (208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	WILEY229.LI																																																																		
5	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 3-methylbutyl ester \$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB																																																																		
6	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB																																																																		
7	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, pentyl ester \$\$ Salic	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST08.LIB																																																																		
8	78	✓	Benzoic acid, 2-hydroxy-, 2-methylbutyl ester \$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB																																																																		
9	78	✓	Salicylate <hexyl> \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy	222	C ₁₃ H ₁₈ O ₃	FFNSC1.3.Ib																																																																		
63	 <p>hexadecanal – 87%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Respl</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>87</td><td>✓</td><td>Hexadecanal (CAS) PALMITIC ALDEHYDE \$</td><td>240</td><td>C₁₆H₃₂O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>87</td><td>✓</td><td>Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan</td><td>184</td><td>C₁₂H₂₄O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>87</td><td>✓</td><td>Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl</td><td>212</td><td>C₁₄H₂₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>86</td><td>✓</td><td>Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl</td><td>212</td><td>C₁₄H₂₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>86</td><td>✓</td><td>Tetradecanal <n>-> \$\$ Tetradecanal</td><td>212</td><td>C₁₄H₂₈O</td><td>FFNSC1.3.Ib</td></tr> <tr><td>6</td><td>86</td><td>✓</td><td>Pentadecanal- \$\$</td><td>226</td><td>C₁₅H₃₀O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>86</td><td>✓</td><td>Pentadecanal- \$\$</td><td>226</td><td>C₁₅H₃₀O</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>86</td><td>✓</td><td>Octadecanal \$\$ Stearaldehyde \$\$ Octadecyl</td><td>268</td><td>C₁₈H₃₆O</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>86</td><td>✓</td><td>Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl</td><td>268</td><td>C₁₈H₃₆O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>1: 240: Hexadecanal (CAS) PALMITIC ALDEHYDE \$\$ Palmitaldehyde \$\$</p>	Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	87	✓	Hexadecanal (CAS) PALMITIC ALDEHYDE \$	240	C ₁₆ H ₃₂ O	WILEY229.LI	2	87	✓	Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan	184	C ₁₂ H ₂₄ O	WILEY229.LI	3	87	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl	212	C ₁₄ H ₂₈ O	WILEY229.LI	4	86	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl	212	C ₁₄ H ₂₈ O	WILEY229.LI	5	86	✓	Tetradecanal <n>-> \$\$ Tetradecanal	212	C ₁₄ H ₂₈ O	FFNSC1.3.Ib	6	86	✓	Pentadecanal- \$\$	226	C ₁₅ H ₃₀ O	NIST107.LIB	7	86	✓	Pentadecanal- \$\$	226	C ₁₅ H ₃₀ O	NIST08.LIB	8	86	✓	Octadecanal \$\$ Stearaldehyde \$\$ Octadecyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST107.LIB	9	86	✓	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI
Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	87	✓	Hexadecanal (CAS) PALMITIC ALDEHYDE \$	240	C ₁₆ H ₃₂ O	WILEY229.LI																																																																		
2	87	✓	Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$\$ 1-Dodecan	184	C ₁₂ H ₂₄ O	WILEY229.LI																																																																		
3	87	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl	212	C ₁₄ H ₂₈ O	WILEY229.LI																																																																		
4	86	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl	212	C ₁₄ H ₂₈ O	WILEY229.LI																																																																		
5	86	✓	Tetradecanal <n>-> \$\$ Tetradecanal	212	C ₁₄ H ₂₈ O	FFNSC1.3.Ib																																																																		
6	86	✓	Pentadecanal- \$\$	226	C ₁₅ H ₃₀ O	NIST107.LIB																																																																		
7	86	✓	Pentadecanal- \$\$	226	C ₁₅ H ₃₀ O	NIST08.LIB																																																																		
8	86	✓	Octadecanal \$\$ Stearaldehyde \$\$ Octadecyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST107.LIB																																																																		
9	86	✓	Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI																																																																		
64	 <p>tetradecanoato de propano-2-ila – 81%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Respl</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>9</td><td>81</td><td>✓</td><td>Isopropyl Myristate</td><td>270</td><td>C₁₇H₃₄O₂</td><td>NIST201.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>81</td><td>✓</td><td>Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$\$ n-O</td><td>284</td><td>C₁₈H₃₆O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>81</td><td>✓</td><td>Isopropyl Myristate \$\$ Tetradecanoic acid, 1-</td><td>270</td><td>C₁₇H₃₄O₂</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>12</td><td>81</td><td>✓</td><td>ISOCHLAPIN B 1,2:4: \$\$</td><td>350</td><td>C₁₉H₂₆O₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>13</td><td>81</td><td>✓</td><td>ISOCHLAPIN B \$\$</td><td>346</td><td>C₁₉H₂₂O₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>14</td><td>80</td><td>✓</td><td>9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$</td><td>282</td><td>C₁₈H₃₄O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>15</td><td>80</td><td>✓</td><td>Isopropyl Palmitate</td><td>298</td><td>C₁₉H₃₈O₂</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>80</td><td>✓</td><td>Docosanoic acid</td><td>340</td><td>C₂₂H₄₄O₂</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>17</td><td>80</td><td>✓</td><td>9,9-Dimethylbicyclo[3.3.1]nona-2,4-dione \$\$</td><td>212</td><td>C₁₁H₁₆O₄</td><td>NIST107.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>9: 270: Isopropyl Myristate</p>	Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	9	81	✓	Isopropyl Myristate	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST201.LIB	10	81	✓	Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$\$ n-O	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	WILEY229.LI	11	81	✓	Isopropyl Myristate \$\$ Tetradecanoic acid, 1-	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST107.LIB	12	81	✓	ISOCHLAPIN B 1,2:4: \$\$	350	C ₁₉ H ₂₆ O ₆	WILEY229.LI	13	81	✓	ISOCHLAPIN B \$\$	346	C ₁₉ H ₂₂ O ₆	WILEY229.LI	14	80	✓	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$	282	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	WILEY229.LI	15	80	✓	Isopropyl Palmitate	298	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	NIST21.LIB	16	80	✓	Docosanoic acid	340	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	NIST21.LIB	17	80	✓	9,9-Dimethylbicyclo[3.3.1]nona-2,4-dione \$\$	212	C ₁₁ H ₁₆ O ₄	NIST107.LIB
Hit	Similar	Respl	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
9	81	✓	Isopropyl Myristate	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST201.LIB																																																																		
10	81	✓	Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$\$ n-O	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
11	81	✓	Isopropyl Myristate \$\$ Tetradecanoic acid, 1-	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
12	81	✓	ISOCHLAPIN B 1,2:4: \$\$	350	C ₁₉ H ₂₆ O ₆	WILEY229.LI																																																																		
13	81	✓	ISOCHLAPIN B \$\$	346	C ₁₉ H ₂₂ O ₆	WILEY229.LI																																																																		
14	80	✓	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$	282	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
15	80	✓	Isopropyl Palmitate	298	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	NIST21.LIB																																																																		
16	80	✓	Docosanoic acid	340	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	NIST21.LIB																																																																		
17	80	✓	9,9-Dimethylbicyclo[3.3.1]nona-2,4-dione \$\$	212	C ₁₁ H ₁₆ O ₄	NIST107.LIB																																																																		

65	 <p>hexadecan-1-ol – 93%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>93</td> <td>C</td> <td>Hexadecanol (n>)-1-Hexadecanol</td> <td>256</td> <td>C₁₆H₃₄O</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>93</td> <td></td> <td>1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 Hepta</td> <td>256</td> <td>C₁₇H₃₆O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>93</td> <td></td> <td>Pentadecanol (n>)-5 Pentadecanol</td> <td>228</td> <td>C₁₅H₃₂O</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>93</td> <td></td> <td>Tetradecanol (n>)-5 Tetradecanol</td> <td>214</td> <td>C₁₄H₃₀O</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>93</td> <td></td> <td>1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 n-1-Pe</td> <td>228</td> <td>C₁₅H₃₂O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>92</td> <td></td> <td>1-Tetradecanol (CAS) #Mol 14 S5 Tetradecano</td> <td>214</td> <td>C₁₄H₃₀O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>92</td> <td></td> <td>1-Tetradecanol S5 n-Tetradecan-1-ol S5 n-Tet</td> <td>214</td> <td>C₁₄H₃₀O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>92</td> <td></td> <td>Tridecanol (n>)-5 1-Tridecanol</td> <td>200</td> <td>C₁₃H₂₈O</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>92</td> <td></td> <td>1-Pentadecene</td> <td>210</td> <td>C₁₅H₃₀</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> </tbody> </table> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	93	C	Hexadecanol (n>)-1-Hexadecanol	256	C ₁₆ H ₃₄ O	FFNSCI 3.1b	2	93		1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 Hepta	256	C ₁₇ H ₃₆ O	NIST107.LIB	3	93		Pentadecanol (n>)-5 Pentadecanol	228	C ₁₅ H ₃₂ O	FFNSCI 3.1b	4	93		Tetradecanol (n>)-5 Tetradecanol	214	C ₁₄ H ₃₀ O	FFNSCI 3.1b	5	93		1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 n-1-Pe	228	C ₁₅ H ₃₂ O	NIST107.LIB	6	92		1-Tetradecanol (CAS) #Mol 14 S5 Tetradecano	214	C ₁₄ H ₃₀ O	WILEY229.LI	7	92		1-Tetradecanol S5 n-Tetradecan-1-ol S5 n-Tet	214	C ₁₄ H ₃₀ O	NIST107.LIB	8	92		Tridecanol (n>)-5 1-Tridecanol	200	C ₁₃ H ₂₈ O	FFNSCI 3.1b	9	92		1-Pentadecene	210	C ₁₅ H ₃₀	NIST21.LIB
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	93	C	Hexadecanol (n>)-1-Hexadecanol	256	C ₁₆ H ₃₄ O	FFNSCI 3.1b																																																																		
2	93		1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 Hepta	256	C ₁₇ H ₃₆ O	NIST107.LIB																																																																		
3	93		Pentadecanol (n>)-5 Pentadecanol	228	C ₁₅ H ₃₂ O	FFNSCI 3.1b																																																																		
4	93		Tetradecanol (n>)-5 Tetradecanol	214	C ₁₄ H ₃₀ O	FFNSCI 3.1b																																																																		
5	93		1-Hexadecanol S5 n-Heptadecanol S5 n-1-Pe	228	C ₁₅ H ₃₂ O	NIST107.LIB																																																																		
6	92		1-Tetradecanol (CAS) #Mol 14 S5 Tetradecano	214	C ₁₄ H ₃₀ O	WILEY229.LI																																																																		
7	92		1-Tetradecanol S5 n-Tetradecan-1-ol S5 n-Tet	214	C ₁₄ H ₃₀ O	NIST107.LIB																																																																		
8	92		Tridecanol (n>)-5 1-Tridecanol	200	C ₁₃ H ₂₈ O	FFNSCI 3.1b																																																																		
9	92		1-Pentadecene	210	C ₁₅ H ₃₀	NIST21.LIB																																																																		
66	 <p>pentadecanoato de etila – 95%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>95</td> <td>C</td> <td>Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent</td> <td>270</td> <td>C₁₇H₃₄O₂</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>95</td> <td></td> <td>ethyl pentadecanoate S5</td> <td>270</td> <td>C₁₇H₃₄O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>94</td> <td></td> <td>Hexadecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td> <td>284</td> <td>C₁₈H₃₆O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>94</td> <td></td> <td>Tetradecanoic acid ethyl ester S5 Tetradecanoic ac</td> <td>256</td> <td>C₁₆H₃₂O₂</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>93</td> <td></td> <td>Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent</td> <td>270</td> <td>C₁₇H₃₄O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>93</td> <td></td> <td>ETHYL HEPTADECANOATE S5</td> <td>298</td> <td>C₁₉H₃₈O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>92</td> <td></td> <td>Tetradecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl my</td> <td>256</td> <td>C₁₆H₃₂O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>92</td> <td></td> <td>Palmitate (ethyl)- S5 Hexadecanoic acid, eth</td> <td>284</td> <td>C₁₈H₃₆O₂</td> <td>FFNSCI 3.1b</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>92</td> <td></td> <td>ETHYL TRIDECANOATE S5</td> <td>242</td> <td>C₁₅H₃₀O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> </tbody> </table> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	95	C	Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST107.LIB	2	95		ethyl pentadecanoate S5	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	WILEY229.LI	3	94		Hexadecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	WILEY229.LI	4	94		Tetradecanoic acid ethyl ester S5 Tetradecanoic ac	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	FFNSCI 3.1b	5	93		Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST08.LIB	6	93		ETHYL HEPTADECANOATE S5	298	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	WILEY229.LI	7	92		Tetradecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	WILEY229.LI	8	92		Palmitate (ethyl)- S5 Hexadecanoic acid, eth	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	FFNSCI 3.1b	9	92		ETHYL TRIDECANOATE S5	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	95	C	Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
2	95		ethyl pentadecanoate S5	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
3	94		Hexadecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
4	94		Tetradecanoic acid ethyl ester S5 Tetradecanoic ac	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	FFNSCI 3.1b																																																																		
5	93		Pentadecanoic acid ethyl ester S5 Ethyl/pent	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
6	93		ETHYL HEPTADECANOATE S5	298	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
7	92		Tetradecanoic acid ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
8	92		Palmitate (ethyl)- S5 Hexadecanoic acid, eth	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	FFNSCI 3.1b																																																																		
9	92		ETHYL TRIDECANOATE S5	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
67	 <p>nonadecano – 93%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>92</td> <td>C</td> <td>Nonadecane S5 n-Nonadecane S5</td> <td>258</td> <td>C₁₉H₄₀</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>92</td> <td></td> <td>Octadecane (CAS) n-Octadecane S5</td> <td>254</td> <td>C₁₈H₃₈</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>92</td> <td></td> <td>Octadecane S5 n-Octadecane S5 Octadecan</td> <td>254</td> <td>C₁₈H₃₈</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>92</td> <td></td> <td>Heptadecane S5 n-Heptadecane S5 Normal h</td> <td>240</td> <td>C₁₇H₃₆</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>92</td> <td></td> <td>Tetradecane S5 n-Tetradecane S5</td> <td>478</td> <td>C₂₄H₅₀</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>92</td> <td></td> <td>Docosane S5 n-Docosane S5 Normal docosa</td> <td>310</td> <td>C₂₂H₄₆</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>92</td> <td></td> <td>Docosane (CAS) n-Docosane S5 C22H46 ST</td> <td>310</td> <td>C₂₂H₄₆</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>92</td> <td></td> <td>Hexadecane</td> <td>226</td> <td>C₁₆H₃₄</td> <td>NIST21.LIB</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>92</td> <td></td> <td>Octacosane S5 n-Octacosane S5</td> <td>394</td> <td>C₂₈H₅₈</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> </tbody> </table> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92	C	Nonadecane S5 n-Nonadecane S5	258	C ₁₉ H ₄₀	NIST107.LIB	2	92		Octadecane (CAS) n-Octadecane S5	254	C ₁₈ H ₃₈	WILEY229.LI	3	92		Octadecane S5 n-Octadecane S5 Octadecan	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST107.LIB	4	92		Heptadecane S5 n-Heptadecane S5 Normal h	240	C ₁₇ H ₃₆	NIST107.LIB	5	92		Tetradecane S5 n-Tetradecane S5	478	C ₂₄ H ₅₀	NIST107.LIB	6	92		Docosane S5 n-Docosane S5 Normal docosa	310	C ₂₂ H ₄₆	NIST107.LIB	7	92		Docosane (CAS) n-Docosane S5 C22H46 ST	310	C ₂₂ H ₄₆	WILEY229.LI	8	92		Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	NIST21.LIB	9	92		Octacosane S5 n-Octacosane S5	394	C ₂₈ H ₅₈	NIST107.LIB
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92	C	Nonadecane S5 n-Nonadecane S5	258	C ₁₉ H ₄₀	NIST107.LIB																																																																		
2	92		Octadecane (CAS) n-Octadecane S5	254	C ₁₈ H ₃₈	WILEY229.LI																																																																		
3	92		Octadecane S5 n-Octadecane S5 Octadecan	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST107.LIB																																																																		
4	92		Heptadecane S5 n-Heptadecane S5 Normal h	240	C ₁₇ H ₃₆	NIST107.LIB																																																																		
5	92		Tetradecane S5 n-Tetradecane S5	478	C ₂₄ H ₅₀	NIST107.LIB																																																																		
6	92		Docosane S5 n-Docosane S5 Normal docosa	310	C ₂₂ H ₄₆	NIST107.LIB																																																																		
7	92		Docosane (CAS) n-Docosane S5 C22H46 ST	310	C ₂₂ H ₄₆	WILEY229.LI																																																																		
8	92		Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	NIST21.LIB																																																																		
9	92		Octacosane S5 n-Octacosane S5	394	C ₂₈ H ₅₈	NIST107.LIB																																																																		
68	 <p>heptadecan-2-ona – 84%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>84</td> <td>C</td> <td>2-Heptadecanone (CAS)</td> <td>254</td> <td>C₁₇H₃₄O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>84</td> <td></td> <td>2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton</td> <td>282</td> <td>C₁₉H₃₈O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>84</td> <td></td> <td>2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton</td> <td>282</td> <td>C₁₉H₃₈O</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>83</td> <td></td> <td>2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non</td> <td>158</td> <td>C₉H₁₈O₂</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>83</td> <td></td> <td>2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non</td> <td>158</td> <td>C₉H₁₈O₂</td> <td>NIST107.LIB</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>83</td> <td></td> <td>2-Nonanone, 3-hydroxy- (CAS) 3-Hydroxy-2-no</td> <td>158</td> <td>C₉H₁₈O₂</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>83</td> <td></td> <td>2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- (CAS) 6,1</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>WILEY229.LI</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>83</td> <td></td> <td>2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- S5 Hexa</td> <td>268</td> <td>C₁₈H₃₆O</td> <td>NIST08.LIB</td> </tr> </tbody> </table> 	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	84	C	2-Heptadecanone (CAS)	254	C ₁₇ H ₃₄ O	NIST107.LIB	2	84		2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton	282	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST08.LIB	3	84		2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton	282	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST107.LIB	4	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	NIST08.LIB	5	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	NIST107.LIB	6	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- (CAS) 3-Hydroxy-2-no	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI	7	83		2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- (CAS) 6,1	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI	8	83		2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- S5 Hexa	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST08.LIB							
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	84	C	2-Heptadecanone (CAS)	254	C ₁₇ H ₃₄ O	NIST107.LIB																																																																		
2	84		2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton	282	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST08.LIB																																																																		
3	84		2-Nonadecanone S5 Methyl heptadecyl keton	282	C ₁₉ H ₃₈ O	NIST107.LIB																																																																		
4	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
5	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- S5 3-Hydroxy-2-non	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
6	83		2-Nonanone, 3-hydroxy- (CAS) 3-Hydroxy-2-no	158	C ₉ H ₁₈ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
7	83		2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- (CAS) 6,1	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229.LI																																																																		
8	83		2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- S5 Hexa	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST08.LIB																																																																		

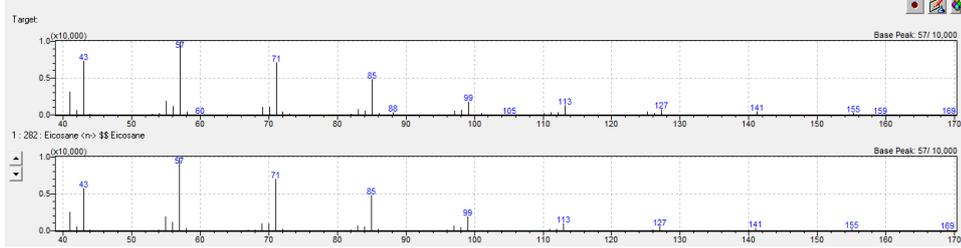
69	 <p>metil <i>n</i>-hexadecanoato – 91%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>✓</td><td>Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl</td><td>340</td><td>C22H44O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td></td><td>Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>4</td><td>90</td><td></td><td>Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>NIST117.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>90</td><td></td><td>Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>NIST117.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td></td><td>Pentadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>89</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl</td><td>270</td><td>C17H34O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 74/10,000</p> <p>1: 270: Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl palmitate \$\$ Methyl hexadecanoate \$\$ Methyl n-hexadecanoate \$\$ Uniphyl A60 \$\$ Metholene 2216 \$\$ Palmitic acid, methyl ester \$\$ Palmitic acid, methyl ester \$\$ n-Hexadecanoic acid methyl ester \$\$ PAL</p>	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	✓	Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	270	C17H34O2	WILEY229.LI	2	90		Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	340	C22H44O2	WILEY229.LI	3	90		Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth	284	C18H36O2	WILEY229.LI	4	90		Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth	270	C17H34O2	NIST117.LIB	5	90		Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester	270	C17H34O2	NIST08.LIB	6	90		Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	284	C18H36O2	NIST117.LIB	7	90		Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	284	C18H36O2	NIST08.LIB	8	90		Pentadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	256	C16H32O2	WILEY229.LI	9	89		Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	270	C17H34O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	✓	Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	270	C17H34O2	WILEY229.LI																																																																		
2	90		Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	340	C22H44O2	WILEY229.LI																																																																		
3	90		Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
4	90		Heptadecanoic acid, methyl ester (CAS) Meth	270	C17H34O2	NIST117.LIB																																																																		
5	90		Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester	270	C17H34O2	NIST08.LIB																																																																		
6	90		Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	284	C18H36O2	NIST117.LIB																																																																		
7	90		Hexadecanoic acid, 15-methyl-, methyl ester	284	C18H36O2	NIST08.LIB																																																																		
8	90		Pentadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
9	89		Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS) Methyl	270	C17H34O2	WILEY229.LI																																																																		
70	 <p>ácido hexadecanóico – 94%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>91</td><td>✓</td><td>Hexadecanoic acid (CAS) Hexadecanoic acid</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>FFS03911</td></tr> <tr><td>2</td><td>91</td><td></td><td>Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$\$ Pal</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>91</td><td></td><td>n-Hexadecanoic acid</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td></td><td>Pentadecanoic acid \$\$ Pentadecylic acid \$\$</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td></td><td>Pentadecanoic acid</td><td>242</td><td>C15H30O2</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td></td><td>9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$</td><td>282</td><td>C18H34O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>90</td><td></td><td>PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID \$</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td></td><td>Tetradecanoic acid \$\$ Myristic acid \$\$ n-Tetr</td><td>228</td><td>C14H28O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td></td><td>Eicosanoic acid \$\$ Arachic acid \$\$ Arachidic</td><td>312</td><td>C20H40O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 43/10,000</p> <p>1: 256: Hexadecanoic acid (n-) \$\$ Hexadecanoic acid</p>	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	91	✓	Hexadecanoic acid (CAS) Hexadecanoic acid	256	C16H32O2	FFS03911	2	91		Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI	3	91		n-Hexadecanoic acid	256	C16H32O2	NIST21.LIB	4	91		Pentadecanoic acid \$\$ Pentadecylic acid \$\$	242	C15H30O2	NIST08.LIB	5	91		Pentadecanoic acid	242	C15H30O2	NIST21.LIB	6	91		9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$	282	C18H34O2	WILEY229.LI	7	90		PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID \$	256	C16H32O2	WILEY229.LI	8	90		Tetradecanoic acid \$\$ Myristic acid \$\$ n-Tetr	228	C14H28O2	NIST107.LIB	9	90		Eicosanoic acid \$\$ Arachic acid \$\$ Arachidic	312	C20H40O2	NIST107.LIB
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	91	✓	Hexadecanoic acid (CAS) Hexadecanoic acid	256	C16H32O2	FFS03911																																																																		
2	91		Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid \$\$ Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
3	91		n-Hexadecanoic acid	256	C16H32O2	NIST21.LIB																																																																		
4	91		Pentadecanoic acid \$\$ Pentadecylic acid \$\$	242	C15H30O2	NIST08.LIB																																																																		
5	91		Pentadecanoic acid	242	C15H30O2	NIST21.LIB																																																																		
6	91		9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$	282	C18H34O2	WILEY229.LI																																																																		
7	90		PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID \$	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
8	90		Tetradecanoic acid \$\$ Myristic acid \$\$ n-Tetr	228	C14H28O2	NIST107.LIB																																																																		
9	90		Eicosanoic acid \$\$ Arachic acid \$\$ Arachidic	312	C20H40O2	NIST107.LIB																																																																		
71	 <p>heptadecan-1-ol - 83%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>18</td><td>83</td><td>✓</td><td>1-Heptadecanol</td><td>256</td><td>C17H36O</td><td>NIST117.LIB</td></tr> <tr><td>19</td><td>83</td><td></td><td>1-Heptadecanol (CAS) n-Heptadecanol \$\$ He</td><td>256</td><td>C17H36O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>20</td><td>83</td><td></td><td>Tetradecanoic acid, tetradecyl ester \$\$ Tetra</td><td>358</td><td>C16H28O3</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>21</td><td>83</td><td></td><td>3-Octadecene (E)- \$\$</td><td>252</td><td>C18H36</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>22</td><td>83</td><td></td><td>Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$</td><td>238</td><td>C17H34</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>23</td><td>83</td><td></td><td>1-Docosene</td><td>308</td><td>C22H44</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>24</td><td>83</td><td></td><td>1-Hexadecanol</td><td>242</td><td>C16H34O</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>25</td><td>83</td><td></td><td>CYCLODECOSANE \$\$</td><td>288</td><td>C20H40</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 57/10,000</p> <p>18: 256: 1-Heptadecanol</p>	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	18	83	✓	1-Heptadecanol	256	C17H36O	NIST117.LIB	19	83		1-Heptadecanol (CAS) n-Heptadecanol \$\$ He	256	C17H36O	WILEY229.LI	20	83		Tetradecanoic acid, tetradecyl ester \$\$ Tetra	358	C16H28O3	NIST08.LIB	21	83		3-Octadecene (E)- \$\$	252	C18H36	NIST107.LIB	22	83		Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$	238	C17H34	NIST107.LIB	23	83		1-Docosene	308	C22H44	NIST21.LIB	24	83		1-Hexadecanol	242	C16H34O	NIST21.LIB	25	83		CYCLODECOSANE \$\$	288	C20H40	WILEY229.LI							
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
18	83	✓	1-Heptadecanol	256	C17H36O	NIST117.LIB																																																																		
19	83		1-Heptadecanol (CAS) n-Heptadecanol \$\$ He	256	C17H36O	WILEY229.LI																																																																		
20	83		Tetradecanoic acid, tetradecyl ester \$\$ Tetra	358	C16H28O3	NIST08.LIB																																																																		
21	83		3-Octadecene (E)- \$\$	252	C18H36	NIST107.LIB																																																																		
22	83		Undecane, 5-cyclohexyl- \$\$	238	C17H34	NIST107.LIB																																																																		
23	83		1-Docosene	308	C22H44	NIST21.LIB																																																																		
24	83		1-Hexadecanol	242	C16H34O	NIST21.LIB																																																																		
25	83		CYCLODECOSANE \$\$	288	C20H40	WILEY229.LI																																																																		
72	 <p>hexadecanoato de etila – 94%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Flags</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>92</td><td>✓</td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester</td><td>256</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>92</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste</td><td>312</td><td>C20H40O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>3</td><td>90</td><td></td><td>Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$</td><td>326</td><td>C21H42O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>90</td><td></td><td>Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal</td><td>284</td><td>C18H36O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>6</td><td>89</td><td></td><td>Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my</td><td>256</td><td>C16H32O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>7</td><td>89</td><td></td><td>Docosanoic acid, ethyl ester \$\$ Ethyl docosan</td><td>368</td><td>C24H48O2</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>89</td><td></td><td>Docosanoic acid, ethyl ester \$\$</td><td>368</td><td>C24H48O2</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>9</td><td>89</td><td></td><td>ETHYL ESTER OF DOCOSANOIC ACID \$\$ E</td><td>368</td><td>C24H48O2</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: Base Peak: 86/10,000</p> <p>1: 284: Hexadecanoic acid, ethyl ester</p>	Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92	✓	Hexadecanoic acid, ethyl ester	256	C18H36O2	WILEY229.LI	2	92		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste	312	C20H40O2	WILEY229.LI	3	90		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$	326	C21H42O2	NIST107.LIB	4	90		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	5	90		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI	6	89		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI	7	89		Docosanoic acid, ethyl ester \$\$ Ethyl docosan	368	C24H48O2	NIST08.LIB	8	89		Docosanoic acid, ethyl ester \$\$	368	C24H48O2	NIST107.LIB	9	89		ETHYL ESTER OF DOCOSANOIC ACID \$\$ E	368	C24H48O2	WILEY229.LI
Hit	Similar	Flags	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92	✓	Hexadecanoic acid, ethyl ester	256	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
2	92		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl ste	312	C20H40O2	WILEY229.LI																																																																		
3	90		Nonadecanoic acid, ethyl ester \$\$	326	C21H42O2	NIST107.LIB																																																																		
4	90		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
5	90		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl pal	284	C18H36O2	WILEY229.LI																																																																		
6	89		Tetradecanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl my	256	C16H32O2	WILEY229.LI																																																																		
7	89		Docosanoic acid, ethyl ester \$\$ Ethyl docosan	368	C24H48O2	NIST08.LIB																																																																		
8	89		Docosanoic acid, ethyl ester \$\$	368	C24H48O2	NIST107.LIB																																																																		
9	89		ETHYL ESTER OF DOCOSANOIC ACID \$\$ E	368	C24H48O2	WILEY229.LI																																																																		

73

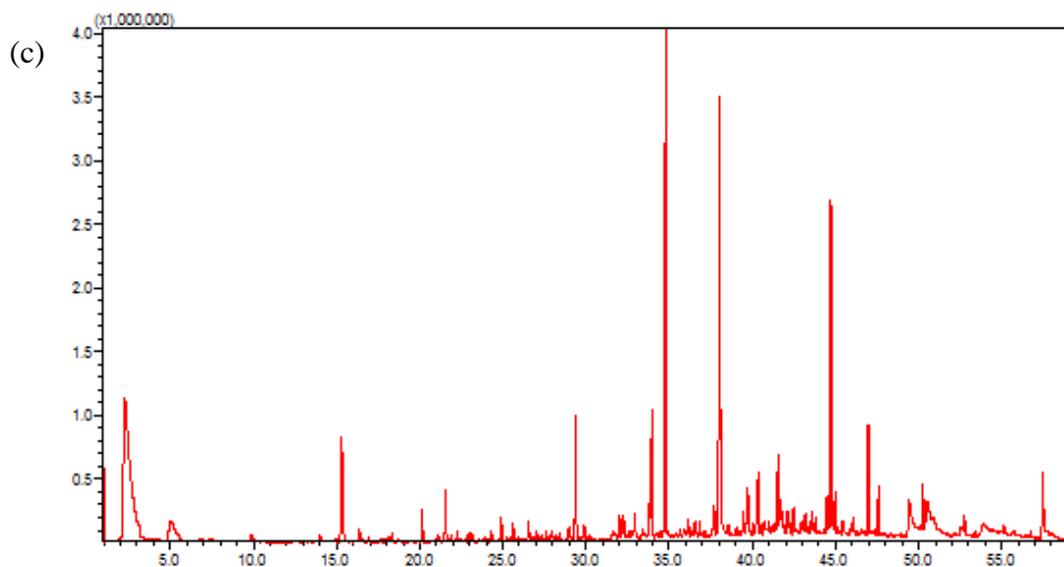
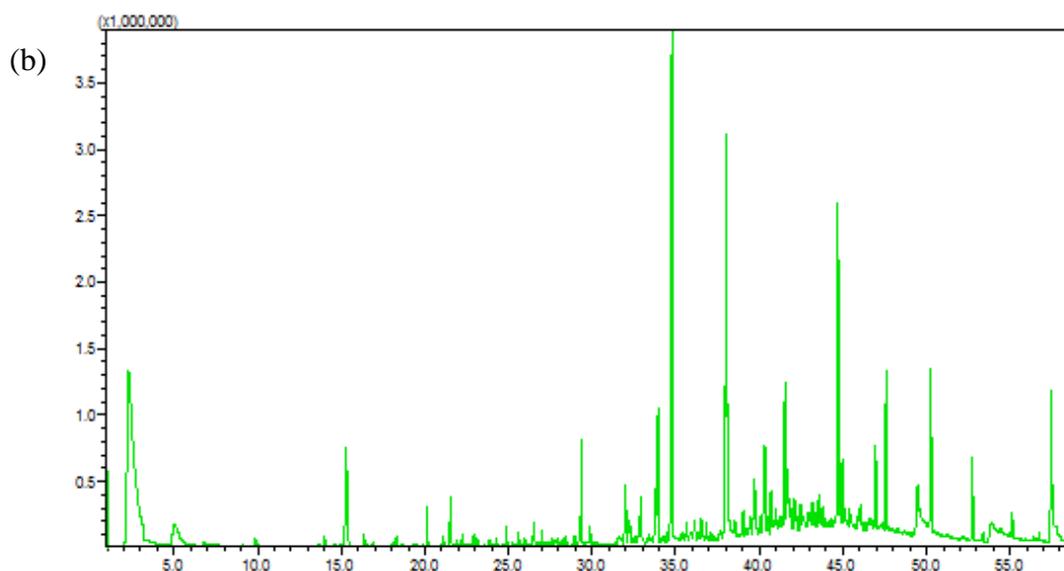
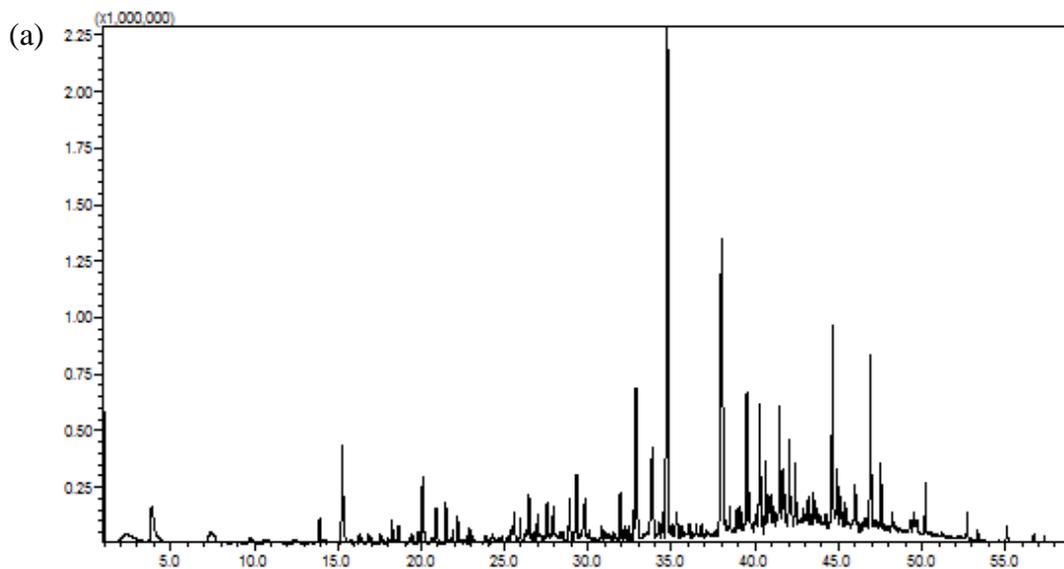


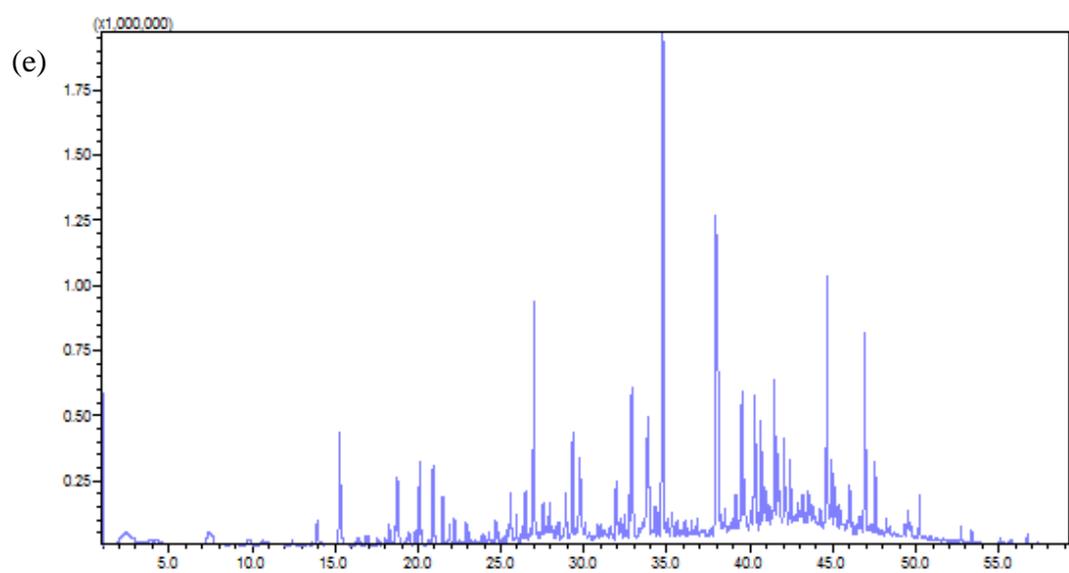
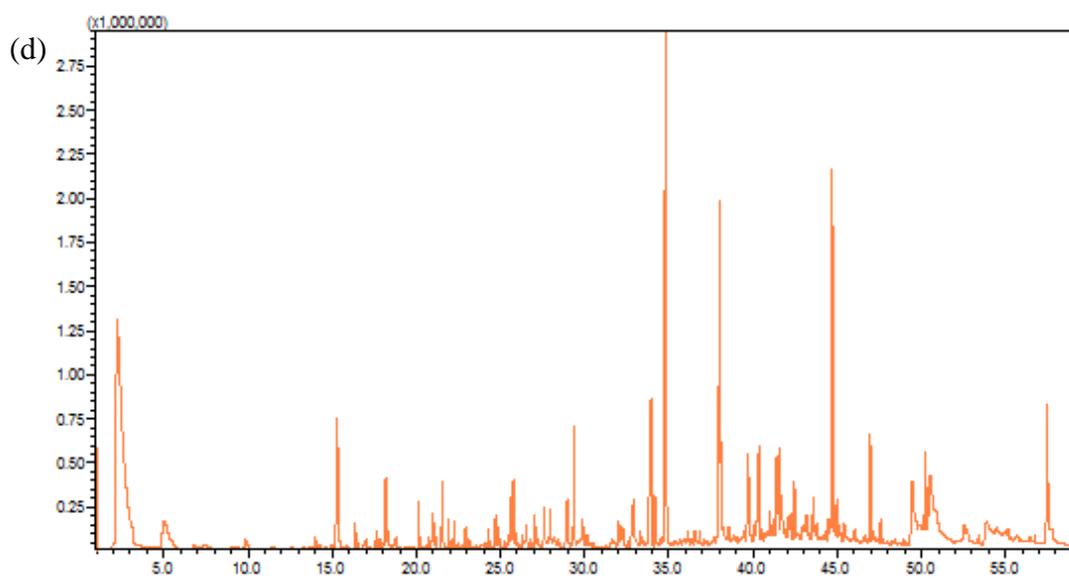
eicosano – 94%

Hit	Similar	Flag	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	94	<input checked="" type="checkbox"/>	Eicosane <n> \$\$ Eicosane	282	C ₂₀ H ₄₂	FFNSC1.3.LB
2	94	<input type="checkbox"/>	Nonadecane <n> \$\$ Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	FFNSC1.3.LB
3	94	<input type="checkbox"/>	Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Normal h	240	C ₁₇ H ₃₆	NIST107.LIB
4	94	<input type="checkbox"/>	Octadecane <n> \$\$ Octadecane	254	C ₁₈ H ₃₈	FFNSC1.3.LB
5	94	<input type="checkbox"/>	Heptadecane <n> \$\$ Heptadecane	240	C ₁₇ H ₃₆	FFNSC1.3.LB
6	94	<input type="checkbox"/>	Henicosane <n> \$\$ Henicosane	296	C ₂₁ H ₄₄	FFNSC1.3.LB
7	94	<input type="checkbox"/>	Hexadecane <n> \$\$ Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	FFNSC1.3.LB
8	94	<input type="checkbox"/>	Nonadecane (CAS) n-Nonadecane \$\$	268	C ₁₉ H ₄₀	WILEY0203.LI
9	94	<input type="checkbox"/>	Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST21.LIB

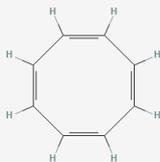
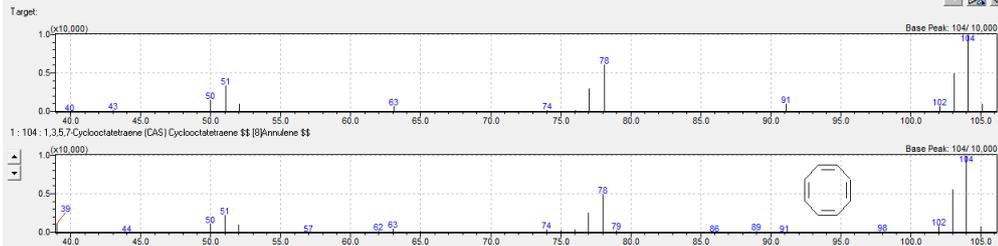
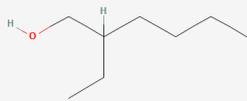
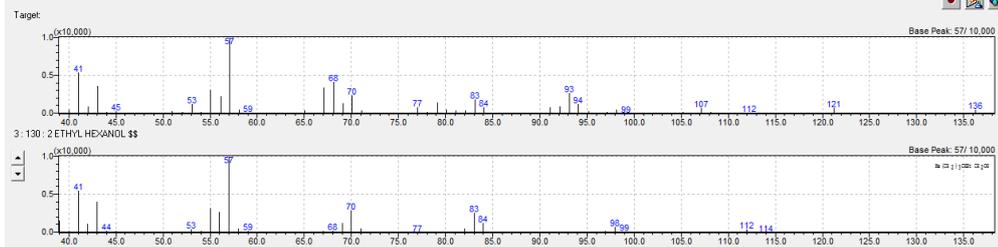
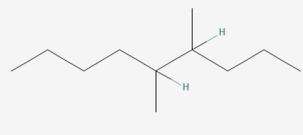
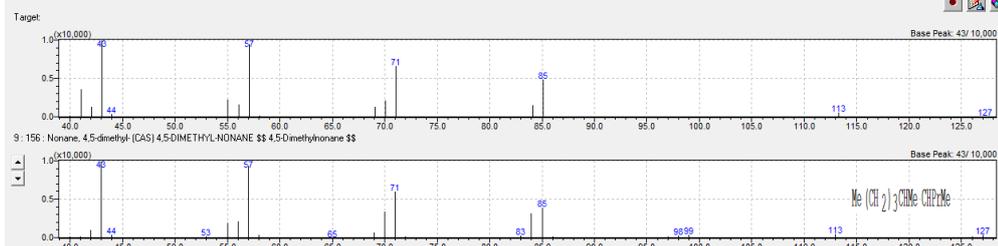


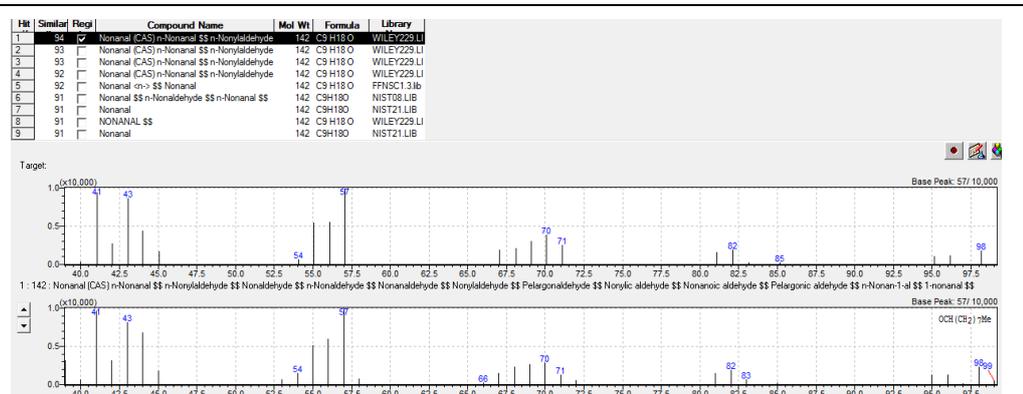
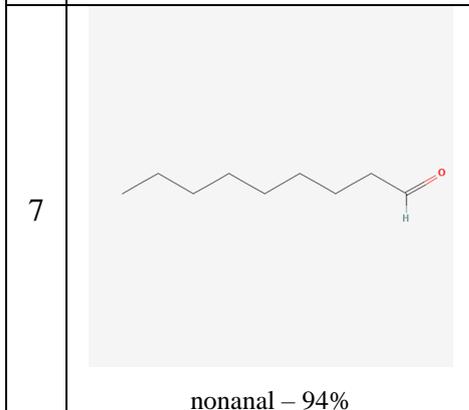
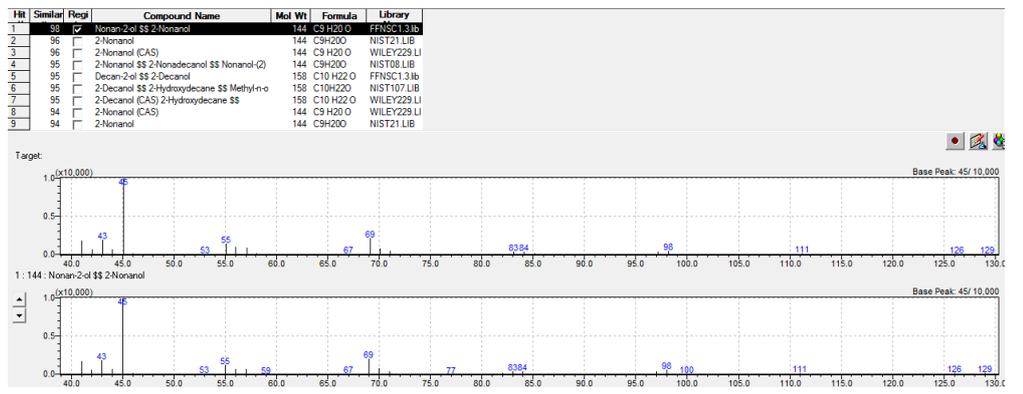
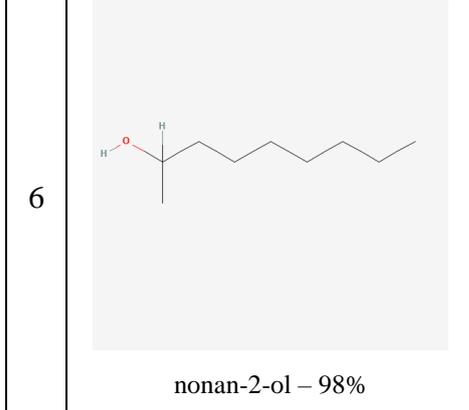
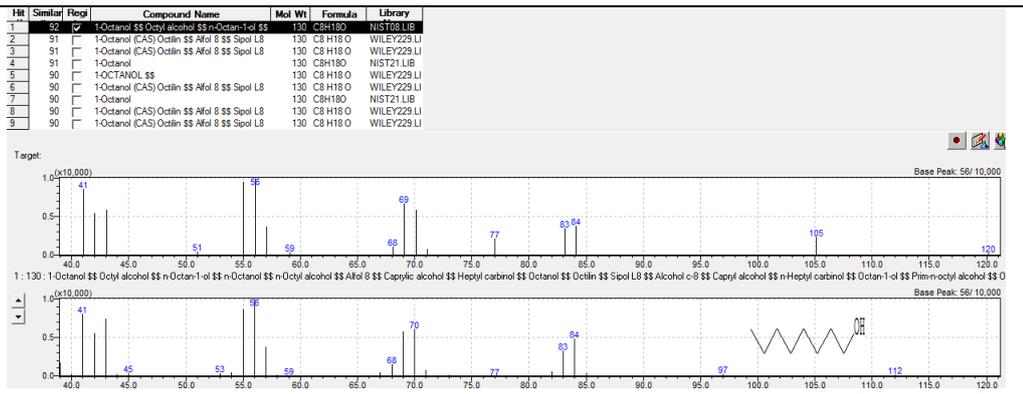
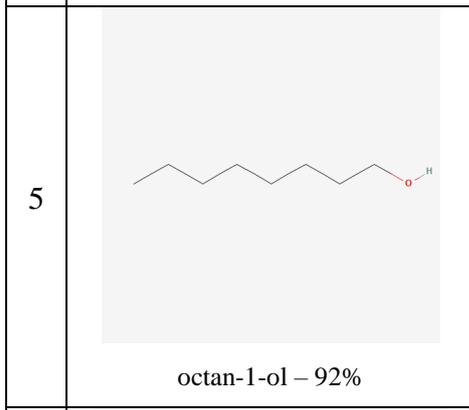
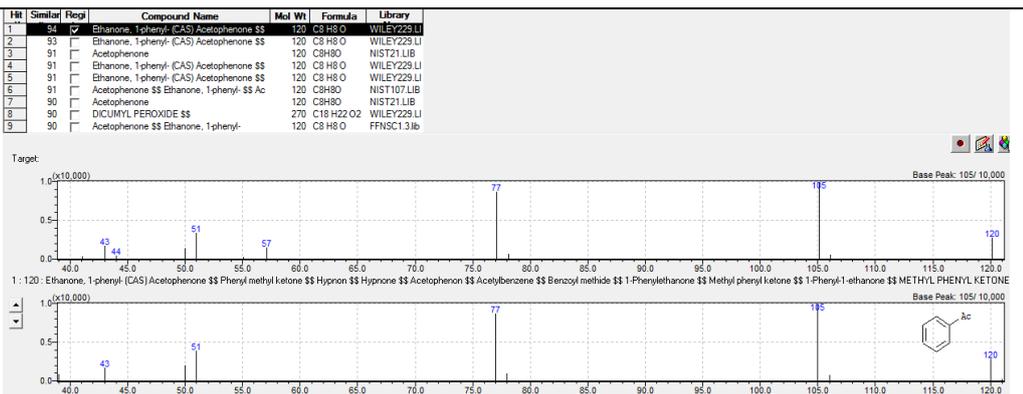
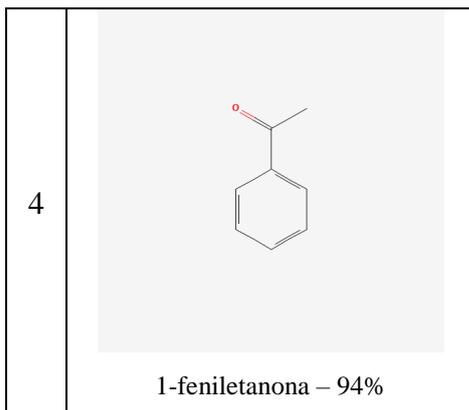
APÊNDICE F – Cromatogramas obtidos a partir da análise dos compostos voláteis extraídos de culturas *in vitro* de *Leishmania* spp. (a) meio de cultura; (b) macrófagos; (c) macrófagos infectados com *L. (L.) amazonensis*; (d) amastigotas-like livres de *L. (L.) amazonensis*; (e) amastigotas de lesão de *L. (L.) amazonensis*.



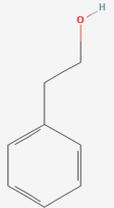


APÊNDICE G - Estruturas moleculares dos compostos voláteis identificados e comparação dos espectros de massas dos compostos presentes nas amostras das culturas de células (superiores) com as bibliotecas utilizadas (inferiores). Porcentagens indicam o grau de similaridade dos compostos.

#	Compostos	Espectros de massas																																																																						
1	 <p>ciclooctatetraeno – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Rega</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1</td><td>92</td><td>✓</td><td>1,3,5,7-Cyclooctatetraene (CAS) Cyclooctatetr</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>2</td><td>52</td><td>✓</td><td>1,3,5,7-Cyclooctatetraene</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>3</td><td>52</td><td>✓</td><td>Styrene</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>4</td><td>91</td><td>✓</td><td>Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>91</td><td>✓</td><td>Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- \$\$ Búlfren K-5</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>6</td><td>91</td><td>✓</td><td>Styrene \$\$ Benzene, ethenyl-</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>7</td><td>90</td><td>✓</td><td>Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5,7-tetraene</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>8</td><td>90</td><td>✓</td><td>Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>90</td><td>✓</td><td>Styrene \$\$ Ethery/benzene \$\$ vinyl/benzene \$</td><td>104</td><td>C₈H₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: 1:104-1,3,5,7-Cyclooctatetraene (CAS) Cyclooctatetraene \$\$ (B)Anilene \$\$</p>	Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	1	92	✓	1,3,5,7-Cyclooctatetraene (CAS) Cyclooctatetr	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI	2	52	✓	1,3,5,7-Cyclooctatetraene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB	3	52	✓	Styrene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB	4	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI	5	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- \$\$ Búlfren K-5	104	C ₈ H ₈	NIST08.LIB	6	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl-	104	C ₈ H ₈	FNNSCI.3.lb	7	90	✓	Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5,7-tetraene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB	8	90	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI	9	90	✓	Styrene \$\$ Ethery/benzene \$\$ vinyl/benzene \$	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI
Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
1	92	✓	1,3,5,7-Cyclooctatetraene (CAS) Cyclooctatetr	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI																																																																		
2	52	✓	1,3,5,7-Cyclooctatetraene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB																																																																		
3	52	✓	Styrene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB																																																																		
4	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI																																																																		
5	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- \$\$ Búlfren K-5	104	C ₈ H ₈	NIST08.LIB																																																																		
6	91	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl-	104	C ₈ H ₈	FNNSCI.3.lb																																																																		
7	90	✓	Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5,7-tetraene	104	C ₈ H ₈	NIST21.LIB																																																																		
8	90	✓	Styrene \$\$ Benzene, ethenyl- (CAS) ETHENY	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI																																																																		
9	90	✓	Styrene \$\$ Ethery/benzene \$\$ vinyl/benzene \$	104	C ₈ H ₈	WILEY229.LI																																																																		
2	 <p>2-etilhexan-1-ol – 83%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Rega</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>4</td><td>83</td><td>✓</td><td>2-Ethylhexanol (CAS) 2-Ethylhexanol</td><td>130</td><td>C₁₀H₂₂O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>5</td><td>82</td><td>✓</td><td>Octanol <2-trans> \$\$ 2-Octen-1-ol (2E)</td><td>128</td><td>C₉H₁₈O</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>6</td><td>82</td><td>✓</td><td>2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, propanoate, (</td><td>210</td><td>C₁₃H₂₂O₂</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>7</td><td>82</td><td>✓</td><td>1-Hexanol, 2-ethyl-, (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ 2-</td><td>130</td><td>C₉H₁₈O</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>8</td><td>82</td><td>✓</td><td>Geranyl propanoate \$\$ 2,6-Octadien-1-ol, 3,7-d</td><td>210</td><td>C₁₃H₂₂O₂</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>9</td><td>82</td><td>✓</td><td>(Z)-3,7-Dimethyl-2-octadien-1-ol, propanoate</td><td>210</td><td>C₁₃H₂₂O₂</td><td>NIST08.LIB</td></tr> <tr><td>10</td><td>82</td><td>✓</td><td>Non-(2E)enol \$\$ 2-Nonen-1-ol, (2E)</td><td>142</td><td>C₉H₁₈O</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>11</td><td>82</td><td>✓</td><td>Hexanol <2-ethyl> \$\$ 1-Hexanol, 2-ethyl-</td><td>130</td><td>C₉H₁₈O</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>12</td><td>82</td><td>✓</td><td>Dec-2-en-1-ol \$\$ 2-Decen-1-ol</td><td>156</td><td>C₁₀H₂₀O</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: 3:130-2-ETHYL HEXANOL \$\$</p>	Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	4	83	✓	2-Ethylhexanol (CAS) 2-Ethylhexanol	130	C ₁₀ H ₂₂ O	WILEY229.LI	5	82	✓	Octanol <2-trans> \$\$ 2-Octen-1-ol (2E)	128	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb	6	82	✓	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, propanoate, (210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	NIST107.LIB	7	82	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-, (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ 2-	130	C ₉ H ₁₈ O	WILEY229.LI	8	82	✓	Geranyl propanoate \$\$ 2,6-Octadien-1-ol, 3,7-d	210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	WILEY229.LI	9	82	✓	(Z)-3,7-Dimethyl-2-octadien-1-ol, propanoate	210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	NIST08.LIB	10	82	✓	Non-(2E)enol \$\$ 2-Nonen-1-ol, (2E)	142	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb	11	82	✓	Hexanol <2-ethyl> \$\$ 1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb	12	82	✓	Dec-2-en-1-ol \$\$ 2-Decen-1-ol	156	C ₁₀ H ₂₀ O	FNNSCI.3.lb
Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
4	83	✓	2-Ethylhexanol (CAS) 2-Ethylhexanol	130	C ₁₀ H ₂₂ O	WILEY229.LI																																																																		
5	82	✓	Octanol <2-trans> \$\$ 2-Octen-1-ol (2E)	128	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb																																																																		
6	82	✓	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, propanoate, (210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	NIST107.LIB																																																																		
7	82	✓	1-Hexanol, 2-ethyl-, (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ 2-	130	C ₉ H ₁₈ O	WILEY229.LI																																																																		
8	82	✓	Geranyl propanoate \$\$ 2,6-Octadien-1-ol, 3,7-d	210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	WILEY229.LI																																																																		
9	82	✓	(Z)-3,7-Dimethyl-2-octadien-1-ol, propanoate	210	C ₁₃ H ₂₂ O ₂	NIST08.LIB																																																																		
10	82	✓	Non-(2E)enol \$\$ 2-Nonen-1-ol, (2E)	142	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb																																																																		
11	82	✓	Hexanol <2-ethyl> \$\$ 1-Hexanol, 2-ethyl-	130	C ₉ H ₁₈ O	FNNSCI.3.lb																																																																		
12	82	✓	Dec-2-en-1-ol \$\$ 2-Decen-1-ol	156	C ₁₀ H ₂₀ O	FNNSCI.3.lb																																																																		
3	 <p>4,5,dimetilnonano – 92%</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Hit</th> <th>Similar</th> <th>Rega</th> <th>Compound Name</th> <th>Mol Wt</th> <th>Formula</th> <th>Library</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>9</td><td>92</td><td>✓</td><td>Nonane, 4,5-dimethyl- (CAS) 4,5-DIMETHYL-</td><td>156</td><td>C₁₁H₂₄</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>10</td><td>92</td><td>✓</td><td>Nonane (CAS) n-Nonane</td><td>126</td><td>C₉H₂₀</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>11</td><td>92</td><td>✓</td><td>Tridecane (CAS) n-Tridecane \$\$</td><td>184</td><td>C₁₃H₂₈</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>12</td><td>91</td><td>✓</td><td>Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 91-0904</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>13</td><td>91</td><td>✓</td><td>Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$\$ Cetane</td><td>226</td><td>C₁₆H₃₄</td><td>WILEY229.LI</td></tr> <tr><td>14</td><td>91</td><td>✓</td><td>Decane (CAS) n-Decane</td><td>142</td><td>C₁₀H₂₂</td><td>FNNSCI.3.lb</td></tr> <tr><td>15</td><td>91</td><td>✓</td><td>Hexadecane</td><td>226</td><td>C₁₆H₃₄</td><td>NIST21.LIB</td></tr> <tr><td>16</td><td>91</td><td>✓</td><td>Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>NIST107.LIB</td></tr> <tr><td>17</td><td>91</td><td>✓</td><td>Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$ 3,4,5,6-Tetram</td><td>170</td><td>C₁₂H₂₆</td><td>NIST08.LIB</td></tr> </tbody> </table>  <p>Target: 9:156-Nonane, 4,5-dimethyl- (CAS) 4,5-DIMETHYL-NONANE \$\$ 4,5-Dimethylnonane \$\$</p>	Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library	9	92	✓	Nonane, 4,5-dimethyl- (CAS) 4,5-DIMETHYL-	156	C ₁₁ H ₂₄	WILEY229.LI	10	92	✓	Nonane (CAS) n-Nonane	126	C ₉ H ₂₀	WILEY229.LI	11	92	✓	Tridecane (CAS) n-Tridecane \$\$	184	C ₁₃ H ₂₈	WILEY229.LI	12	91	✓	Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 91-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI	13	91	✓	Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$\$ Cetane	226	C ₁₆ H ₃₄	WILEY229.LI	14	91	✓	Decane (CAS) n-Decane	142	C ₁₀ H ₂₂	FNNSCI.3.lb	15	91	✓	Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	NIST21.LIB	16	91	✓	Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$	170	C ₁₂ H ₂₆	NIST107.LIB	17	91	✓	Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$ 3,4,5,6-Tetram	170	C ₁₂ H ₂₆	NIST08.LIB
Hit	Similar	Rega	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library																																																																		
9	92	✓	Nonane, 4,5-dimethyl- (CAS) 4,5-DIMETHYL-	156	C ₁₁ H ₂₄	WILEY229.LI																																																																		
10	92	✓	Nonane (CAS) n-Nonane	126	C ₉ H ₂₀	WILEY229.LI																																																																		
11	92	✓	Tridecane (CAS) n-Tridecane \$\$	184	C ₁₃ H ₂₈	WILEY229.LI																																																																		
12	91	✓	Dodecane (CAS) n-Dodecane \$\$ Ba 91-0904	170	C ₁₂ H ₂₆	WILEY229.LI																																																																		
13	91	✓	Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$\$ Cetane	226	C ₁₆ H ₃₄	WILEY229.LI																																																																		
14	91	✓	Decane (CAS) n-Decane	142	C ₁₀ H ₂₂	FNNSCI.3.lb																																																																		
15	91	✓	Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	NIST21.LIB																																																																		
16	91	✓	Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$	170	C ₁₂ H ₂₆	NIST107.LIB																																																																		
17	91	✓	Octane, 3,4,5,6-tetramethyl- \$\$ 3,4,5,6-Tetram	170	C ₁₂ H ₂₆	NIST08.LIB																																																																		

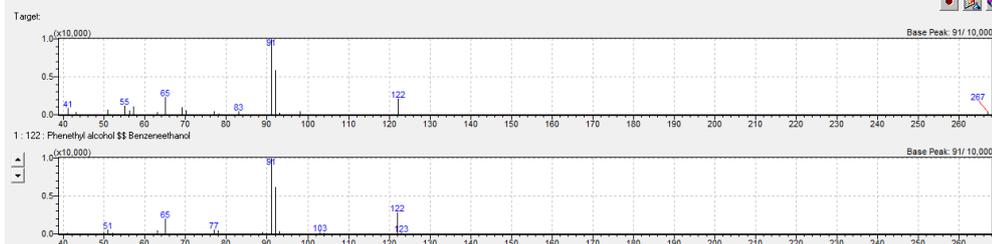


8

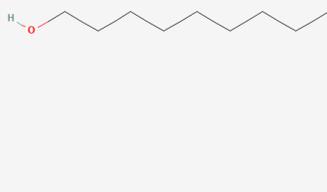


2-feniletanol – 84%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	93	✓	Phenethyl Alcohol \$\$ Benzeneethanol	122	C ₈ H ₁₀ O	WILEY229.LI
2	83	✓	Phenylethyl Alcohol \$\$ Benzeneethanol \$\$ Ph	122	C ₈ H ₁₀ O	NIST107.LIB
3	83	✓	Phenylethyl Alcohol \$\$ Benzeneethanol \$\$ Ph	122	C ₈ H ₁₀ O	NIST107.LIB
4	83	✓	Benzeneethanol (CAS) Phenethyl alcohol \$\$ P	122	C ₈ H ₁₀ O	WILEY229.LI
5	82	✓	PHENYLETHYL ALCOHOL \$\$	122	C ₈ H ₁₀ O	WILEY229.LI
6	82	✓	Phenylethyl Alcohol	122	C ₈ H ₁₀ O	NIST21.LIB
7	82	✓	Phenylethyl Alcohol	122	C ₈ H ₁₀ O	NIST21.LIB
8	82	✓	Benzeneethanol (CAS) Phenethyl alcohol \$\$ P	122	C ₈ H ₁₀ O	WILEY229.LI
9	82	✓	Benzeneethanol (CAS) Phenethyl alcohol \$\$ P	122	C ₈ H ₁₀ O	WILEY229.LI

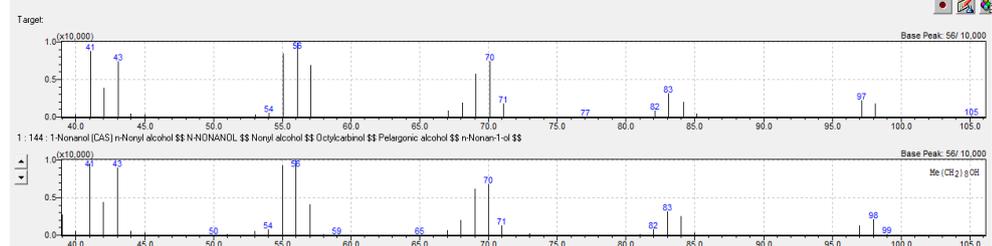


9

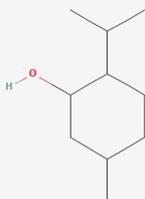


nonan-1-ol – 95%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	95	✓	1-Nonanol (CAS) n-Nonyl alcohol \$\$ N-NONA	144	C ₉ H ₂₀ O	WILEY229.LI
2	95	✓	1-Nonanol (CAS) n-Nonyl alcohol \$\$ N-NONA	144	C ₉ H ₂₀ O	WILEY229.LI
3	95	✓	1-Nonanol \$\$ Nonyl alcohol \$\$ n-Nonyl alcoh	144	C ₉ H ₂₀ O	NIST107.LIB
4	95	✓	1-Nonanol	144	C ₉ H ₂₀ O	NIST21.LIB
5	95	✓	1-Nonanol \$\$ Nonyl alcohol \$\$ n-Nonyl alcoh	144	C ₉ H ₂₀ O	NIST107.LIB
6	95	✓	Nonanol	144	C ₉ H ₂₀ O	NIST21.LIB
7	95	✓	1-Nonanol (CAS) n-Nonyl alcohol \$\$ N-NONA	144	C ₉ H ₂₀ O	WILEY229.LI
8	95	✓	1-Nonanol	144	C ₉ H ₂₀ O	NIST21.LIB
9	95	✓	1-Decene	140	C ₁₀ H ₂₀	NIST21.LIB

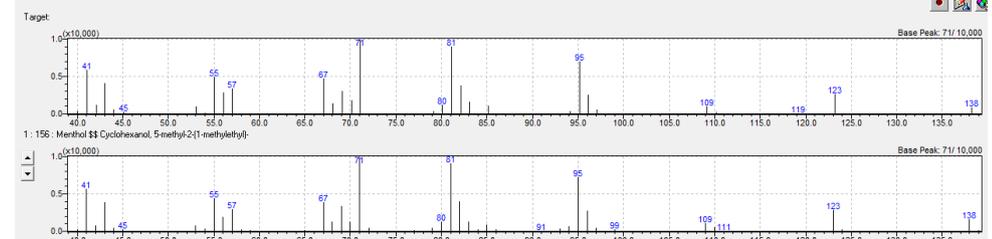


10

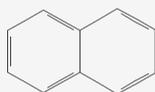


mentol – 95%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	95	✓	Menthol \$\$ Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI
2	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (1-)	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST21.LIB
3	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (CAS	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI
4	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (1S-	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST21.LIB
5	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (CAS	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI
6	94	✓	Menthol \$\$ Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methyl	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB
7	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (1S-	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB
8	94	✓	Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)- (1S-	156	C ₁₀ H ₂₀ O	NIST107.LIB
9	94	✓	(+)-Menthol \$\$ Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-me	156	C ₁₀ H ₂₀ O	WILEY229.LI

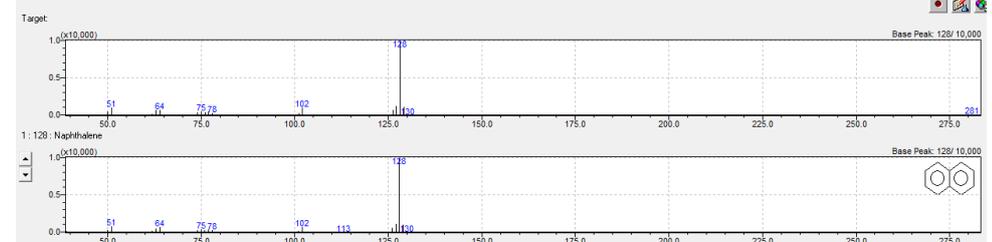


11

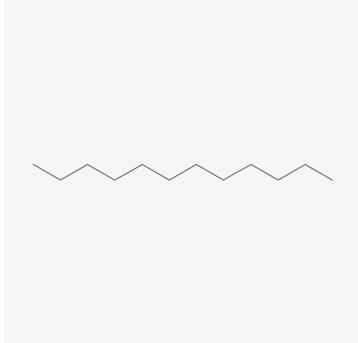


naftaleno – 96%

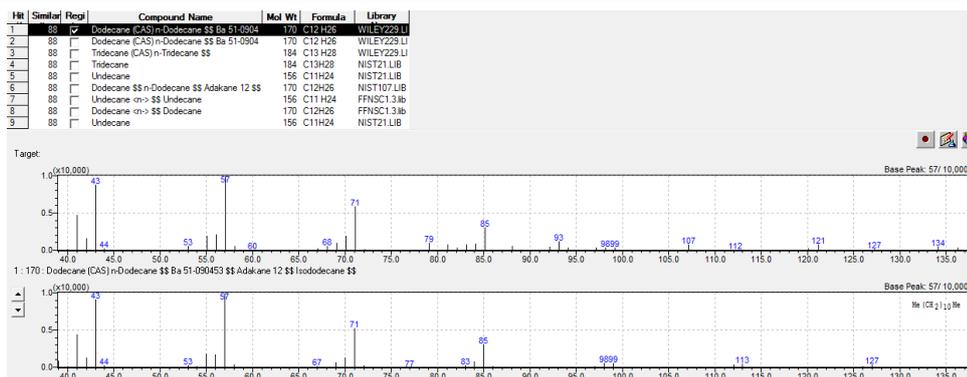
Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	96	✓	Naphthalene	128	C ₁₀ H ₈	NIST21.LIB
2	96	✓	Naphthalene	128	C ₁₀ H ₈	NIST21.LIB
3	96	✓	Azulene	128	C ₁₀ H ₈	NIST21.LIB
4	96	✓	AZULENE \$\$	128	C ₁₀ H ₈	WILEY229.LI
5	96	✓	Naphthalene (CAS) White tar \$\$ NAPHTALIN	128	C ₁₀ H ₈	WILEY229.LI
6	96	✓	Azulene (CAS) Cyclopentacycloheptene \$\$ Bi	128	C ₁₀ H ₈	WILEY229.LI
7	95	✓	Naphthalene	128	C ₁₀ H ₈	NIST21.LIB
8	95	✓	Naphthalene \$\$ Abocarbon \$\$ Deodorator \$	128	C ₁₀ H ₈	NIST107.LIB
9	95	✓	Naphthalene (CAS) White tar \$\$ NAPHTALIN	128	C ₁₀ H ₈	WILEY229.LI



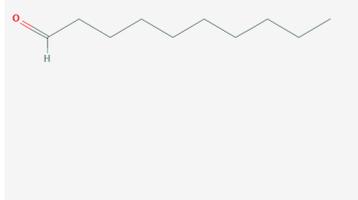
12



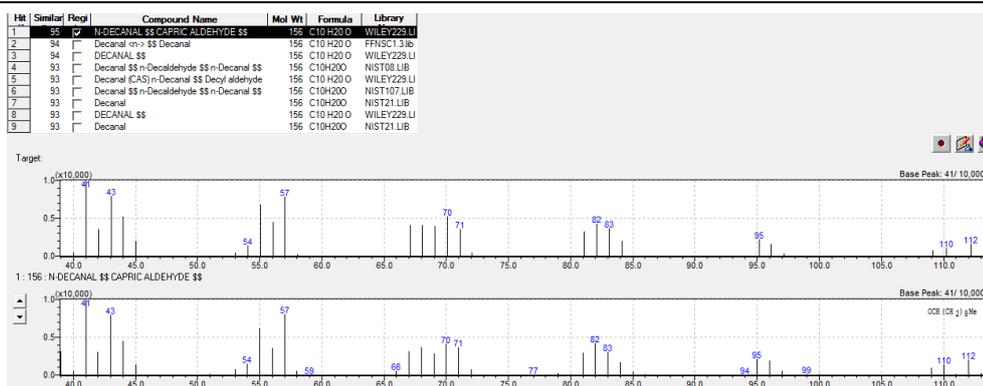
dodecano – 88%



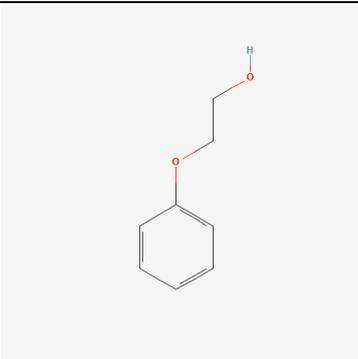
13



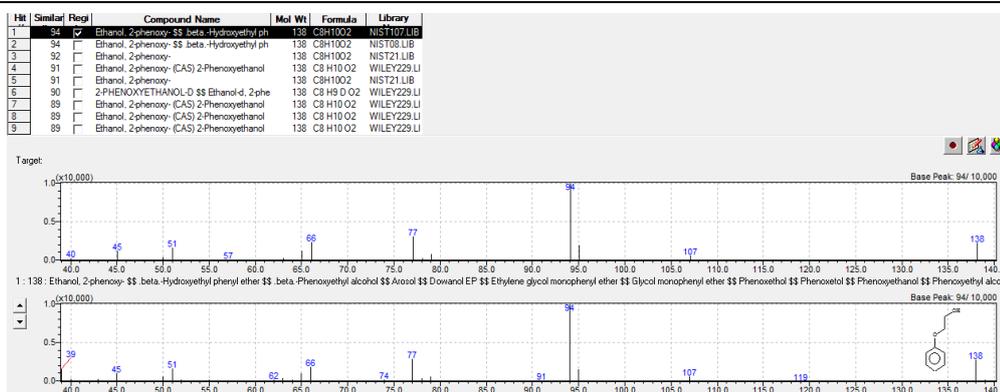
decanal – 95%



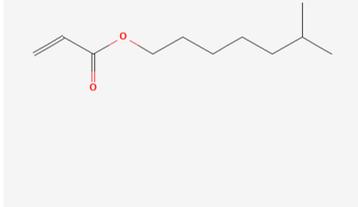
14



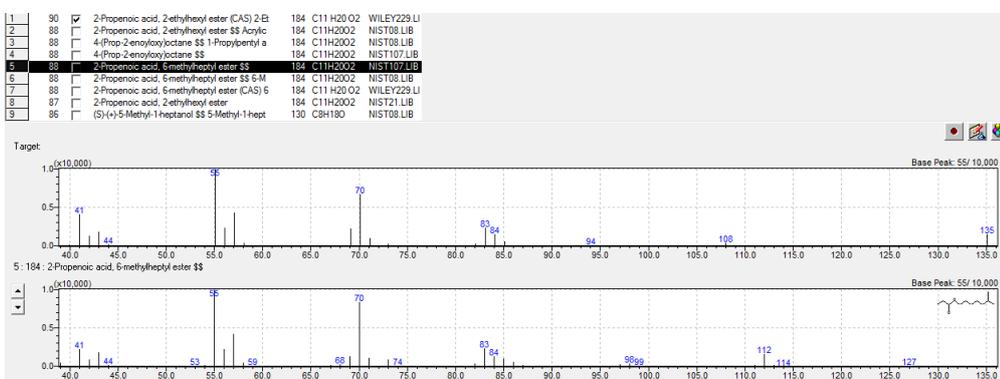
2-fenoxietanol – 94%



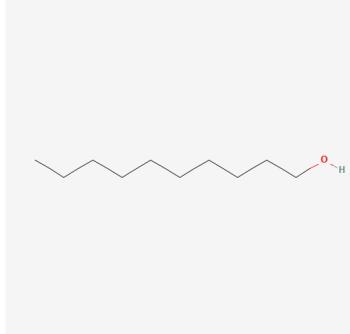
15



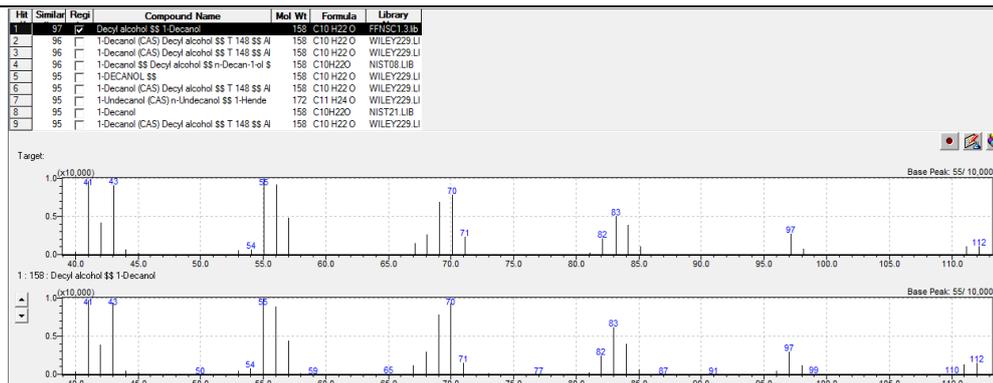
6-metilheptil prop-2-enoato – 88%



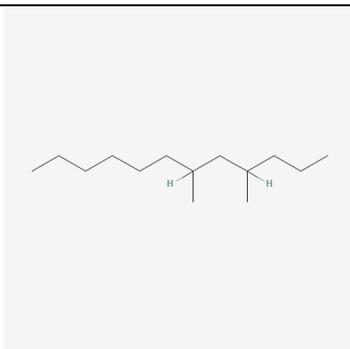
16



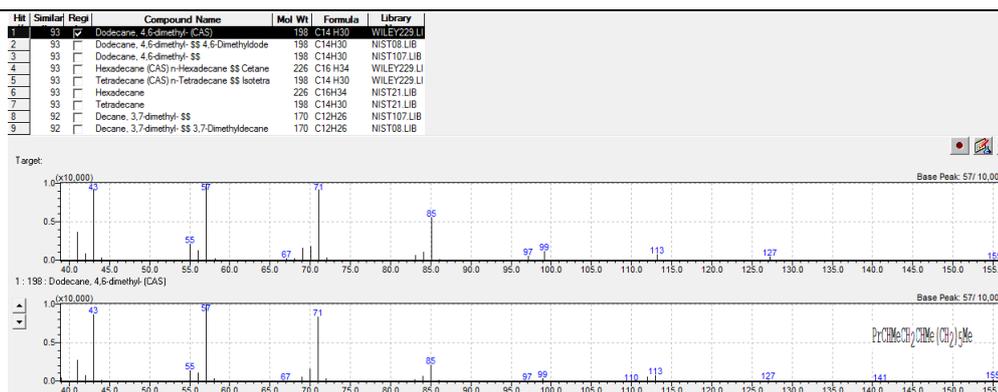
decan-1-ol – 97%



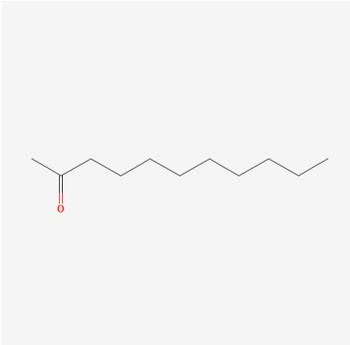
17



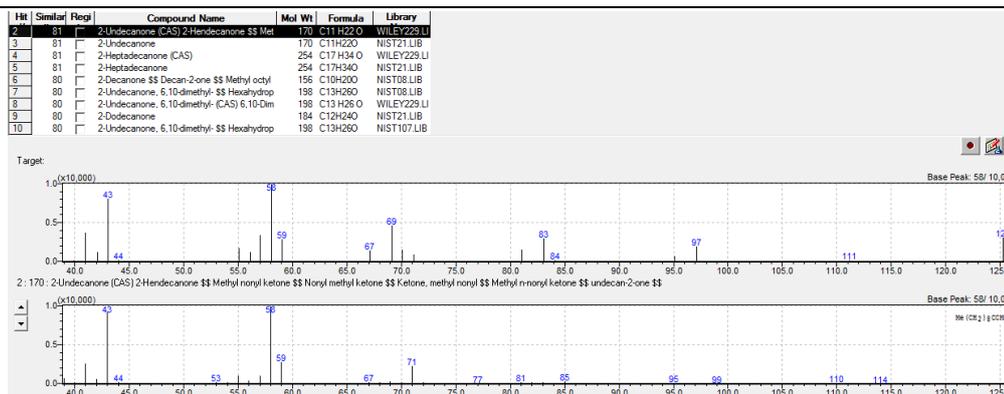
4,6-dimetildodecano – 93%



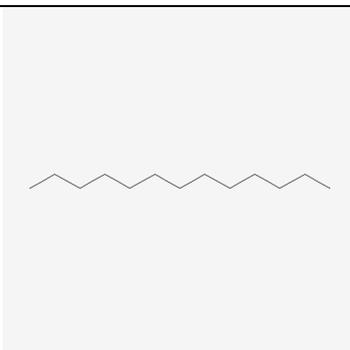
18



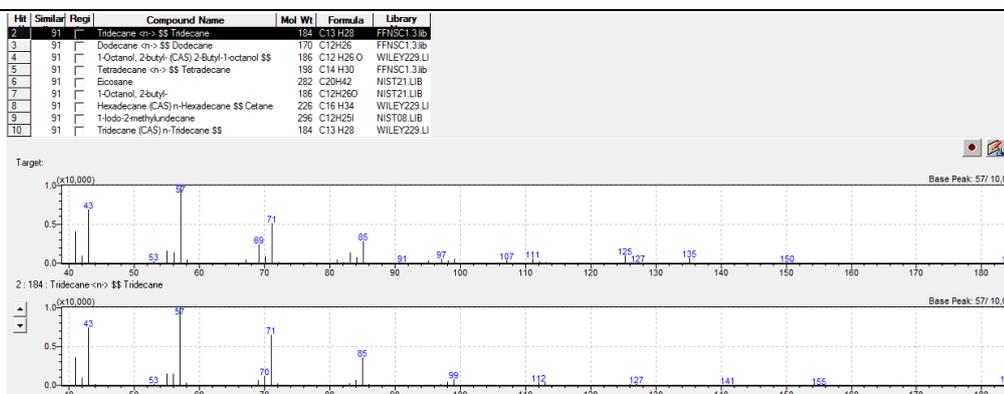
undecan-2-ona – 81%



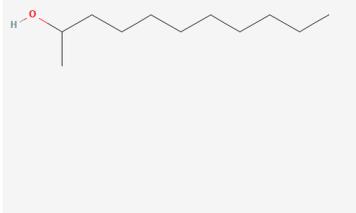
19



tridecano – 91%

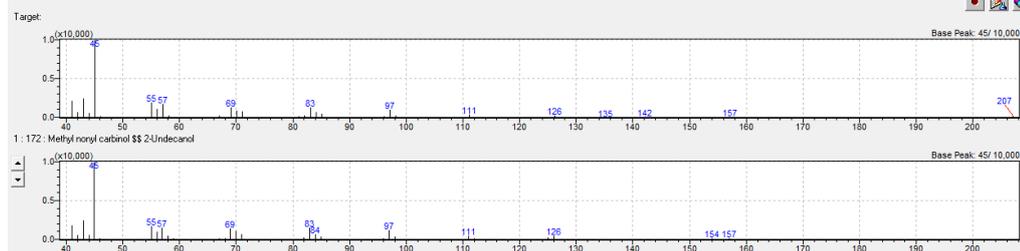


20

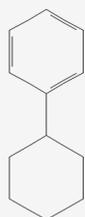


undecan-2-ol – 96%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	96	✓	Methyl nonyl carbinol \$\$ 2-Undecanol	172	C ₁₁ H ₂₄ O	FFNSC1.3lb
2	95	✓	2-Tetradecanol \$\$ 2-Hydroxytridecane \$\$ Methyl	200	C ₁₃ H ₂₈ O	NIST08.LIB
3	94	✓	2-Tetradecanol	214	C ₁₄ H ₃₀ O	NIST21.LIB
4	94	✓	2-Tetradecanol	214	C ₁₄ H ₃₀ O	NIST21.LIB
5	94	✓	2-Tetradecanol (CAS) sec-Tetradecyl alcohol	214	C ₁₄ H ₃₀ O	WILEY229.LI
6	94	✓	2-Undecanol (CAS) sec-Undecyl alcohol \$\$ M	172	C ₁₁ H ₂₄ O	WILEY229.LI
7	94	✓	2-Undecanol	172	C ₁₁ H ₂₄ O	NIST21.LIB
8	94	✓	2-Pentadecanol \$\$ sec-Pentadecyl alcohol \$\$	228	C ₁₅ H ₃₂ O	NIST107.LIB
9	94	✓	2-Pentadecanol \$\$ sec-Pentadecyl alcohol \$\$	228	C ₁₅ H ₃₂ O	NIST08.LIB

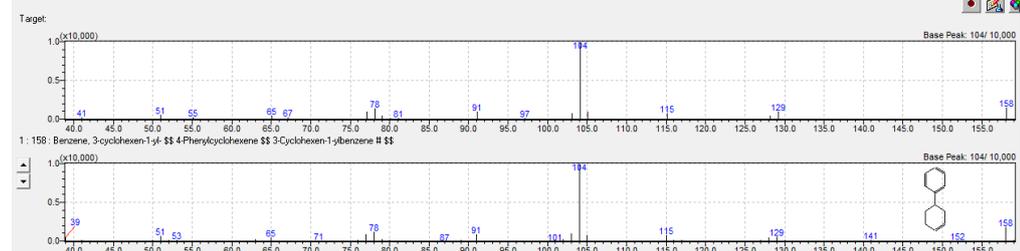


21



4-fenilciclohexano – 88%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	88	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl- \$\$ 4-Phenylcyclohexane	158	C ₁₂ H ₁₄	NIST08.LIB
2	88	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl- \$\$ 4-Phenylcyclohexane	158	C ₁₂ H ₁₄	NIST107.LIB
3	87	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-	158	C ₁₂ H ₁₄	NIST21.LIB
4	87	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl- (CAS) 4-Phenylcyclohexane	158	C ₁₂ H ₁₄	WILEY229.LI
5	86	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl- (CAS) 4-Phenylcyclohexane	158	C ₁₂ H ₁₄	WILEY229.LI
6	86	✓	Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-	158	C ₁₂ H ₁₄	NIST21.LIB
7	80	✓	Phenethyl propionate \$\$ Propanoic acid, 2-ph	178	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	FFNSC1.3lb
8	80	✓	Cyclobutane, 1,3-diphenyl-, trans- (CAS)	208	C ₁₆ H ₁₆	WILEY229.LI
9	80	✓	Monomethyl-3-phenylcyclobutane-1,1-dicarbox	234	C ₁₃ H ₁₄ O ₄	NIST08.LIB

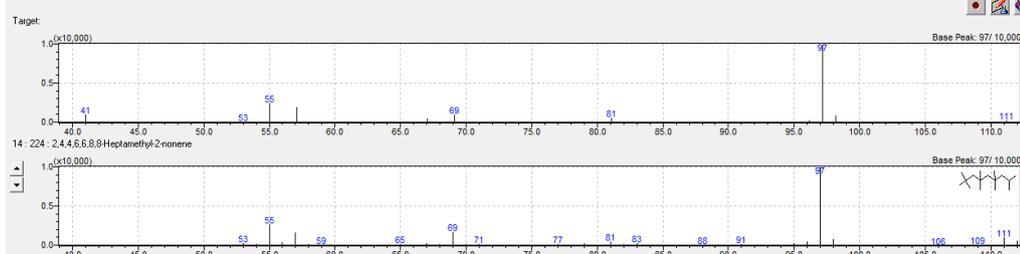


22

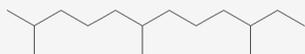


2,4,4,6,6,8,8-heptametilnon-2-eno – 81%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
14	81	✓	2,4,4,6,6,8,8-Heptamethyl-2-nonen-1-ene	224	C ₁₈ H ₃₂	NIST08.LIB
15	81	✓	Sulfurous acid, cyclohexylmethyl tetradecyl est	374	C ₂₁ H ₄₂ O ₃ S	NIST08.LIB
16	81	✓	Sulfurous acid, cyclohexylmethyl tridecyl ester	360	C ₂₀ H ₄₀ O ₃ S	NIST08.LIB
17	81	✓	Cyclohexane, bromo-	176	C ₆ H ₁₁ Br	NIST21.LIB
18	80	✓	1-(Trimethylsilyl)-1-propyne \$\$ 1-(Trimethylsilyl)-1-propyne	112	C ₆ H ₁₂ Si ₃	NIST107.LIB
19	80	✓	Sulfurous acid, cyclohexylmethyl isobutyl ester	234	C ₁₁ H ₂₂ O ₃ S	NIST08.LIB
20	80	✓	1-Oxaaprop[5,2]octane-2-carbaldehyde \$\$	140	C ₈ H ₁₂ O ₂	WILEY229.LI
21	80	✓	Sulfurous acid, cyclohexylmethyl octadecyl est	430	C ₂₅ H ₅₀ O ₃ S	NIST08.LIB
22	80	✓	3-(chloromethyl)cyclohexanone \$\$ Cyclohexanone	216	C ₁₂ H ₂₁ Cl	WILEY229.LI

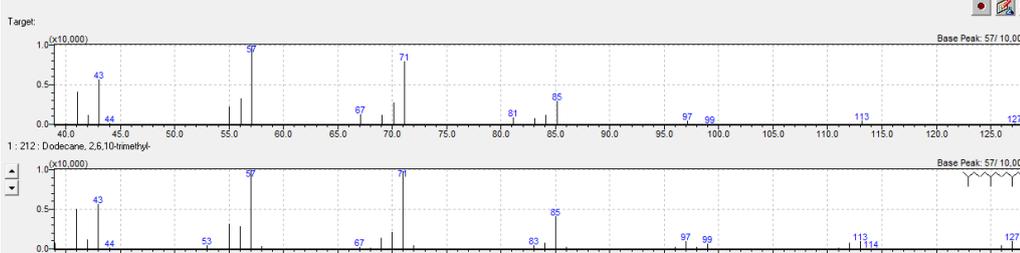


23

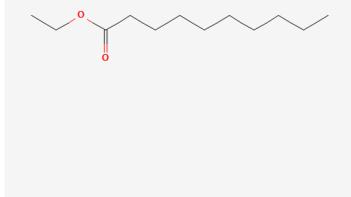


2,6,10-trimetildodecano – 90%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	90	✓	Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	212	C ₁₅ H ₃₂	NIST21.LIB
2	90	✓	Decane, 2,3,5,8-tetramethyl- \$\$	198	C ₁₄ H ₃₀	NIST107.LIB
3	90	✓	Nonane, 3,7-dimethyl- (CAS) 3,7-Dimethylnona	156	C ₁₁ H ₂₄	WILEY229.LI
4	90	✓	Oxalic acid, 2-ethylhexyl heptyl ester	286	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	NIST08.LIB
5	90	✓	Nonane, 3,7-dimethyl- \$\$ 3,7-Dimethylnona	156	C ₁₁ H ₂₄	NIST107.LIB
6	90	✓	DECANE, 2,3,5,8-TETRAMETHYL- \$\$	198	C ₁₄ H ₃₀	WILEY229.LI
7	90	✓	Nonane, 3,7-dimethyl- \$\$ 3,7-Dimethylnona	156	C ₁₁ H ₂₄	NIST08.LIB
8	90	✓	Decane, 2,3,5,8-tetramethyl- \$\$ 2,3,5,8-Tetra	198	C ₁₄ H ₃₀	NIST08.LIB
9	89	✓	Dodecane, 2,6,11-trimethyl- \$\$ 2,6,11-Trimeth	212	C ₁₅ H ₃₂	NIST107.LIB

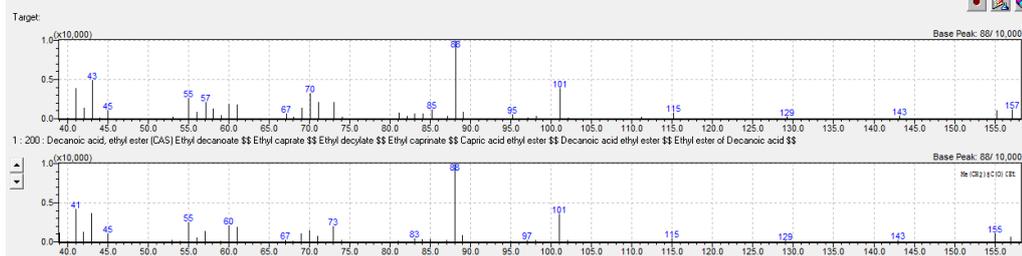


24

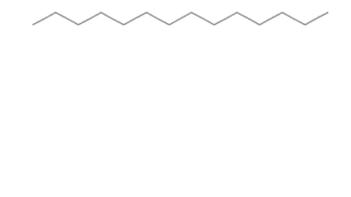


decanoato de etila – 93%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	93	✓	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI
2	93	✓	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB
3	92	✓	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	NIST21.LIB
4	92	✓	Decanoic acid, ethyl ester	200	C12H24O2	FNIS1.3.LIB
5	92	✓	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI
6	91	✓	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI
7	91	✓	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	WILEY229.LI
8	91	✓	Decanoic acid, ethyl ester (CAS) Ethyl decano	200	C12H24O2	NIST107.LIB
9	91	✓	ETHYL DECANOATE	200	C12H24O2	WILEY229.LI

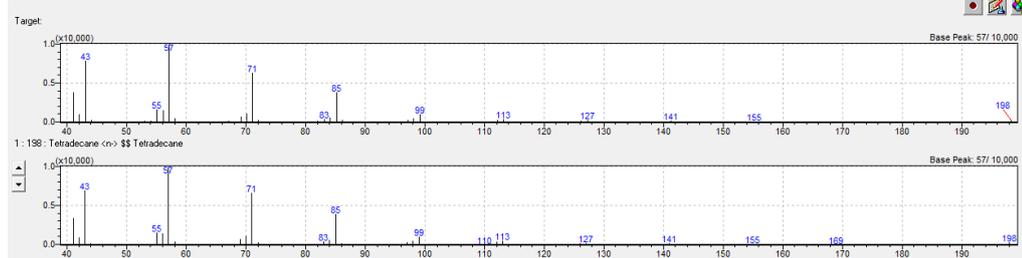


25

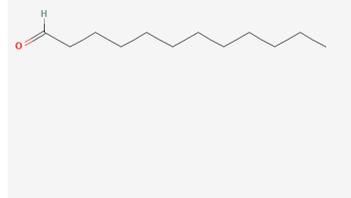


tetradecano – 98%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	98	✓	Tetradecane <n> \$ Tetradecane	198	C14H30	FNIS1.3.LIB
2	98	✓	Tridecane <n> \$ Tridecane	184	C13H28	FNIS1.3.LIB
3	97	✓	Tetradecane	198	C14H30	NIST21.LIB
4	97	✓	Hexadecane (CAS) n-Hexadecane \$ Cetane	226	C16H34	WILEY229.LI
5	97	✓	Hexadecane	226	C16H34	NIST21.LIB
6	97	✓	Dodecane <n> \$ Dodecane	170	C12H26	FNIS1.3.LIB
7	97	✓	Pentadecane <n> \$ Pentadecane	212	C15H32	FNIS1.3.LIB
8	97	✓	Pentadecane	212	C15H32	NIST21.LIB
9	97	✓	Tetradecane \$ n-Tetradecane \$ Isotetrad	198	C14H30	NIST107.LIB

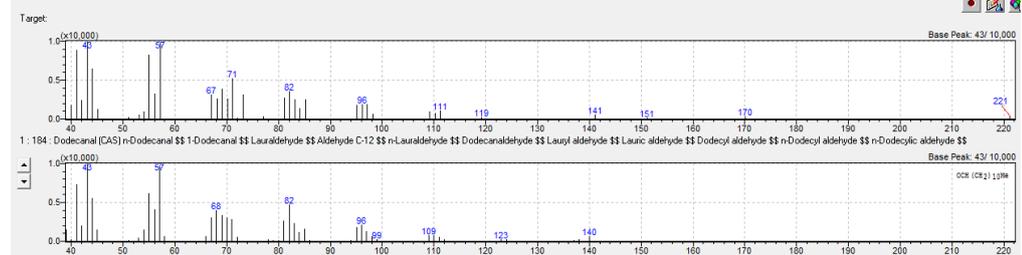


26

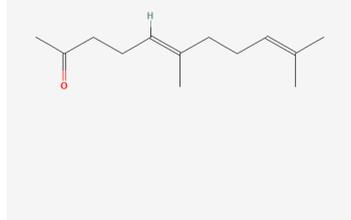


dodecanal – 90%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	90	✓	Dodecanal (CAS) n-Dodecanal \$ 1-Dodecan	184	C12H24O	WILEY229.LI
2	90	✓	Dodecanal \$ Lauraldehyde \$ n-Dodecanal	184	C12H24O	NIST107.LIB
3	89	✓	Undecanal	170	C11H22O	NIST21.LIB
4	89	✓	UNDECANAL \$ \$	170	C11H22O	WILEY229.LI
5	89	✓	Undecanal <n> \$ Undecanal	170	C11H22O	FNIS1.3.LIB
6	89	✓	Undecanal (CAS) Hendecanal \$ n-Undecan	170	C11H22O	WILEY229.LI
7	89	✓	Undecanal	170	C11H22O	NIST21.LIB
8	89	✓	Hexadecanal \$ Palmitaldehyde \$ \$	240	C16H32O	NIST107.LIB
9	89	✓	1-Dodecanol (CAS) n-Dodecanol \$ \$ CO 12 \$ \$	186	C12H26O	WILEY229.LI

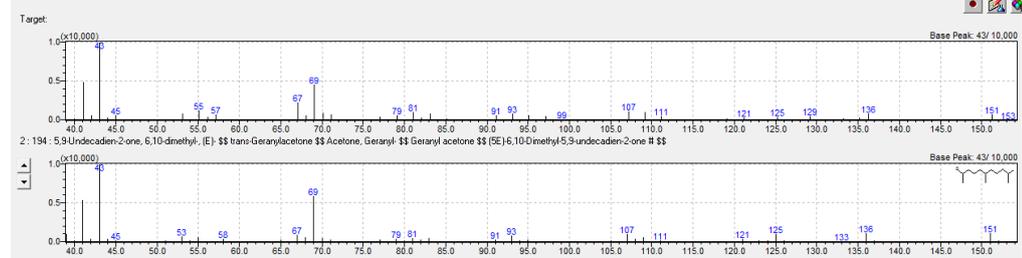


27

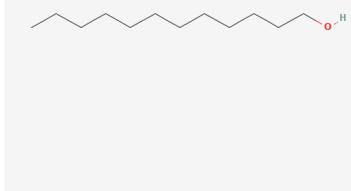


geranylacetona – 87%

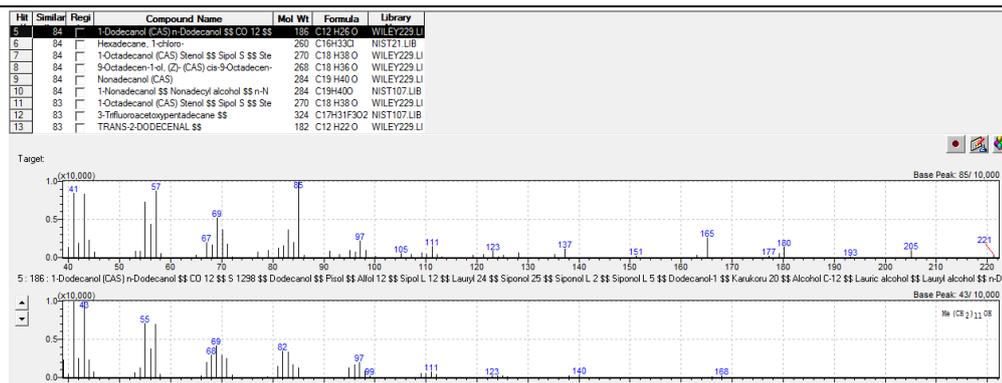
Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C13H22O	NIST21.LIB
2	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C13H22O	NIST107.LIB
3	87	✓	NERYL ACETONE \$ \$	194	C13H22O	WILEY229.LI
4	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C13H22O	WILEY229.LI
5	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	194	C13H22O	NIST107.LIB
6	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	194	C13H22O	NIST21.LIB
7	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	194	C13H22O	WILEY229.LI
8	87	✓	5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	194	C13H22O	NIST21.LIB
9	87	✓	NERYL ACETONE \$ \$	194	C13H22O	WILEY229.LI



28



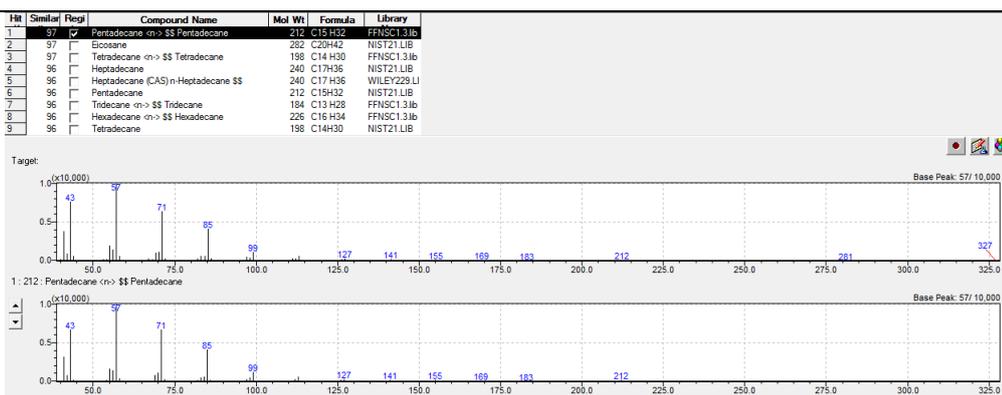
dodecan-1-ol – 84%



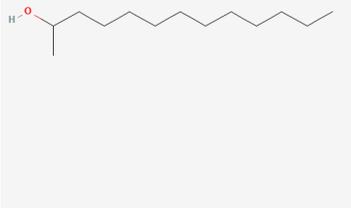
29



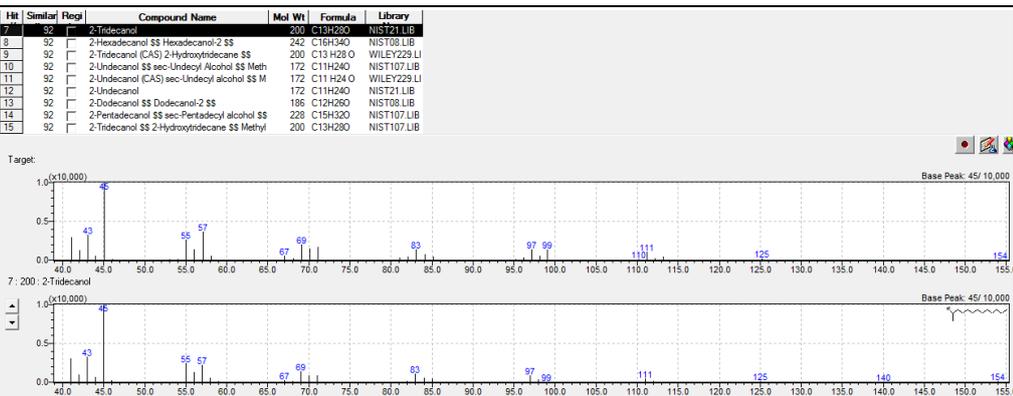
pentadecano – 97%



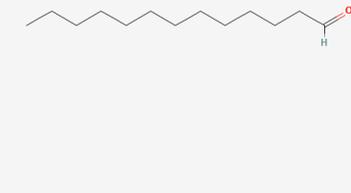
30



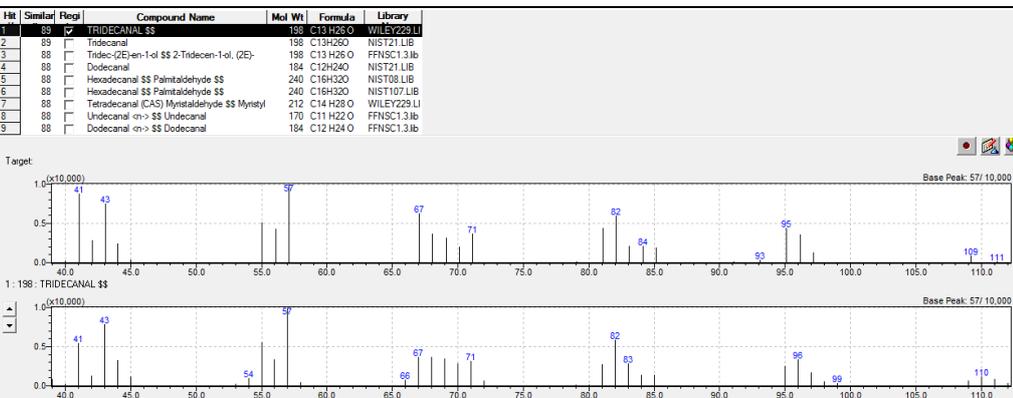
tridecan-2-ol – 92%



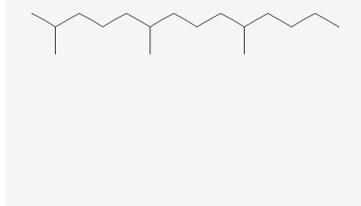
31



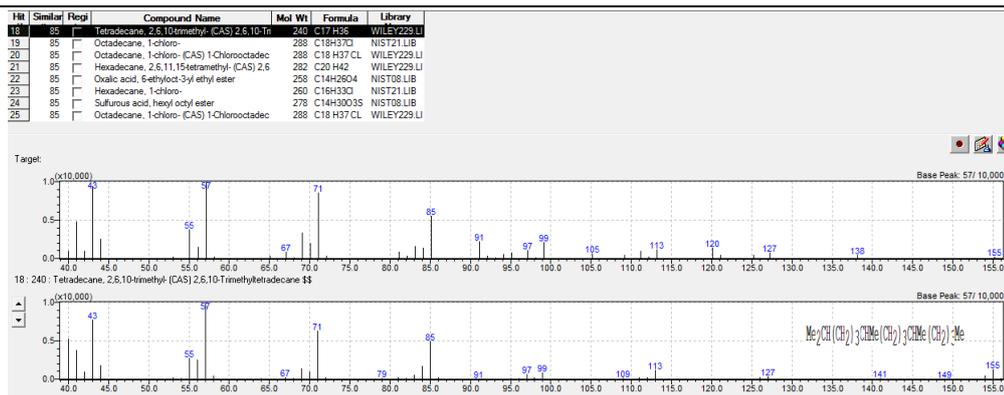
tridecanal – 89%



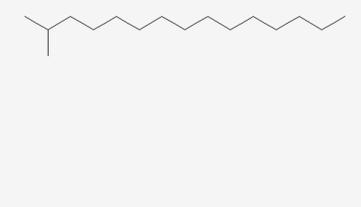
32



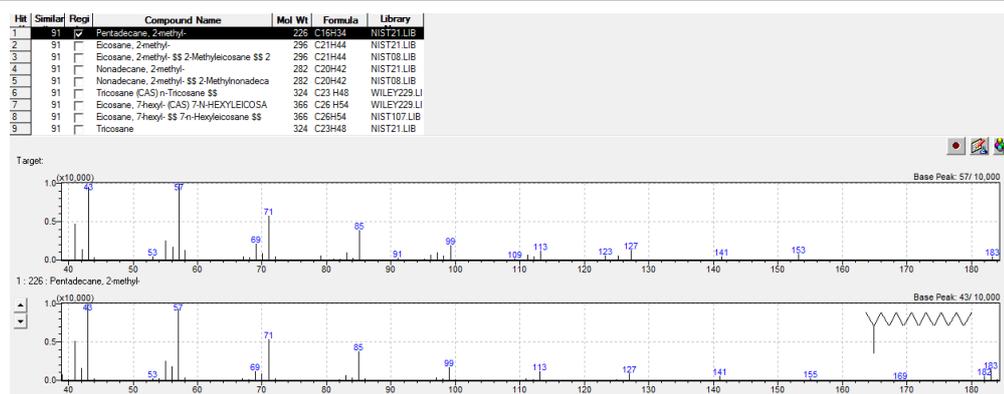
2,6,10-trimetiltetradecano – 85%



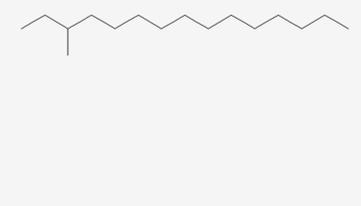
33



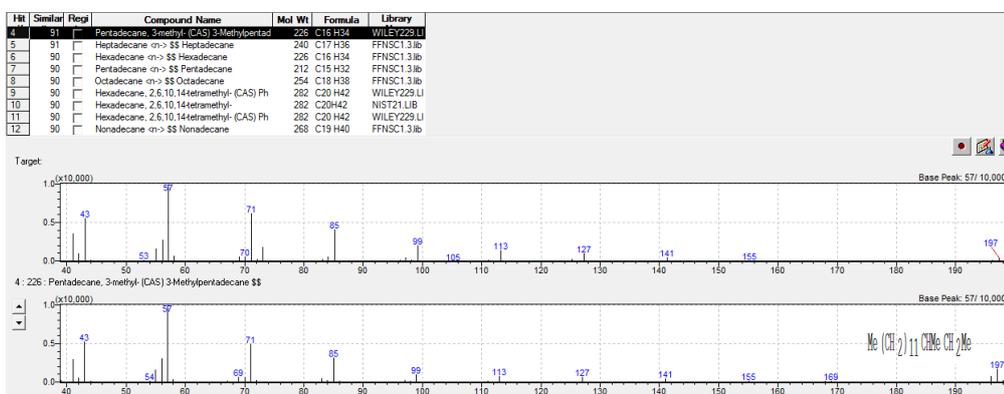
2-metilpentadecano – 91%



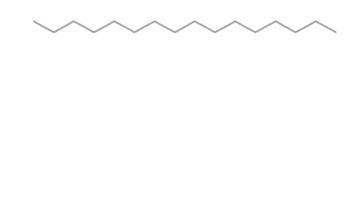
34



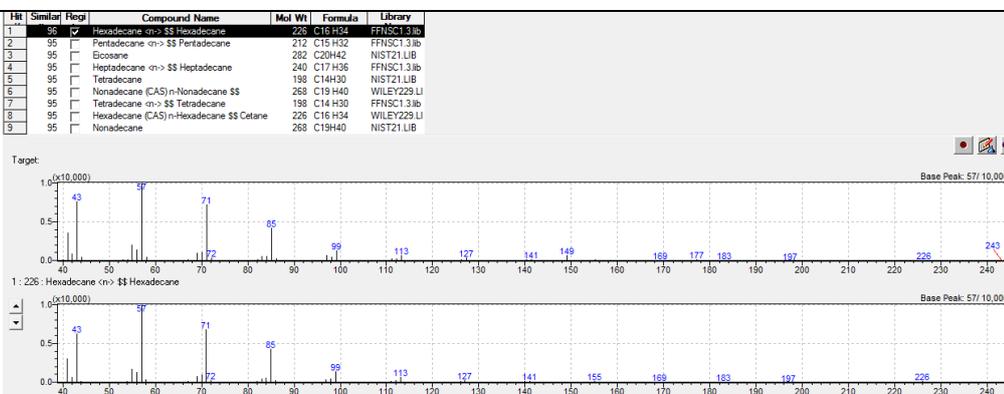
3-metilpentadecano – 91%



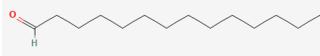
35



hexadecano – 96%

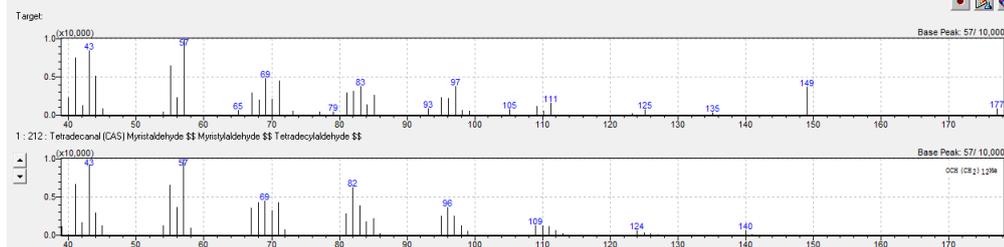


36

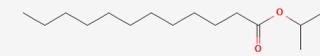


tetradecanal – 87%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	87	✓	Tetradecanal (CAS) Myristaldehyde \$\$ Myristyl	212	C ₁₄ H ₂₈ O	WILEY229 LI
2	86		1-Docosanol	326	C ₂₂ H ₄₄ O	NIST21 LIB
3	86		1-Docosanol (CAS) Behenic alcohol \$\$ Behen	326	C ₂₂ H ₄₄ O	WILEY229 LI
4	86		Octadecanal \$\$ Stearaldehyde \$\$ Octadecyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST08 LIB
5	86		Octadecanal (CAS) Stearaldehyde \$\$ Stearyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	WILEY229 LI
6	86		Octadecanal \$\$ Stearaldehyde \$\$ Octadecyl	268	C ₁₈ H ₃₆ O	NIST107 LIB
7	86		Nonadecanal (CAS)	284	C ₁₉ H ₄₀ O	WILEY229 LI
8	86		1-Nonadecanol \$\$ Nonadecyl alcohol \$\$ n-N	284	C ₁₉ H ₄₀ O	NIST107 LIB
9	86		Dodecanal (CAS) n-Dodecylaldehyde \$\$ 1-Dodecan	184	C ₁₂ H ₂₄ O	WILEY229 LI

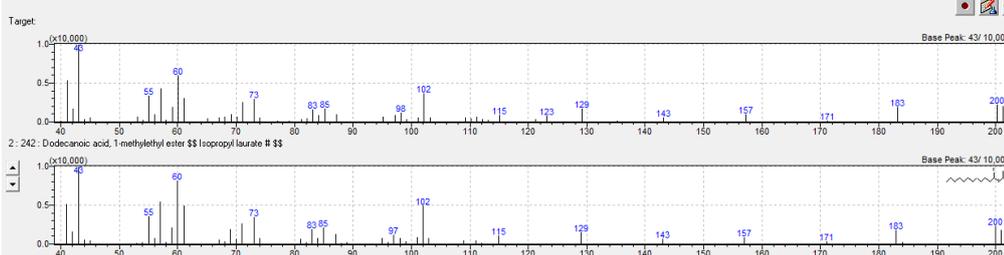


37

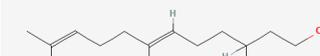


dodecanoato de propano-2-ila – 93%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	93	✓	Isopropyl dodecanoate \$\$ ISOPROPYL ESTE	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	WILEY229 LI
2	93		Dodecanoic acid, 1-methylethyl ester \$\$ Isopr	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	NIST08 LIB
3	93		Dodecanoic acid, 1-methylethyl ester \$\$	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	NIST107 LIB
4	86		Dodecanoic acid, propyl ester	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	NIST107 LIB
5	86		PROPYL DODECANOATE \$\$	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	WILEY229 LI
6	85		Dodecanoic acid, propyl ester \$\$ Propyl dode	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	NIST08 LIB
7	85		Dodecanoic acid, propyl ester \$\$	242	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	NIST107 LIB
8	85		Tetradecanoate (isopropyl-) \$\$ Tetradecanol	270	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	FFNSC1 3lb
9	83		Dodecanoic acid (CAS) Lauroic acid \$\$ ABL \$\$	200	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	WILEY229 LI

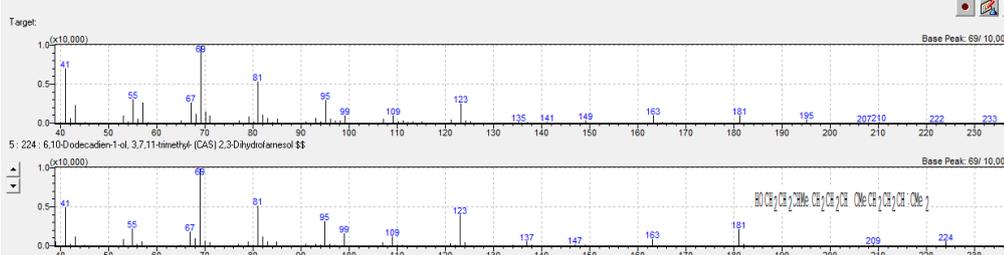


38

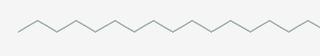


3,7,11-trimetildodeca-6,10-dien-1-ol – 89%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	89	✓	6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	NIST08 LIB
2	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	WILEY229 LI
3	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	NIST107 LIB
4	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	WILEY229 LI
5	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	WILEY229 LI
6	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	NIST107 LIB
7	89		6,10-Dodecadien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	224	C ₁₅ H ₂₈ O	NIST08 LIB
8	86		Cyclopropanemethanol, 2-methyl-2-(4-methyl-3-	168	C ₁₁ H ₂₀ O	NIST08 LIB
9	86		Cyclopropanemethanol, 2-methyl-2-(4-methyl-3-	168	C ₁₁ H ₂₀ O	NIST107 LIB

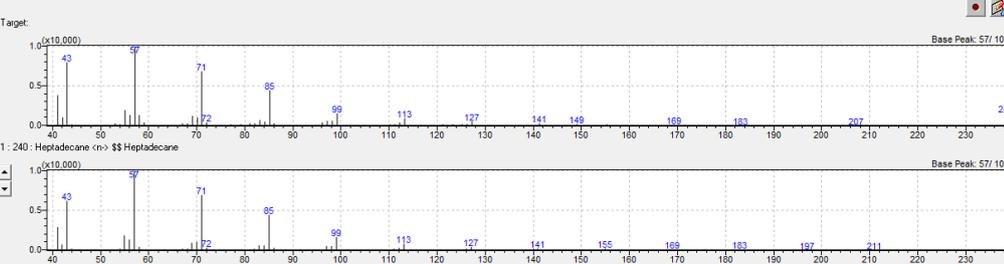


39

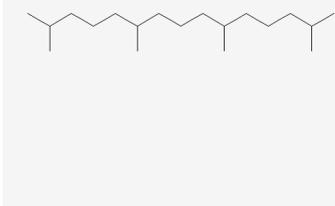


heptadecano – 94%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	94	✓	Heptadecane (CAS) n-Heptadecane	210	C ₁₇ H ₃₄	FFNSC1 3lb
2	94		Octadecane (CAS) n-Octadecane \$\$	254	C ₁₈ H ₃₈	WILEY229 LI
3	94		Tetradecane	198	C ₁₄ H ₃₀	NIST21 LIB
4	94		Hexadecane (n-) \$\$ Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	FFNSC1 3lb
5	94		Eicosane	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST21 LIB
6	94		Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST21 LIB
7	94		Nonadecane (CAS) n-Nonadecane \$\$	268	C ₁₉ H ₄₀	WILEY229 LI
8	94		Eicosane, 10-methyl-, (CAS) 10-METHYLEICO	296	C ₂₁ H ₄₄	WILEY229 LI
9	94		Eicosane, 10-methyl-, (CAS) 10-Methylcosane #	296	C ₂₁ H ₄₄	NIST08 LIB

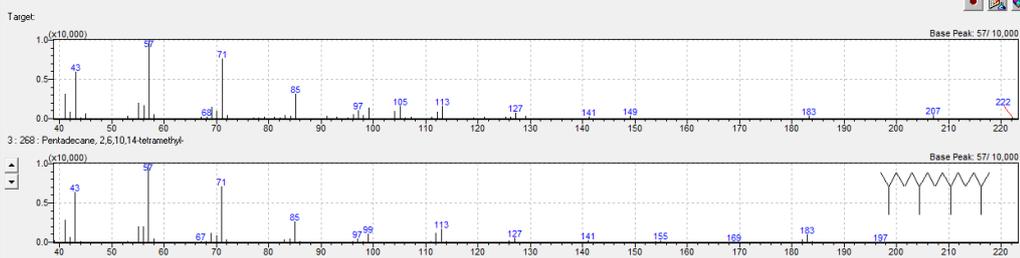


40

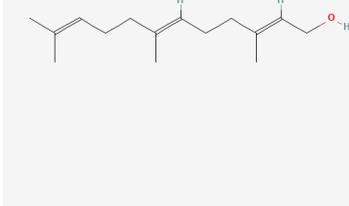


2,6,10,14-tetrametilpentadecano – 88%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
3	88		Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST11.LIB
4	88		Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI
5	88		Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	268	C ₁₉ H ₄₀	WILEY229.LI
6	87		Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- (CAS) 2	296	C ₂₁ H ₄₄	WILEY229.LI
7	87		Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$ 2,6,1	296	C ₂₁ H ₄₄	NIST08.LIB
8	87		Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl- (CAS) Ph	268	C ₁₉ H ₄₀	WILEY229.LI
9	87		Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl- \$\$	296	C ₂₁ H ₄₄	NIST107.LIB
10	87		Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST11.LIB
11	87		Tetracosane, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl- (C	422	C ₃₀ H ₆₂	WILEY229.LI

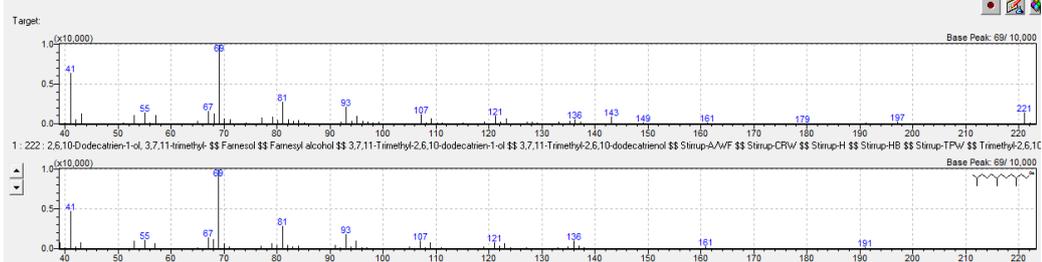


41

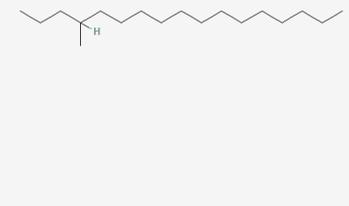


(2E,6E)-3,7,11-trimetildodeca-2,6,10-trien-1-ol – 90%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	90		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, S-F	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST08.LIB
2	90		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST11.LIB
3	90		Farnesol \$\$ 2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-tri	222	C ₁₅ H ₂₆ O	WILEY229.LI
4	90		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST11.LIB
5	89		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E,E	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST08.LIB
6	89		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST11.LIB
7	89		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E,E	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST107.LIB
8	89		Farnesol <(Z,Z)> \$\$ 2,6,10-Dodecatrien-1-ol,	222	C ₁₅ H ₂₆ O	FFNSC1.3.lb
9	89		2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-, (Z,E	222	C ₁₅ H ₂₆ O	NIST08.LIB

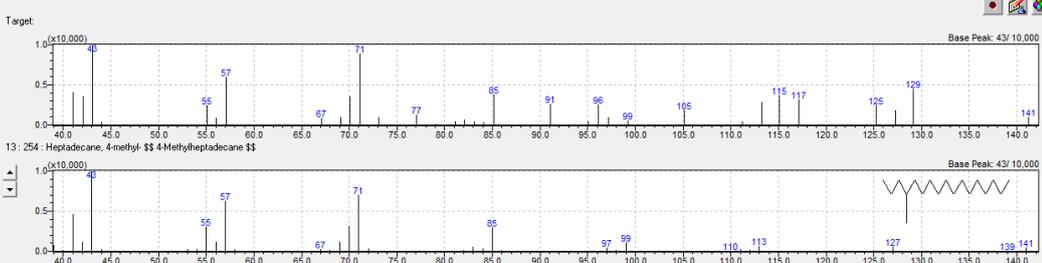


42

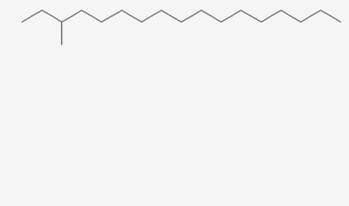


4-metilheptadecano – 74%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
13	74		Heptadecane, 4-methyl-, \$\$ 4-Methylheptadec	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST107.LIB
14	74		Nonadecane, 4-methyl-, \$\$ 4-Methylnonadeca	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST08.LIB
15	74		1-Thietol, 2-O-nonyl-, \$\$	248	C ₁₃ H ₂₈ O ₄	NIST107.LIB
16	74		1-Thietol, 2-O-nonyl-, \$\$ 3-(Nonyloxy)-1,2,4-but	248	C ₁₃ H ₂₈ O ₄	NIST08.LIB
17	74		Octane, 3,3-dimethyl-, (CAS) 3,3-Dimethyloctan	142	C ₁₀ H ₂₂	WILEY229.LI
18	74		Henicosane, 11-(1-ethylpropyl)-, (CAS) 11-(3-P	366	C ₂₆ H ₅₄	WILEY229.LI
19	74		Henicosane, 11-(1-ethylpropyl)-, \$\$ 11-(1-Eth	366	C ₂₆ H ₅₄	NIST107.LIB
20	74		Henicosane, 11-(1-ethylpropyl)-, \$\$ 11-(1-Eth	366	C ₂₆ H ₅₄	NIST08.LIB
21	74		Dotriacontane	450	C ₃₂ H ₆₆	NIST11.LIB

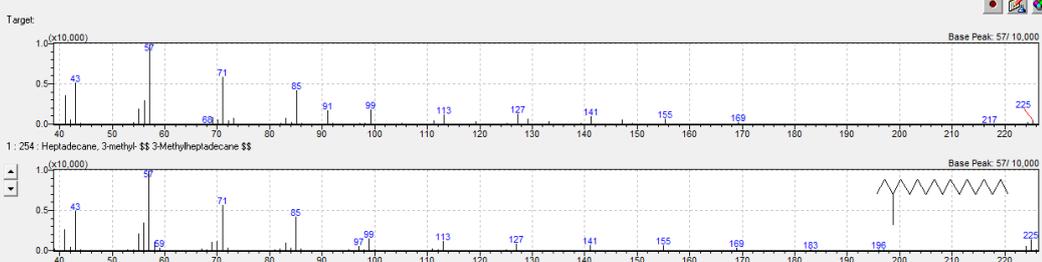


43

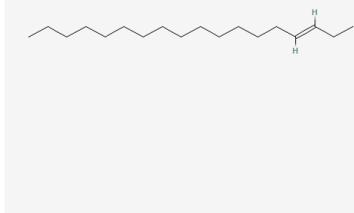


3-metilheptadecano – 89%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	89		Heptadecane, 3-methyl-, \$\$ 3-Methylheptadec	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST107.LIB
2	88		Heptadecane, 3-methyl-, (CAS) 3-Methylheptad	254	C ₁₈ H ₃₈	WILEY229.LI
3	88		Heptadecane, 3-methyl-, (CAS) 3-Methylheptad	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST11.LIB
4	88		Heptadecane, 3-methyl-, (CAS) 3-Methylheptad	254	C ₁₈ H ₃₈	WILEY229.LI
5	87		Hexadecane, 1-iodo-, \$\$ Cetyl iodide \$\$ Hexa	352	C ₁₆ H ₃₃ I	NIST08.LIB
6	87		Tricosane (CAS)-n-Tricosane \$\$	324	C ₂₃ H ₄₈	WILEY229.LI
7	87		Nonadecane eno-, \$\$ Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	FFNSC1.3.lb
8	87		Octadecane, 2-methyl-,	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST11.LIB
9	87		Tricosane (CAS)-n-Tricosane \$\$	324	C ₂₃ H ₄₈	WILEY229.LI

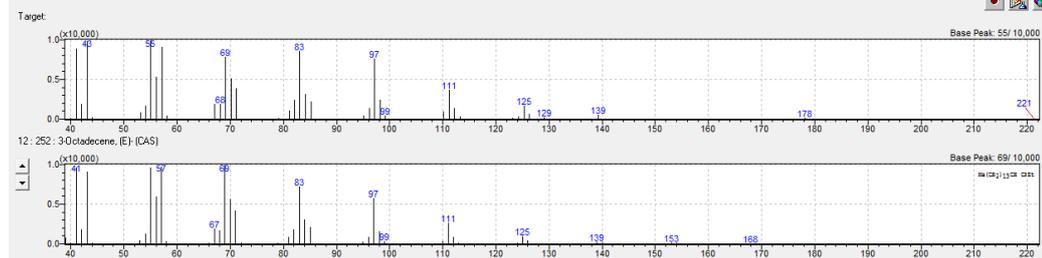


44

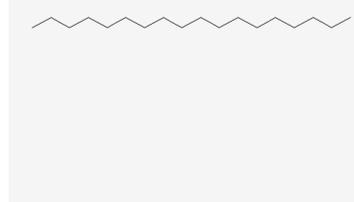


(E)-octadec-3-eno – 95%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
12	95		3-Octadecene, (E)- [CAS]	282	C ₁₈ H ₃₆	WILEY229.LI
13	95		3-Octadecene, (E)- \$\$ (E)-3-Octadecene # \$	282	C ₁₈ H ₃₆	NIST08.LIB
14	95		3-Octadecene, (E)- \$\$	282	C ₁₈ H ₃₆	NIST107.LIB
15	95		1-Nonadecene \$\$	266	C ₁₉ H ₃₈	NIST107.LIB
16	95		1-Docosene	308	C ₂₂ H ₄₄	NIST21.LIB
17	95		Trichloroacetic acid, tetradecyl ester \$\$ Tetra	358	C ₁₆ H ₂₉ Cl ₃ O ₂	NIST08.LIB
18	95		1-Octadecanol \$\$ n-Octadecanol \$\$ n-Octad	270	C ₁₈ H ₃₈ O	NIST107.LIB
19	95		Trifluoroacetic acid, n-tridecyl ester \$\$ Tridecyl	296	C ₁₅ H ₂₇ F ₃ O ₂	NIST08.LIB
20	95		Tetradecyl trifluoroacetate \$\$ Tetradecyl 2,2,2	310	C ₁₆ H ₂₉ F ₃ O ₂	NIST08.LIB

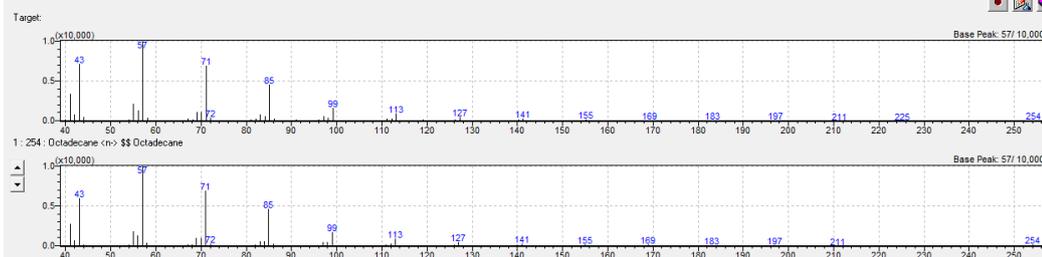


45

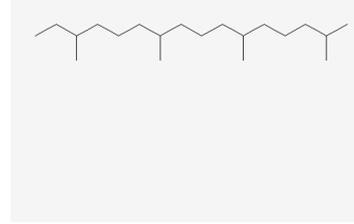


octadecano – 97%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	97		Octadecane <n> \$\$ Octadecane	254	C ₁₈ H ₃₈	FFNSC1.3.IB
2	97		Heptadecane <n> \$\$ Heptadecane	240	C ₁₇ H ₃₆	FFNSC1.3.IB
3	96		Nonadecane <n> \$\$ Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	FFNSC1.3.IB
4	96		Nonadecane (CAS)n-Nonadecane \$\$	268	C ₁₉ H ₄₀	WILEY229.LI
5	96		Nonadecane	268	C ₁₉ H ₄₀	NIST21.LIB
6	96		Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Nomah	240	C ₁₇ H ₃₆	NIST107.LIB
7	96		Hexadecane <n> \$\$ Hexadecane	226	C ₁₆ H ₃₄	FFNSC1.3.IB
8	96		Eicosane <n> \$\$ Eicosane	282	C ₂₀ H ₄₂	FFNSC1.3.IB
9	96		Octadecane	254	C ₁₈ H ₃₈	NIST21.LIB

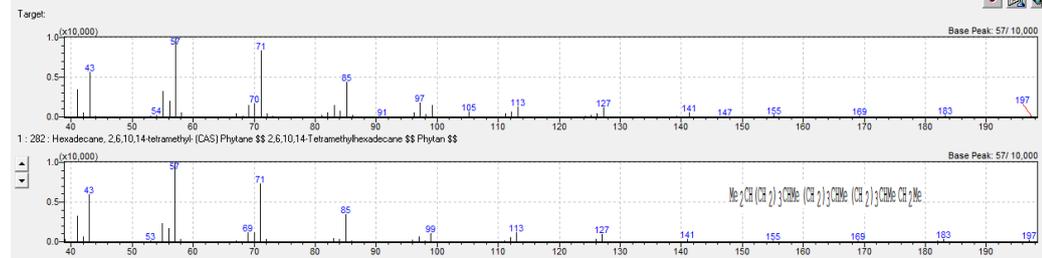


46

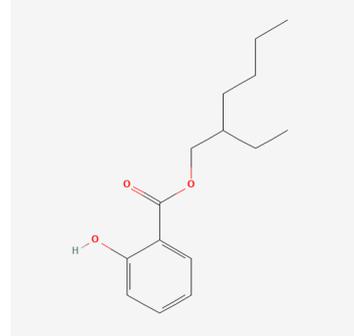


2,6,10,14-tetrametilhexadecano – 93%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	93		Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-, (CAS) Ph	282	C ₂₀ H ₄₂	WILEY229.LI
2	93		Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	212	C ₁₅ H ₃₂	NIST21.LIB
3	93		Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST21.LIB
4	92		Tetralinacortane \$\$ n-Tetralinacortane \$\$	478	C ₃₄ H ₇₀	NIST107.LIB
5	92		Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST21.LIB
6	92		Docosane (CAS)n-Docosane \$\$ C22H46 ST	310	C ₂₂ H ₄₆	WILEY229.LI
7	92		Docosane \$\$ n-Docosane \$\$ Normal-docosa	310	C ₂₂ H ₄₆	NIST107.LIB
8	92		Eicosane \$\$ n-Eicosane \$\$ Icosane # \$ \$	282	C ₂₀ H ₄₂	NIST08.LIB
9	92		Heptadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-, (CAS) 2.	296	C ₂₁ H ₄₄	WILEY229.LI

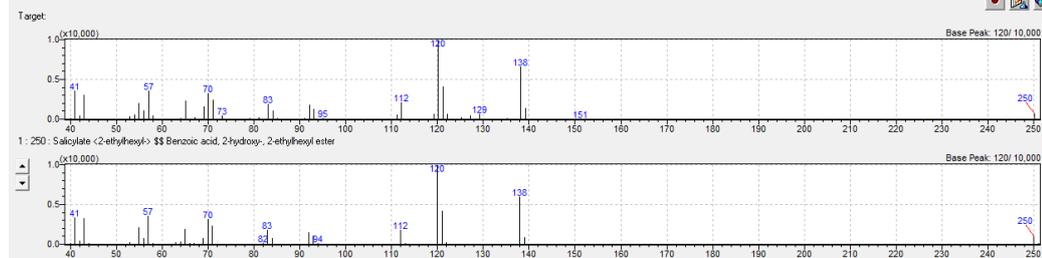


47

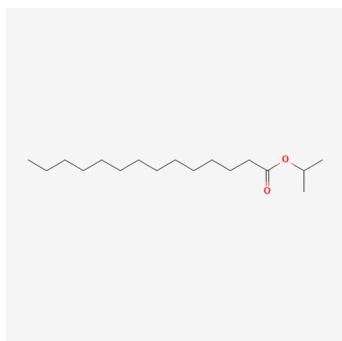


2-etilhexil salicilato – 92%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	92		Salicylate (2-ethylhexyl)- \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	FFNSC1.3.IB
2	89		2-Ethylhexyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST08.LIB
3	80		n-Octyl-OXY-BENZOIC-ACID \$\$	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	WILEY229.LI
4	80		n-Octyl-4-Hydroxybenzoate \$\$ Benzoic acid, 4-	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST107.LIB
5	80		n-Octyl-4-Hydroxybenzoate \$\$ Benzoic acid, 4-	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST08.LIB
6	77		2-Ethylhexyl p-Hydroxybenzoate \$\$ p-Hydroxy	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	NIST08.LIB
7	77		Salicylate (dipentyl)- \$\$ Benzoic acid, 2-hydr	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	FFNSC1.3.IB
8	77		ISO AMYL SALICYLATE \$\$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	WILEY229.LI
9	76		Benzoic acid, 2-Hydroxy-, 3-methylbutyl ester \$	208	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	NIST107.LIB

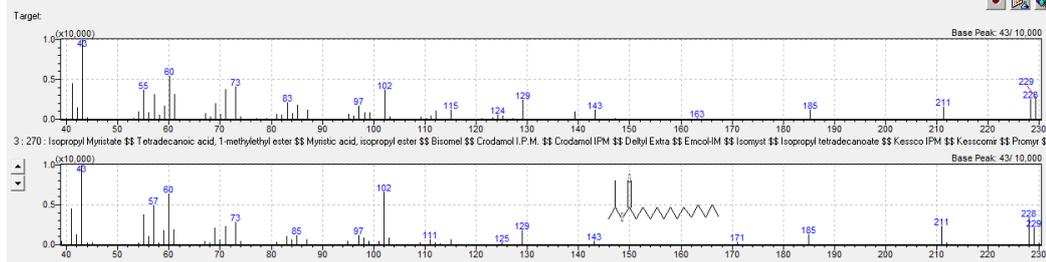


48

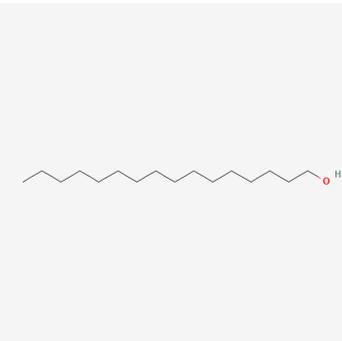


tetradecanoato de propano-2-ila – 90%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	91	✓	Isopropyl Myristate	270	C17H34O2	NIST21.LIB
2	91	✓	Tetradecanoate (isopropyl)-> Tetradecanoic	270	C17H34O2	FFNSC1.3.lb
3	80	✓	Isopropyl Myristate && Tetradecanoic acid 1-	270	C17H34O2	NIST21.LIB
4	90	✓	Isopropyl Myristate	270	C17H34O2	NIST21.LIB
5	88	✓	Isopropyl Myristate && Tetradecanoic acid, 1-	270	C17H34O2	NIST107.LIB
6	85	✓	Tetradecanoic acid, propyl ester &&	270	C17H34O2	NIST107.LIB
7	85	✓	Tetradecanoic acid, propyl ester && Propyl tetr	270	C17H34O2	NIST08.LIB
8	85	✓	PROPYL TETRADECANOATE &&	270	C17H34O2	WILEY229.LI
9	84	✓	Isopropyl myristate && Tetradecanoic acid, 1-m	270	C17H34O2	WILEY229.LI

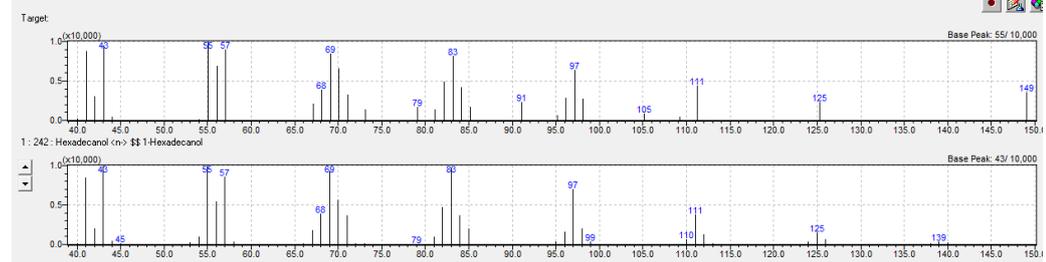


49

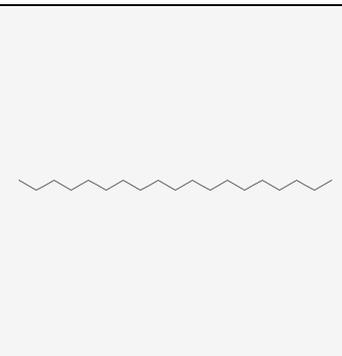


hexadecan-1-ol – 90%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	90	✓	Hexadecanol (n)-> 1-Hexadecanol	242	C16H34O	FFNSC1.3.lb
2	90	✓	Pentadecanol (n)-> 1-Pentadecanol	228	C15H32O	FFNSC1.3.lb
3	90	✓	Tetradecanol (n)-> 1-Tetradecanol	214	C14H30O	FFNSC1.3.lb
4	90	✓	1-Tridecanol	200	C13H28O	NIST21.LIB
5	90	✓	1-TRIDECANOL &&	200	C13H28O	WILEY229.LI
6	90	✓	1-PENTADECANOL &&	228	C15H32O	WILEY229.LI
7	90	✓	1-Pentadecanol	228	C15H32O	NIST21.LIB
8	90	✓	1-TETRADECANOL &&	214	C14H30O	WILEY229.LI
9	90	✓	Tridecanol (n)-> 1-Tridecanol	200	C13H28O	FFNSC1.3.lb

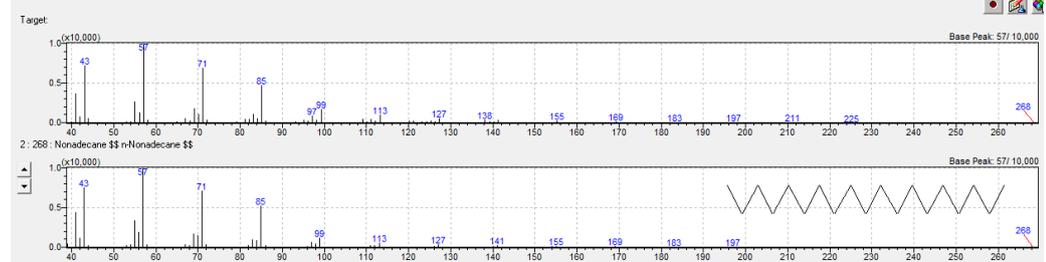


50

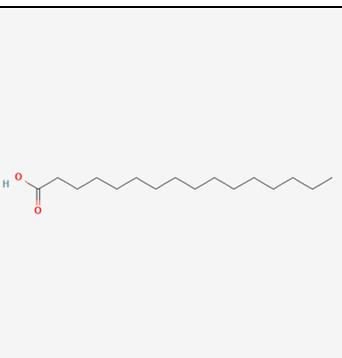


nonadecano – 93%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
2	93	✓	Nonadecane && n-Nonadecane &&	268	C19H40	NIST107.LIB
3	92	✓	Pentatriacontane (CAS) n-Pentatriacontane &&	493	C35H72	WILEY229.LI
4	92	✓	Pentatriacontane	492	C35H72	NIST21.LIB
5	92	✓	Heptacosane && n-Heptacosane &&	380	C27H56	NIST107.LIB
6	92	✓	Heptacosane (CAS) n-Heptacosane &&	380	C27H56	WILEY229.LI
7	92	✓	Tetratetracontane (CAS) n-Tetratetracontane &&	619	C44H90	WILEY229.LI
8	92	✓	Docosane, 11-decyl- (CAS) 11-N-DECYLDOC	451	C32H66	WILEY229.LI
9	92	✓	Tetratetracontane	618	C44H90	NIST21.LIB
10	92	✓	Heptadecane, Sodyl- &&	352	C25H52	NIST107.LIB

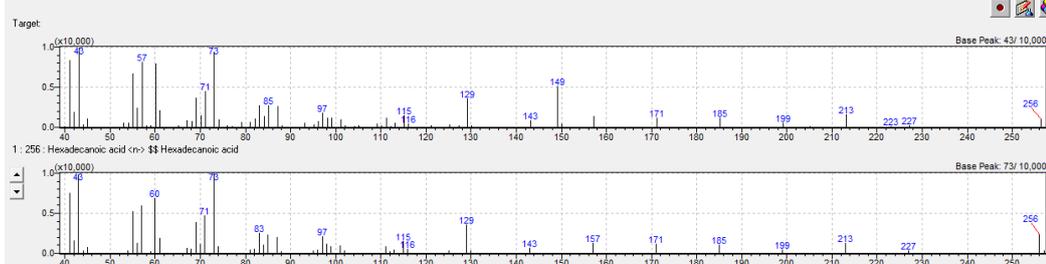


51



ácido hexadecanoico – 91%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	91	✓	Hexadecanoic acid (n)-> Hexadecanoic ac	256	C16H32O2	FFNSC1.3.lb
2	91	✓	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid &&	282	C18H34O2	WILEY229.LI
3	90	✓	n-Hexadecanoic acid	256	C16H32O2	NIST21.LIB
4	90	✓	Hexadecanoic acid (CAS) Palmitic acid && Pal	256	C16H32O2	WILEY229.LI
5	90	✓	Pentadecanoic acid && Pentadecylic acid &&	242	C15H30O2	NIST08.LIB
6	90	✓	Pentadecanoic acid	242	C15H30O2	NIST21.LIB
7	90	✓	Tetradecanoic acid && Myristic acid && n-Tetr	228	C14H28O2	NIST107.LIB
8	89	✓	Eicosanoic acid && Arachidic acid && Arachidic	312	C20H40O2	NIST08.LIB
9	89	✓	Eicosanoic acid && Arachidic acid && Arachidic	312	C20H40O2	NIST107.LIB

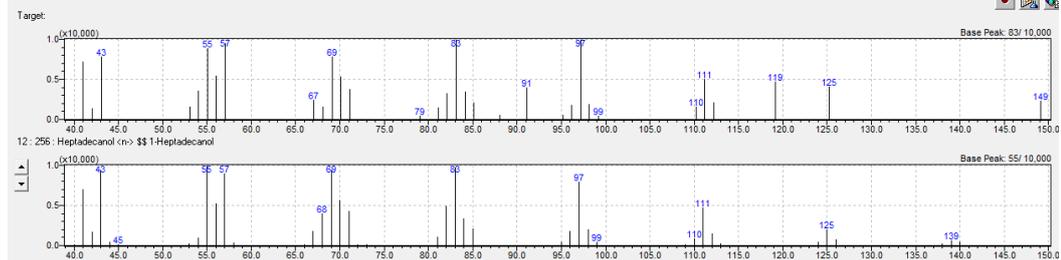


52



heptadecan-1-ol – 88%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
12	88		Heptadecanol <n> \$\$ 1-Heptadecanol	256	C17H36O	FFNSC1.3.Lib
13	88		Pentadecyl pentafluoropropionate	374	C18H31F5O2	NIST08.LIB
14	88		9-Eicosene (E) \$\$	280	C20H40	NIST107.LIB
15	88		9-Eicosene (E) (CAS)	280	C20H40	WILEY229.LI
16	88		9-Eicosene (E) \$\$ (E)-9-Eicosene # \$\$	280	C20H40	NIST08.LIB
17	88		1-Pentadecene	210	C15H30	NIST21.LIB
18	88		Hexadecanol <n> \$\$ 1-Hexadecanol	242	C16H34O	FFNSC1.3.Lib
19	88		Tachloroacetic acid, tetradecyl ester \$\$ Tetra	358	C16H28Cl3O2	NIST08.LIB
20	88		9-Tricosene (Z) \$\$ (Z)-9-Tricosene \$\$ cis-9-T	322	C23H46	NIST107.LIB



53



eicosano – 94%

Hit	Similar	Regi	Compound Name	Mol Wt	Formula	Library
1	94		Eicosane <n> \$\$ Eicosane	282	C20H42	FFNSC1.3.Lib
2	94		Nonadecane <n> \$\$ Nonadecane	268	C19H40	FFNSC1.3.Lib
3	94		Heptadecane \$\$ n-Heptadecane \$\$ Normal-h	240	C17H36	NIST107.LIB
4	94		Octadecane \$\$ n-Octadecane \$\$ Octadecan	254	C18H38	NIST107.LIB
5	94		Tetraacosane \$\$ n-Tetraacosane \$\$	478	C24H50	NIST107.LIB
6	94		Octadecane (CAS)n-Octadecane \$\$	254	C18H38	WILEY229.LI
7	94		Heheicosane <n> \$\$ Heheicosane	296	C21H44	FFNSC1.3.Lib
8	94		Octadecane <n> \$\$ Octadecane	254	C18H38	FFNSC1.3.Lib
9	94		Nonadecane (CAS)n-Nonadecane \$\$	268	C19H40	WILEY229.LI

