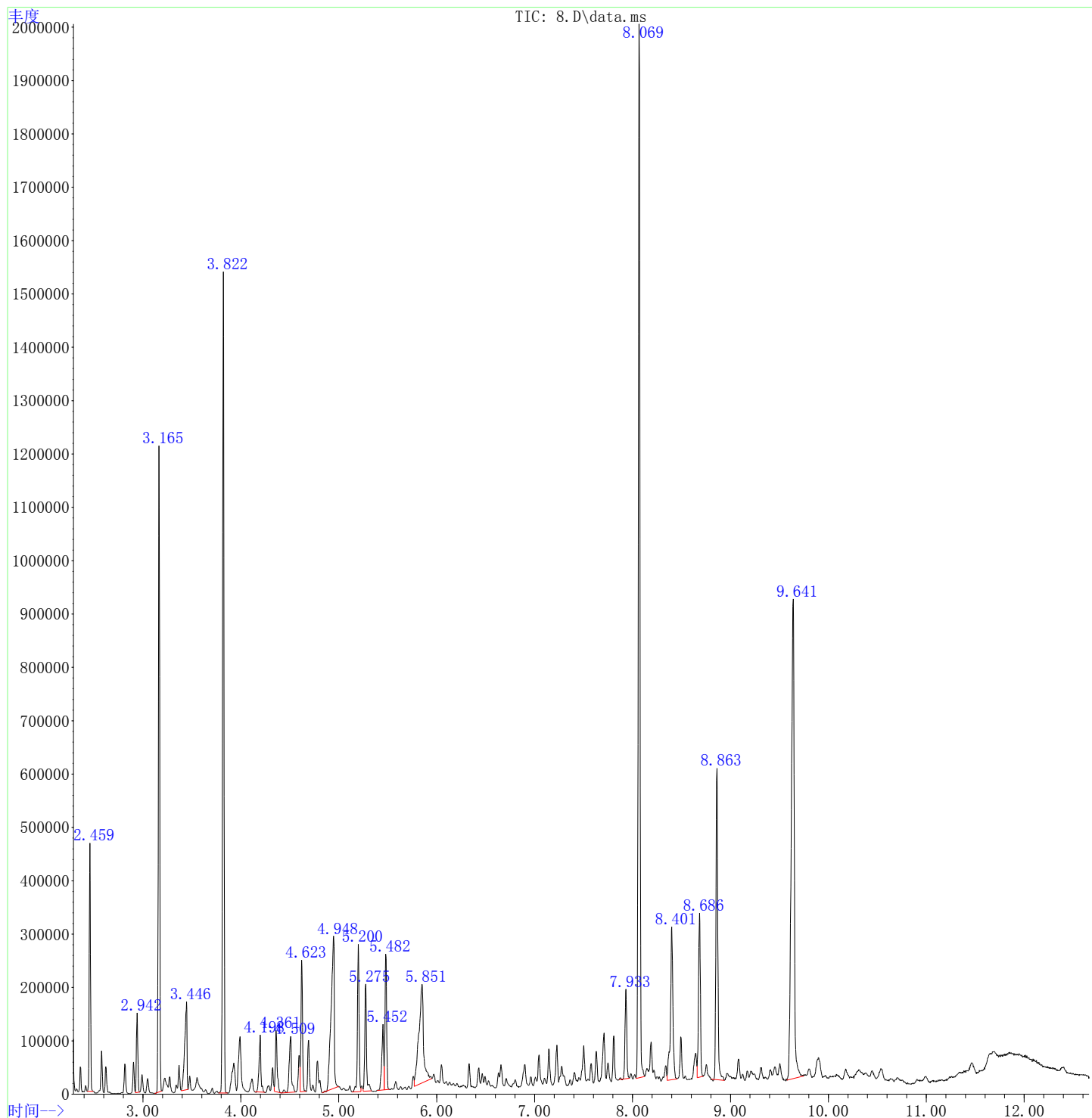


谱库检索报告

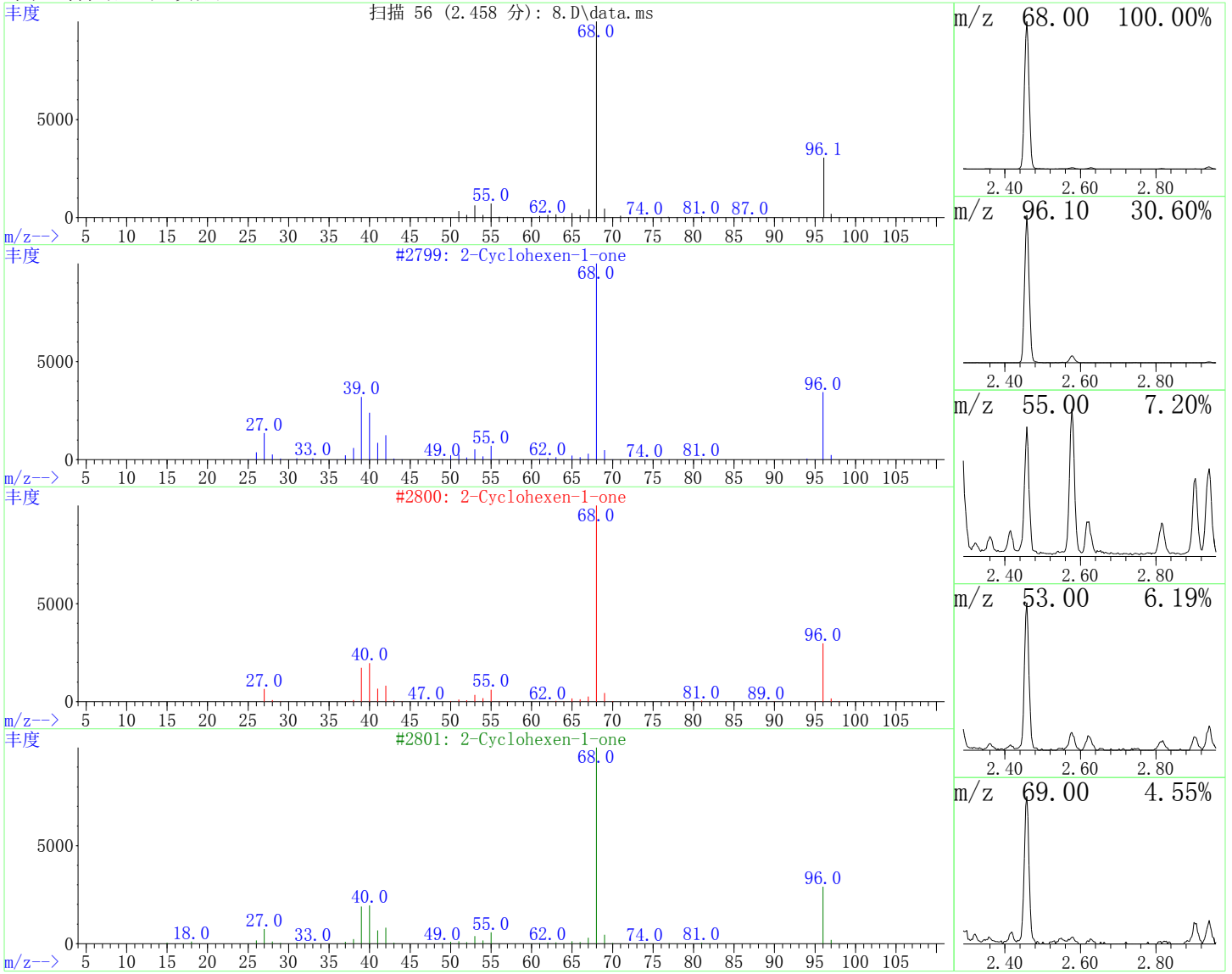
数据路径 : D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\
数据文件 : 8.D
采集 : 29 Apr 2014 16:46
操作者 :
样品 : 8
其他 :
ALS 样品瓶: 8 样品乘积因子: 1

检索库: D:\DATABASE\DEMO.L 最小匹配度: 0
C:\DATABASE\NIST11.L 最小匹配度: 0

未知谱图: 顶点
积分事件: 化学工作站积分器 - events.e



未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 1 2.458 分钟处 面积: 3973205 面积 % 3.14

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

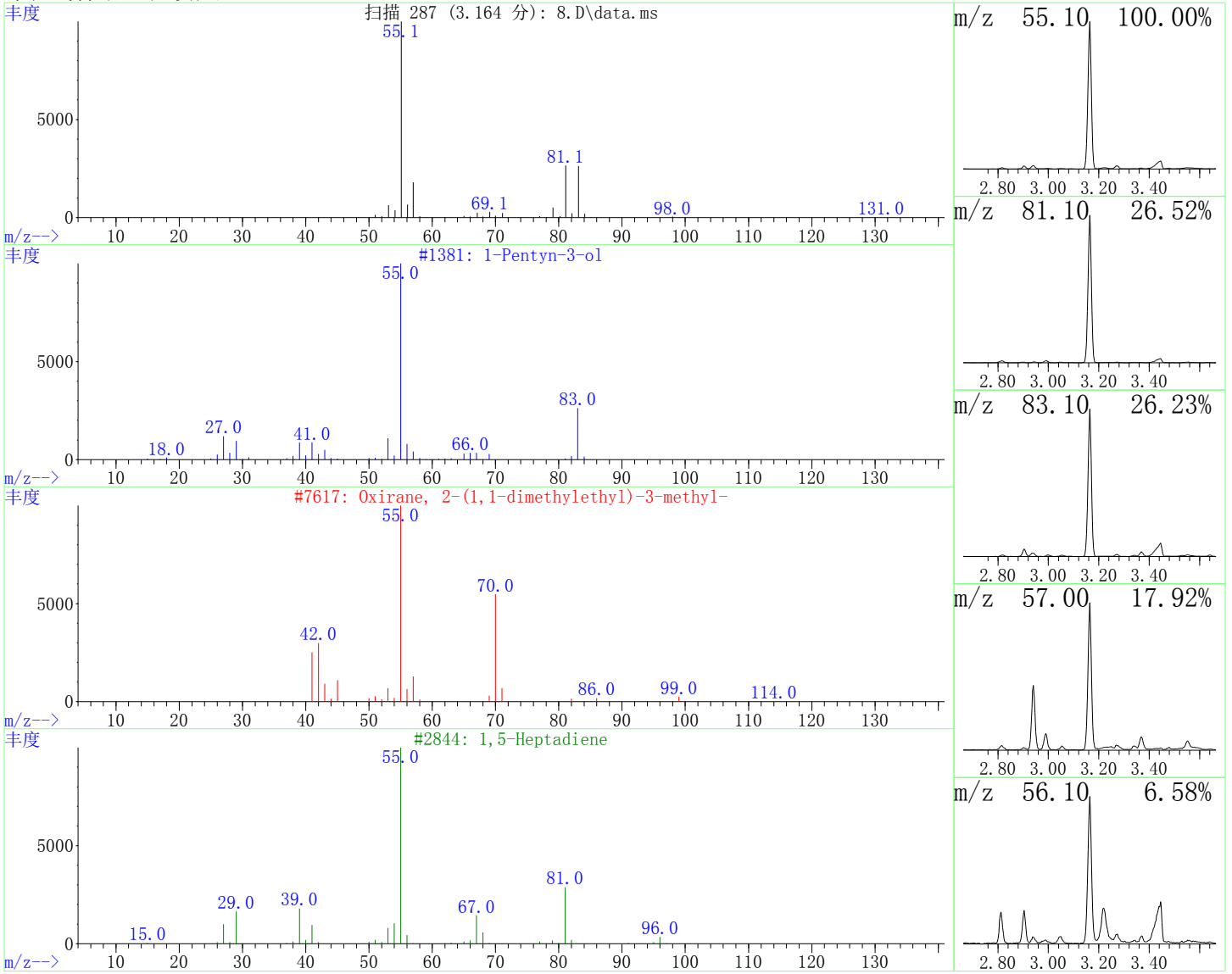
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|--------------------|------|-------------|----|
| 1 | 2-Cyclohexen-1-one | 2799 | 000930-68-7 | 90 |
| 2 | 2-Cyclohexen-1-one | 2800 | 000930-68-7 | 90 |
| 3 | 2-Cyclohexen-1-one | 2801 | 000930-68-7 | 90 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 3 3.164 分钟处 面积: 11489845 面积 % 9.07

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

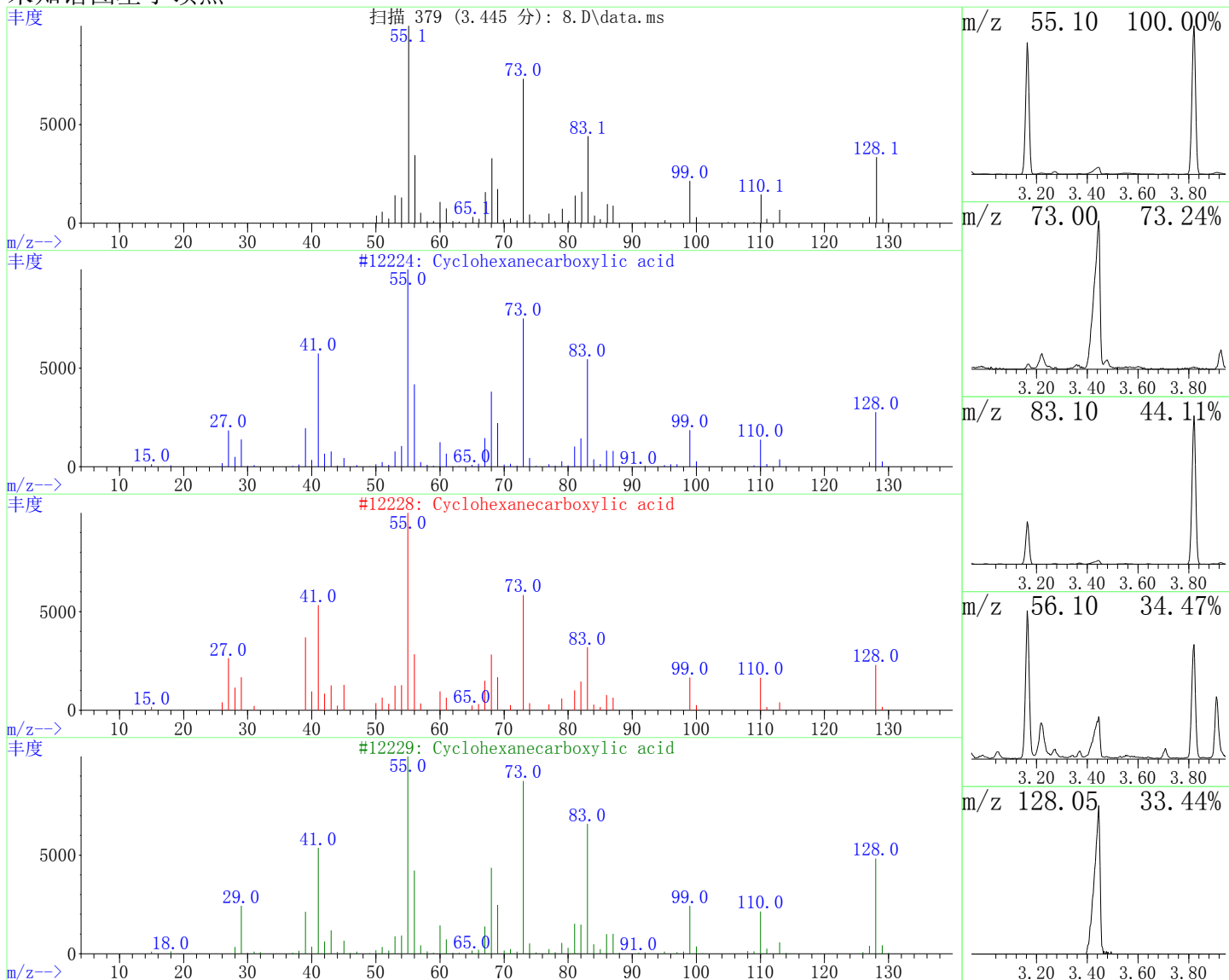
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|-------------------------------------|------|-------------|----|
| 1 | 1-Pentyn-3-ol | 1381 | 004187-86-4 | 33 |
| 2 | Oxirane, 2-(1,1-dimethylethyl)-3... | 7617 | 053897-30-6 | 23 |
| 3 | 1,5-Heptadiene | 2844 | 001541-23-7 | 17 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 4 3.445 分钟处 面积: 2700186 面积 % 2.13

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

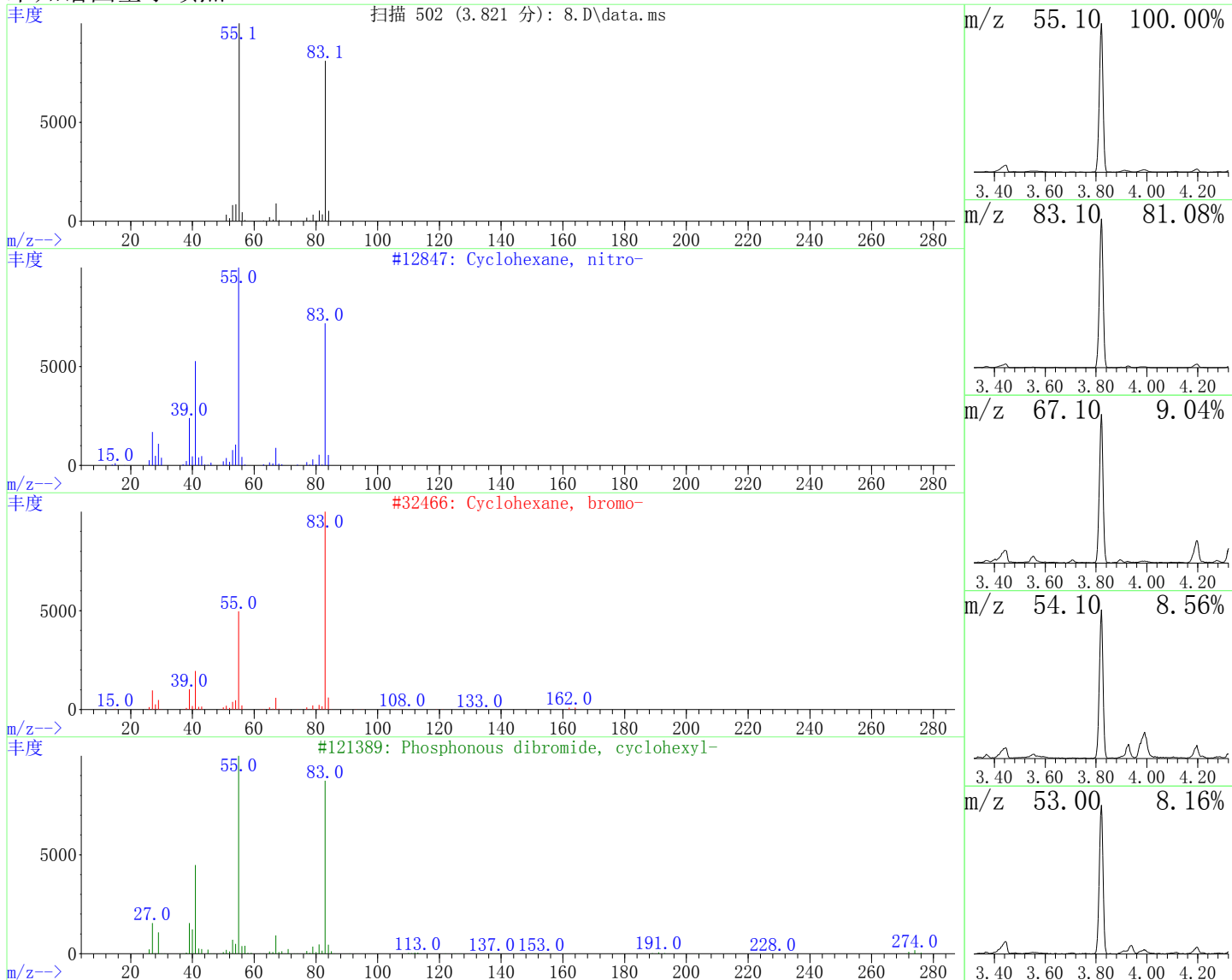
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|----------------------------|-------|-------------|----|
| 1 | Cyclohexanecarboxylic acid | 12224 | 000098-89-5 | 97 |
| 2 | Cyclohexanecarboxylic acid | 12228 | 000098-89-5 | 91 |
| 3 | Cyclohexanecarboxylic acid | 12229 | 000098-89-5 | 87 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 5 3.821 分钟处 面积: 15650168 面积 % 12.36

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

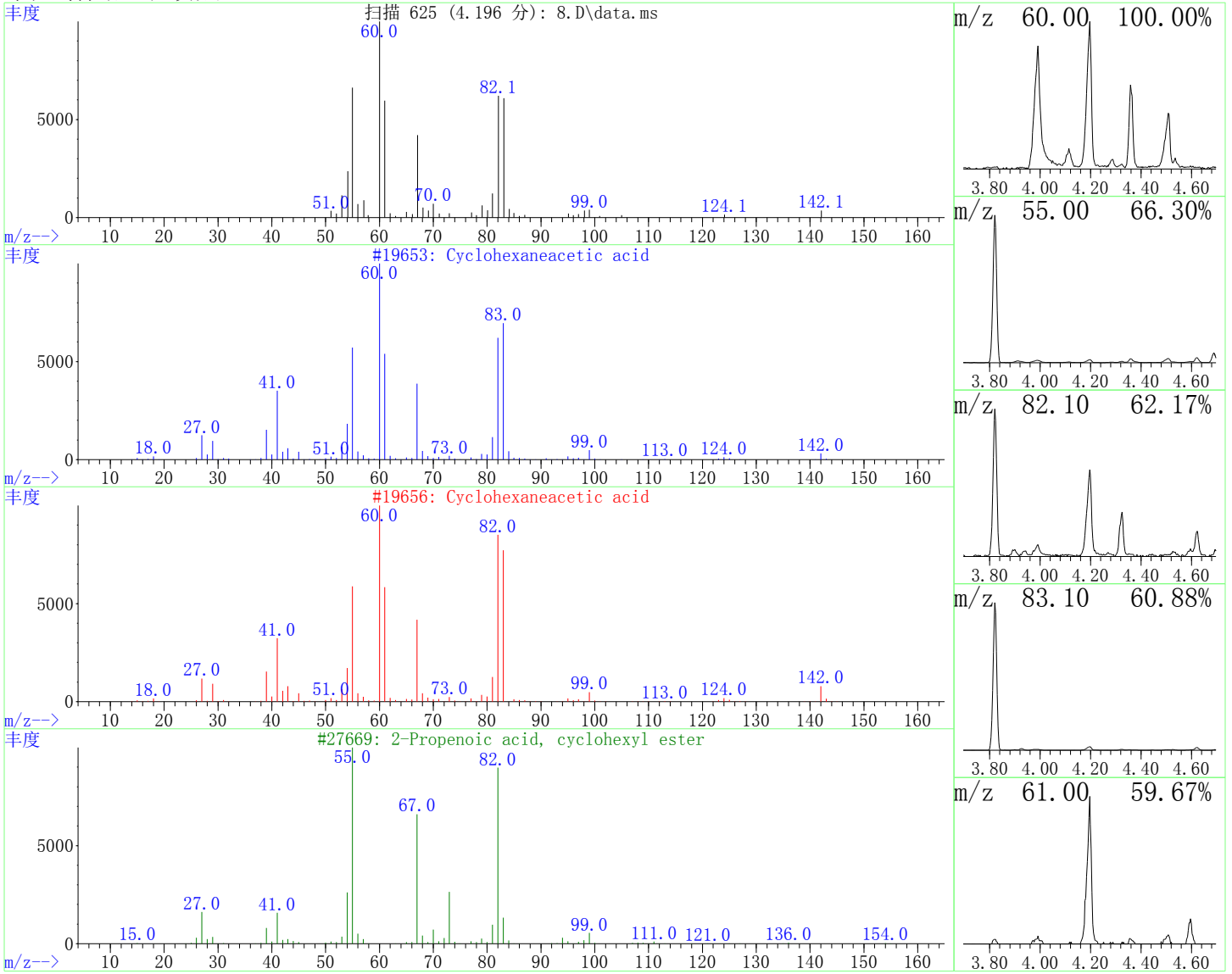
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|--------------------------------------|--------|-------------|----|
| 1 Cyclohexane, nitro- | 12847 | 001122-60-7 | 83 |
| 2 Cyclohexane, bromo- | 32466 | 000108-85-0 | 83 |
| 3 Phosphonous dibromide, cyclohexyl- | 121389 | 086012-32-0 | 74 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 6 4.196 分钟处 面积: 1457115 面积 % 1.15

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

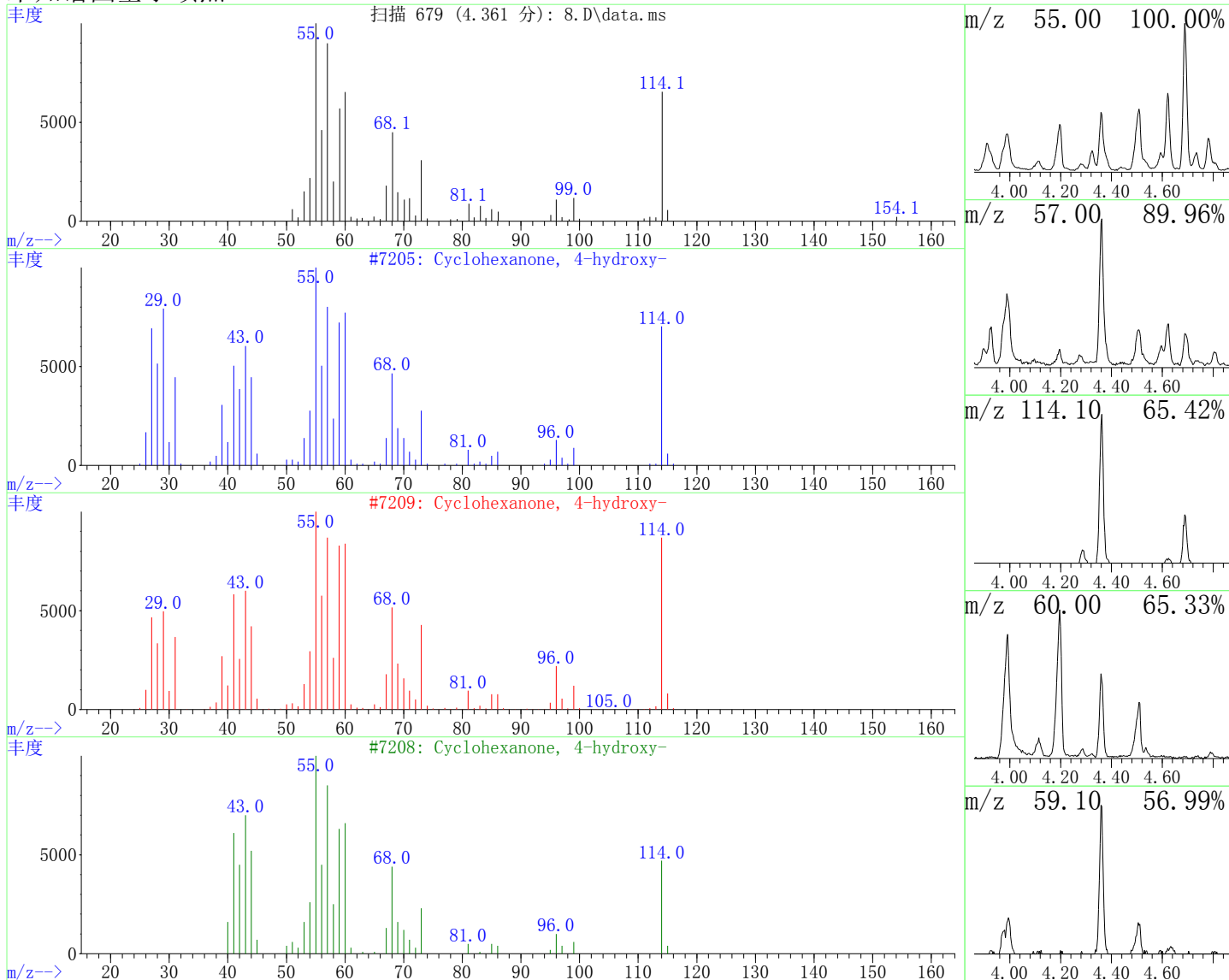
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|--------------------------------------|-------|-------------|----|
| 1 Cyclohexaneacetic acid | 19653 | 005292-21-7 | 97 |
| 2 Cyclohexaneacetic acid | 19656 | 005292-21-7 | 78 |
| 3 2-Propenoic acid, cyclohexyl ester | 27669 | 003066-71-5 | 27 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 7 4.361 分钟处 面积: 1464243 面积 % 1.16

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

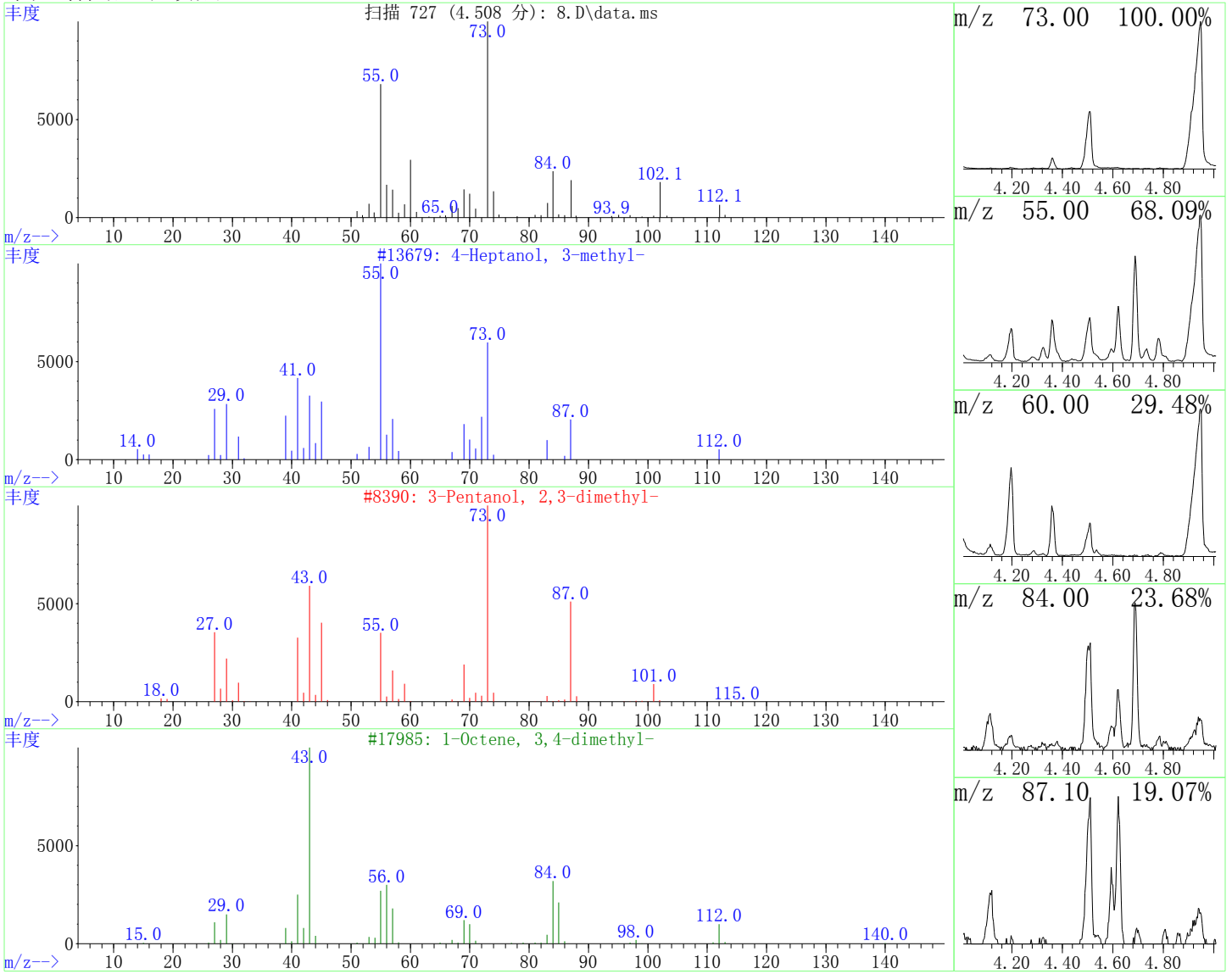
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|-----------------------------|------|-------------|----|
| 1 Cyclohexanone, 4-hydroxy- | 7205 | 013482-22-9 | 97 |
| 2 Cyclohexanone, 4-hydroxy- | 7209 | 013482-22-9 | 80 |
| 3 Cyclohexanone, 4-hydroxy- | 7208 | 013482-22-9 | 64 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 8 4.508 分钟处 面积: 1741486 面积 % 1.38

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

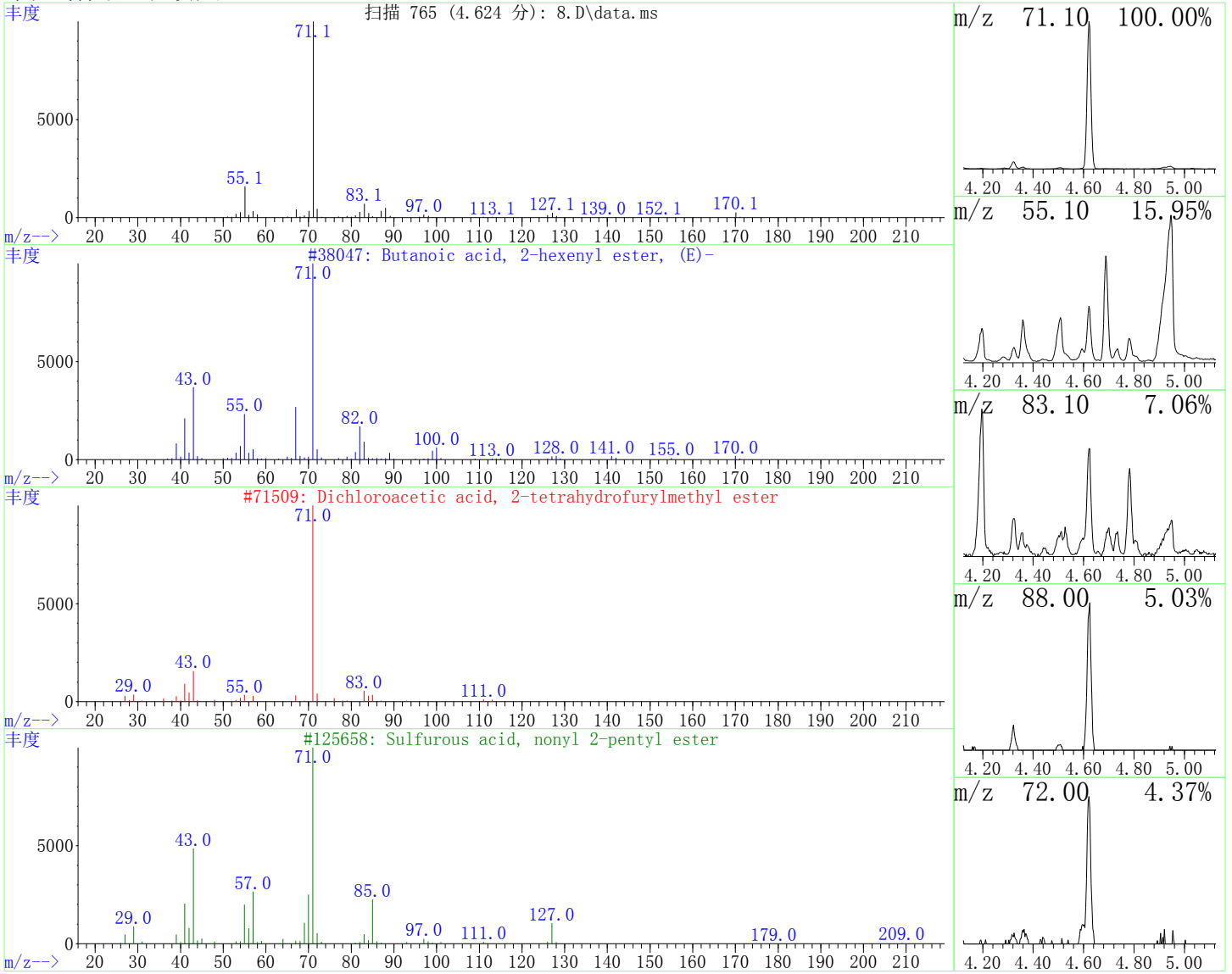
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|---------------------------|-------|-------------|----|
| 1 | 4-Heptanol, 3-methyl- | 13679 | 001838-73-9 | 38 |
| 2 | 3-Pentanol, 2,3-dimethyl- | 8390 | 000595-41-5 | 35 |
| 3 | 1-Octene, 3,4-dimethyl- | 17985 | 056728-11-1 | 22 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 9 4.624 分钟处 面积: 2774519 面积 % 2.19

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

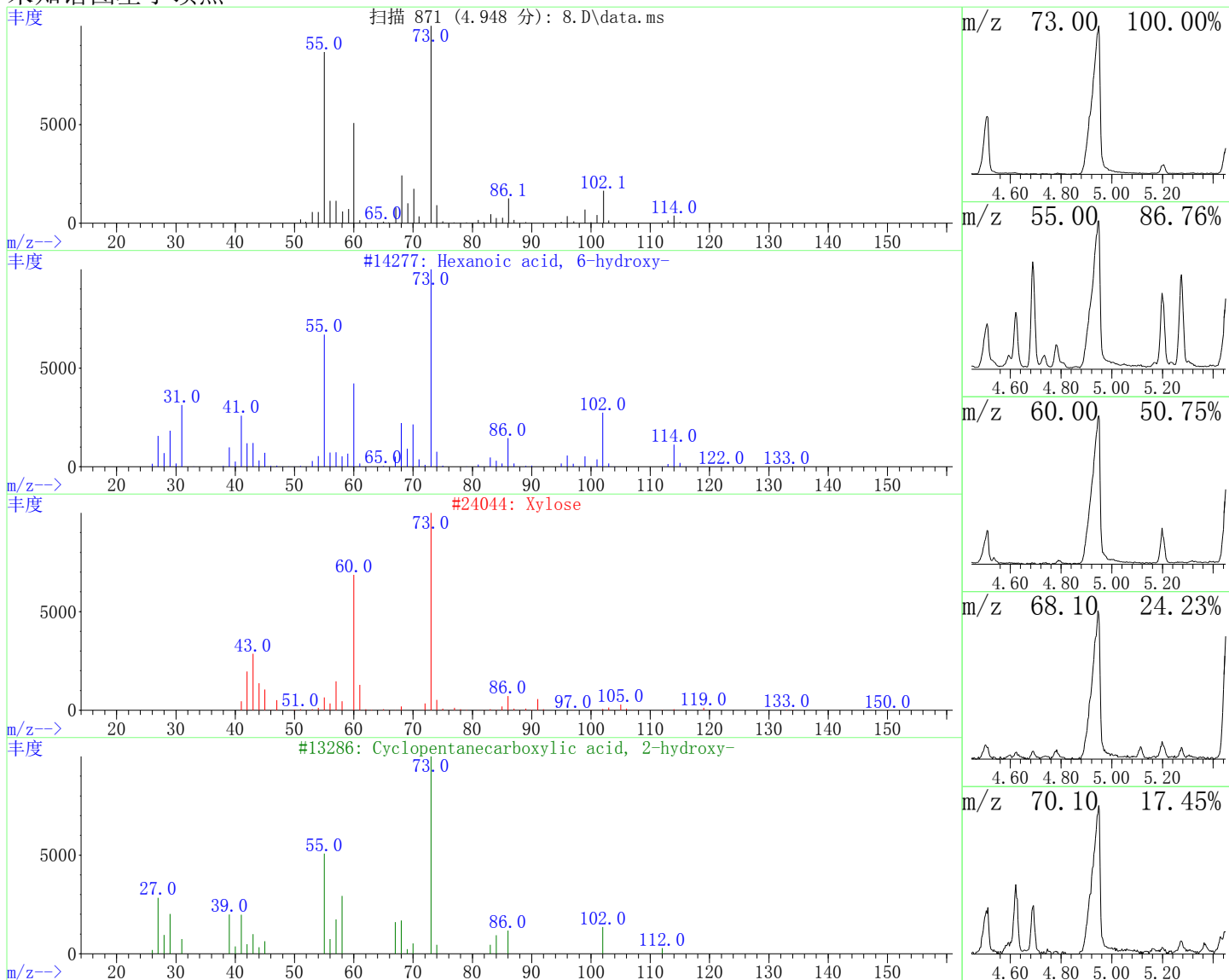
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | |
|---------------------------------------|---------------------|----|
| 1 Butanoic acid, 2-hexenyl ester, ... | 38047 053398-83-7 | 39 |
| 2 Dichloroacetic acid, 2-tetrahydr... | 71509 004697-00-1 | 39 |
| 3 Sulfurous acid, nonyl 2-pentyl e... | 125658 1000309-15-8 | 39 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 10 4.948 分钟处 面积: 6431080 面积 % 5.08

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

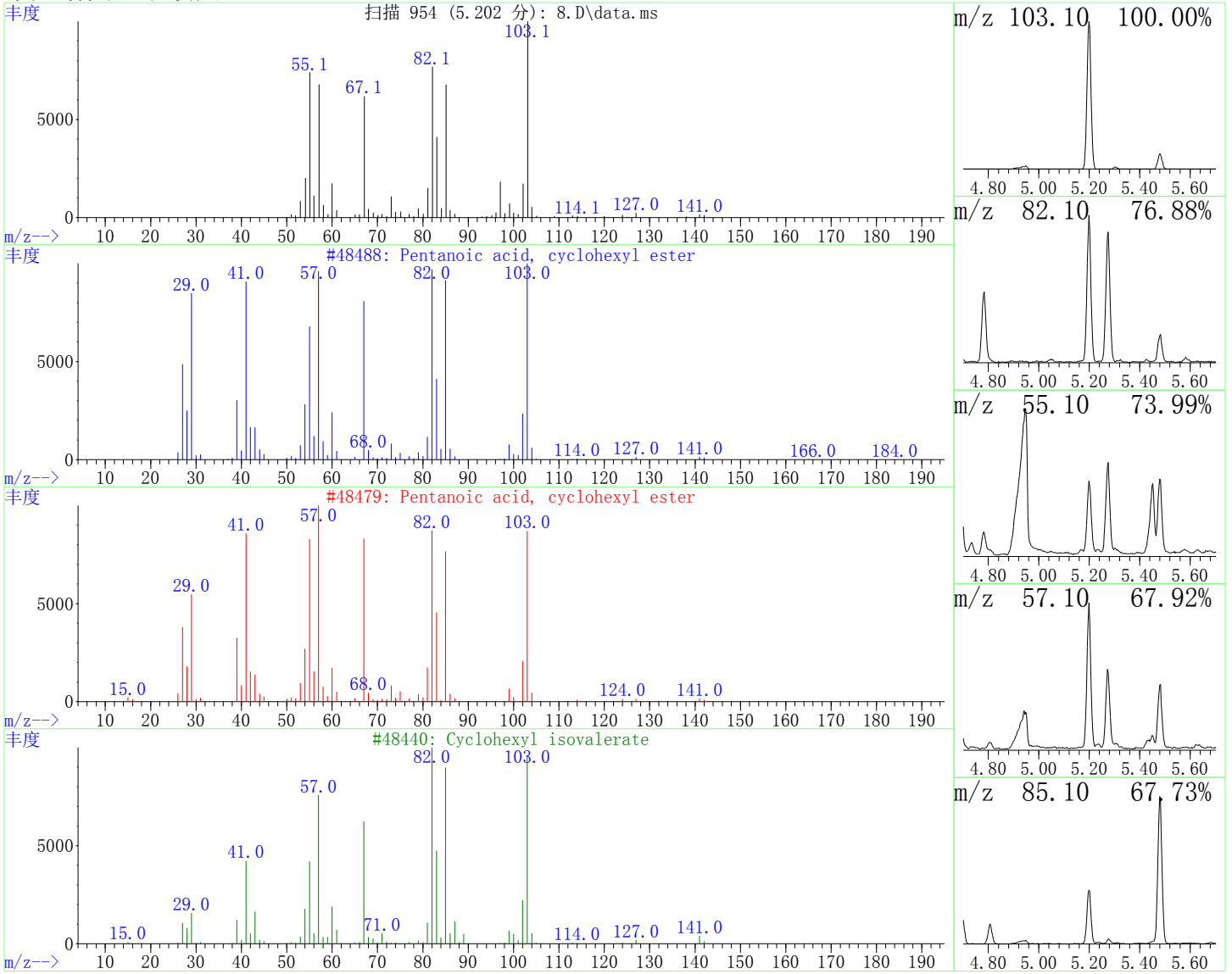
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|---------------------------------------|-------|-------------|----|
| 1 Hexanoic acid, 6-hydroxy- | 14277 | 001191-25-9 | 53 |
| 2 Xylose | 24044 | 000058-86-6 | 32 |
| 3 Cyclopentanecarboxylic acid, 2-h... | 13286 | 081887-89-0 | 32 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 11 5.202 分钟处 面积: 3273767 面积 % 2.59

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

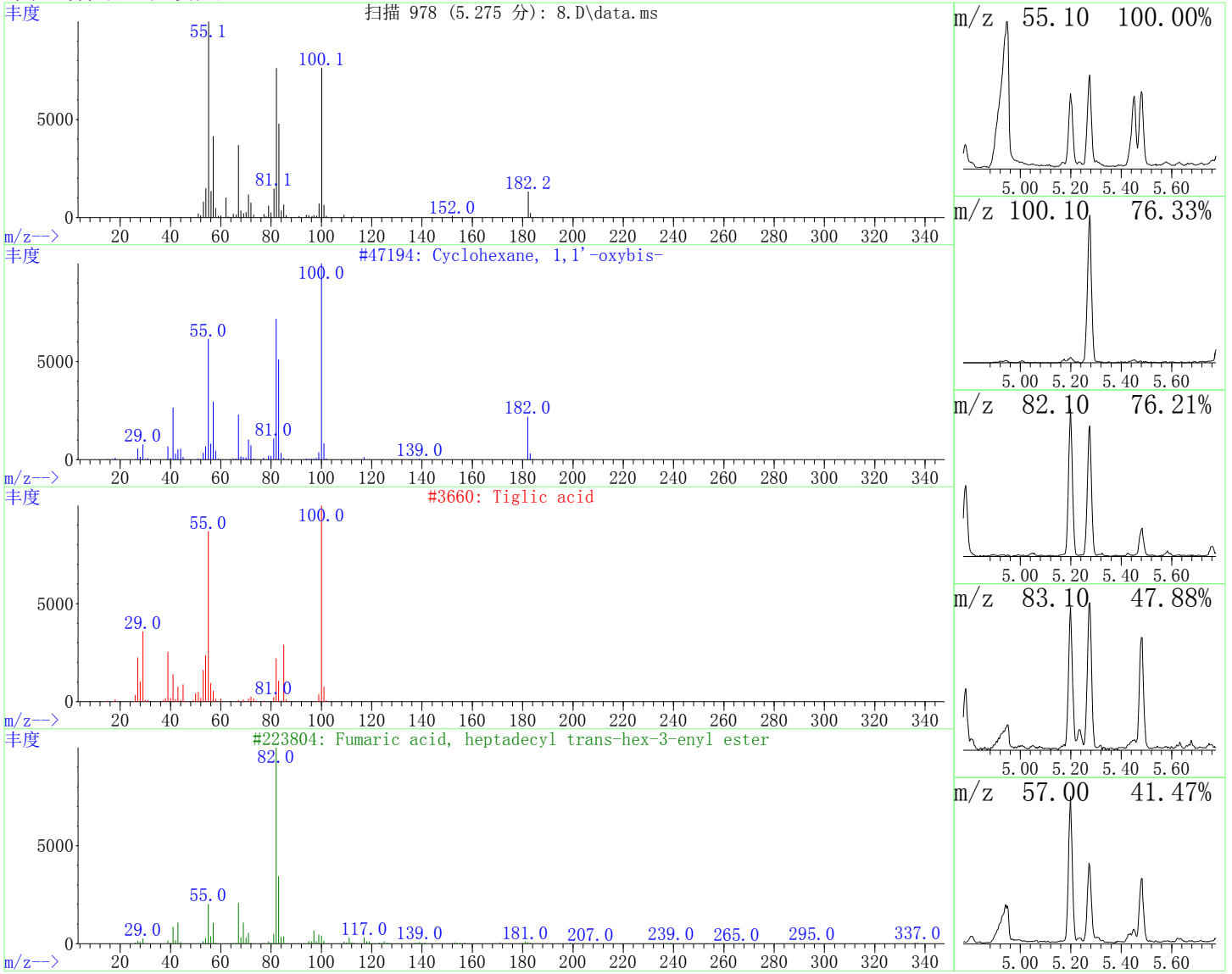
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | | |
|---|----------------------------------|-------|-------------|----|
| 1 | Pentanoic acid, cyclohexyl ester | 48488 | 001551-43-5 | 87 |
| 2 | Pentanoic acid, cyclohexyl ester | 48479 | 001551-43-5 | 81 |
| 3 | Cyclohexyl isovalerate | 48440 | 007774-44-9 | 80 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 12 5.275 分钟处 面积: 2493456 面积 % 1.97

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

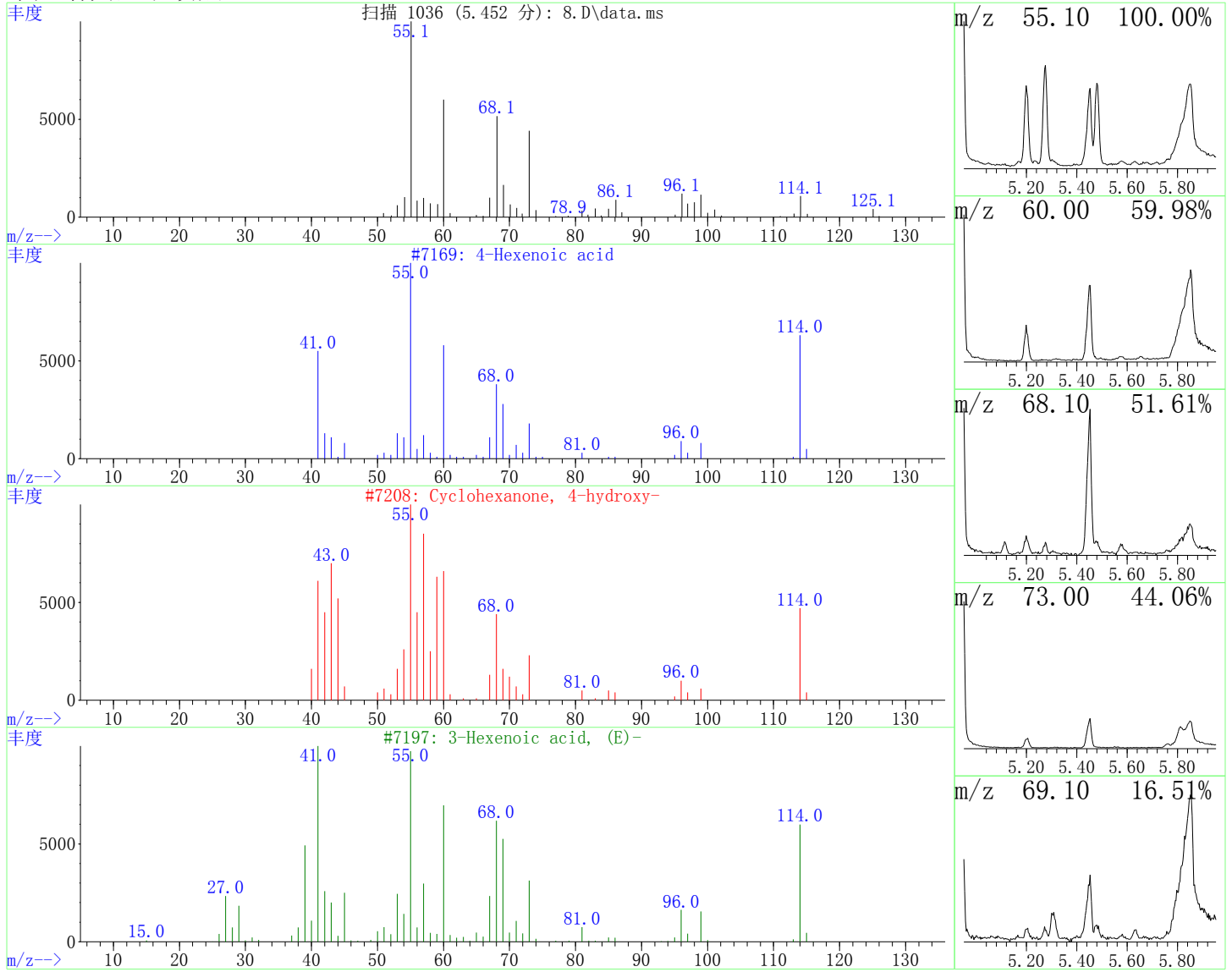
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|---------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 Cyclohexane, 1,1'-oxybis- | 47194 | 004645-15-2 | 93 |
| 2 Tiglic acid | 3660 | 000080-59-1 | 38 |
| 3 Fumaric acid, heptadecyl trans-h... | 223804 | 1000348-89-7 | 35 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 13 5.452 分钟处 面积: 1610644 面积 % 1.27

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

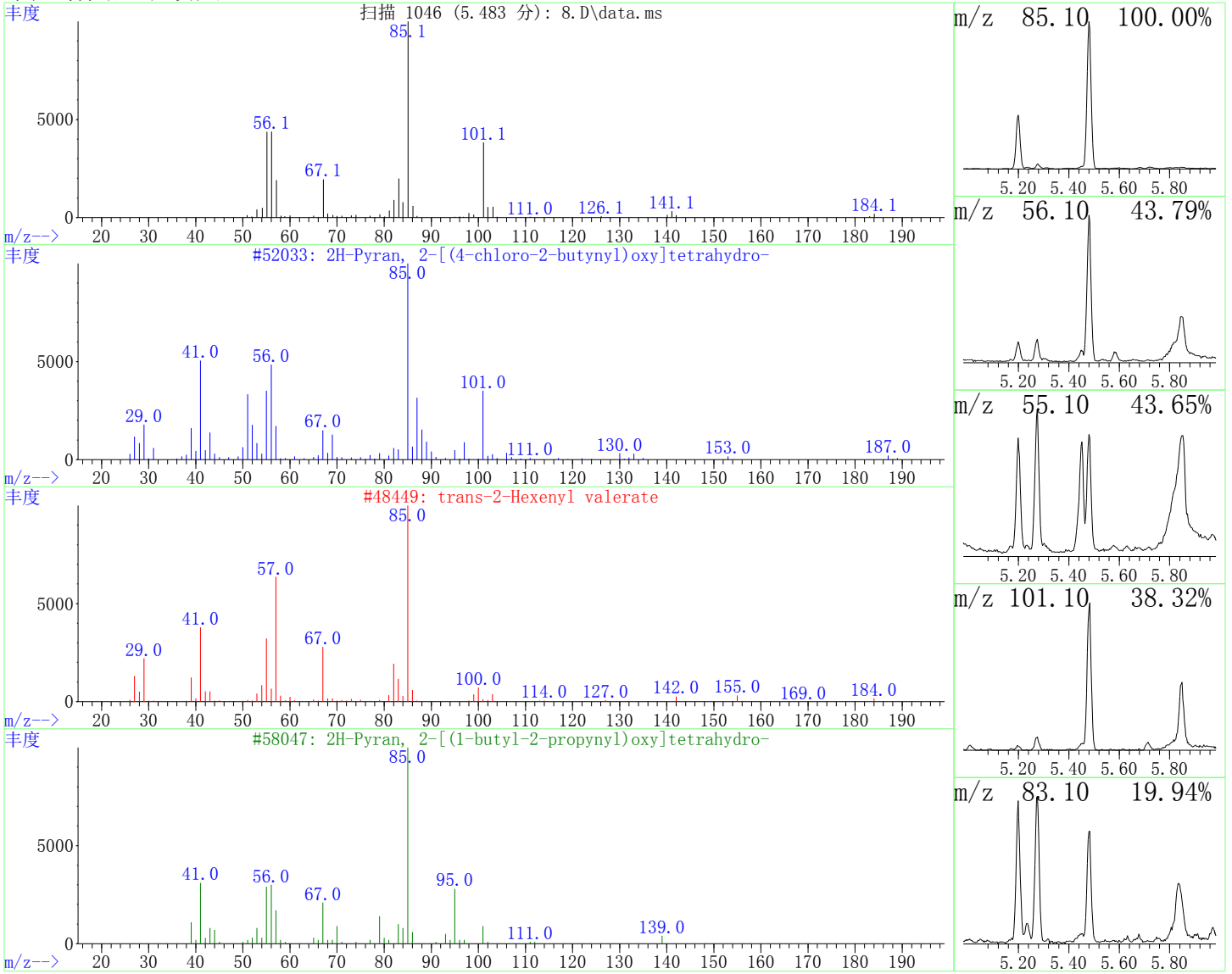
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|---------------------------|------|-------------|----|
| 1 | 4-Hexenoic acid | 7169 | 035194-36-6 | 83 |
| 2 | Cyclohexanone, 4-hydroxy- | 7208 | 013482-22-9 | 64 |
| 3 | 3-Hexenoic acid, (E)- | 7197 | 001577-18-0 | 64 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 14 5.483 分钟处 面积: 2943356 面积 % 2.32

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

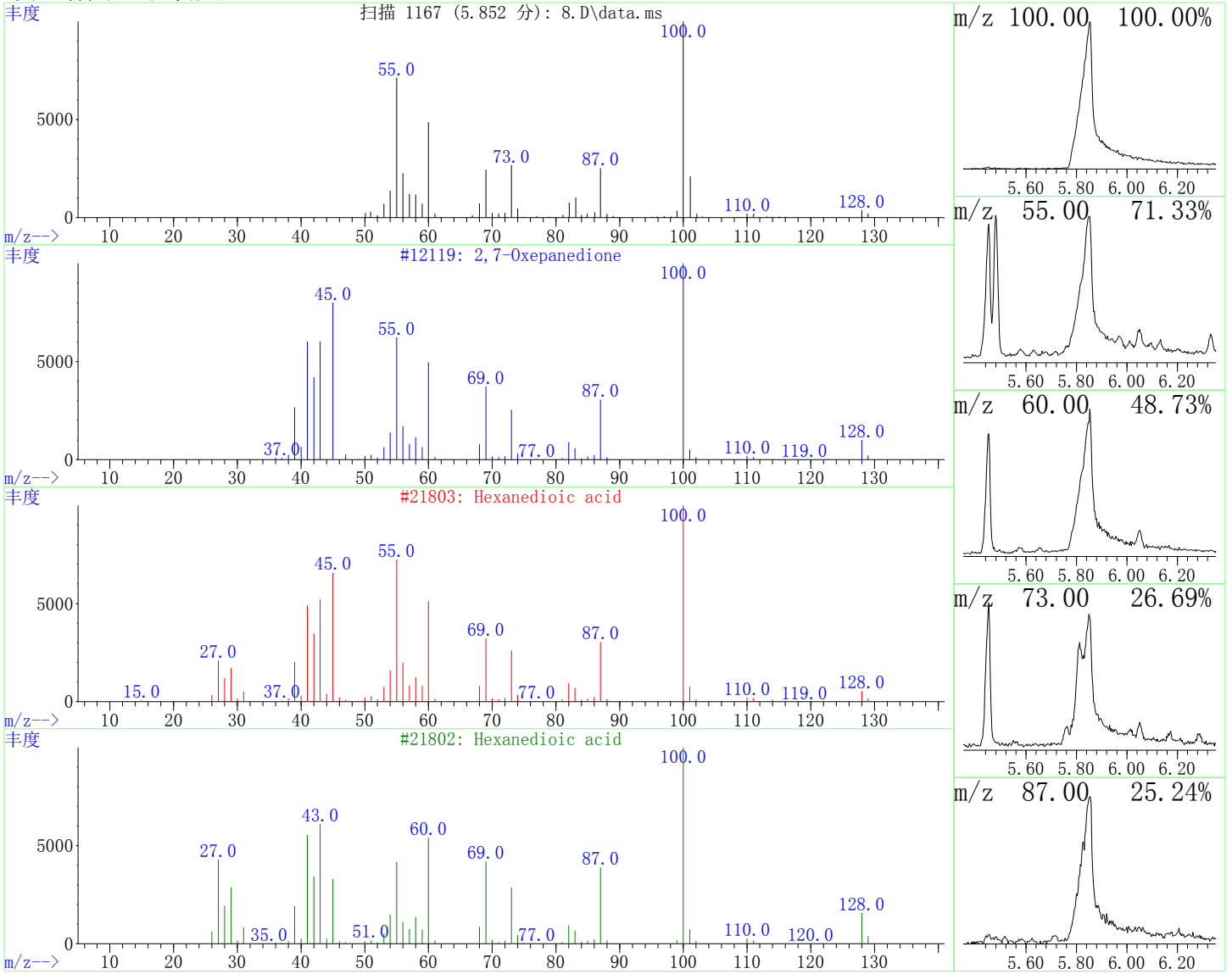
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | | |
|---|--|-------|-------------|----|
| 1 | 2H-Pyran, 2-[(4-chloro-2-butynyl)oxy]tetrahydro- | 52033 | 067727-01-9 | 50 |
| 2 | trans-2-Hexenyl valerate | 48449 | 056922-74-8 | 43 |
| 3 | 2H-Pyran, 2-[(1-butyl-2-propynyl)oxy]tetrahydro- | 58047 | 000831-83-4 | 42 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 15 5.852 分钟处 面积: 6158234 面积 % 4.86

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

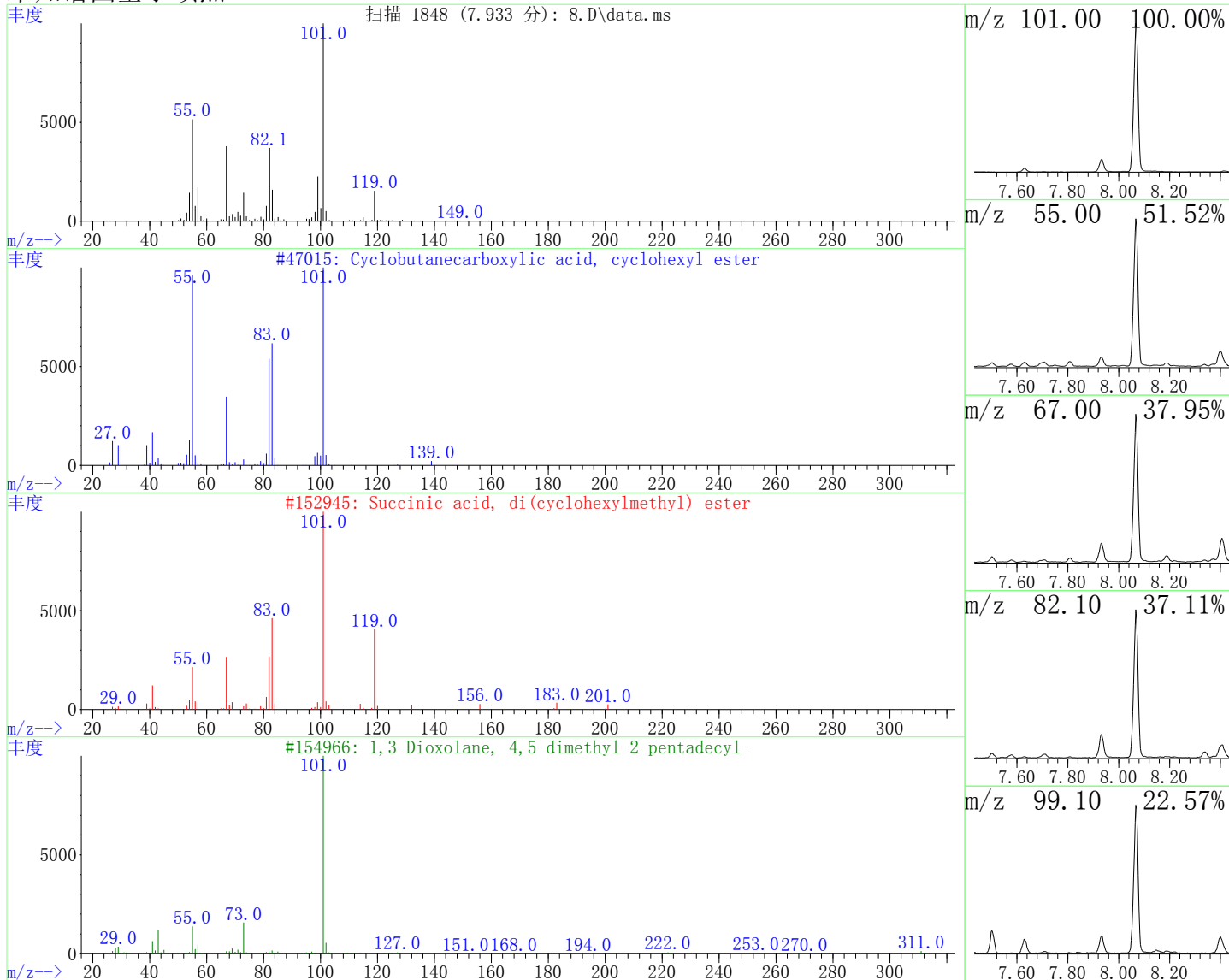
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|------------------|-------|-------------|----|
| 1 | 2,7-Oxepanedione | 12119 | 002035-75-8 | 64 |
| 2 | Hexanedioic acid | 21803 | 000124-04-9 | 50 |
| 3 | Hexanedioic acid | 21802 | 000124-04-9 | 42 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 16 7.933 分钟处 面积: 2045648 面积 % 1.62

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

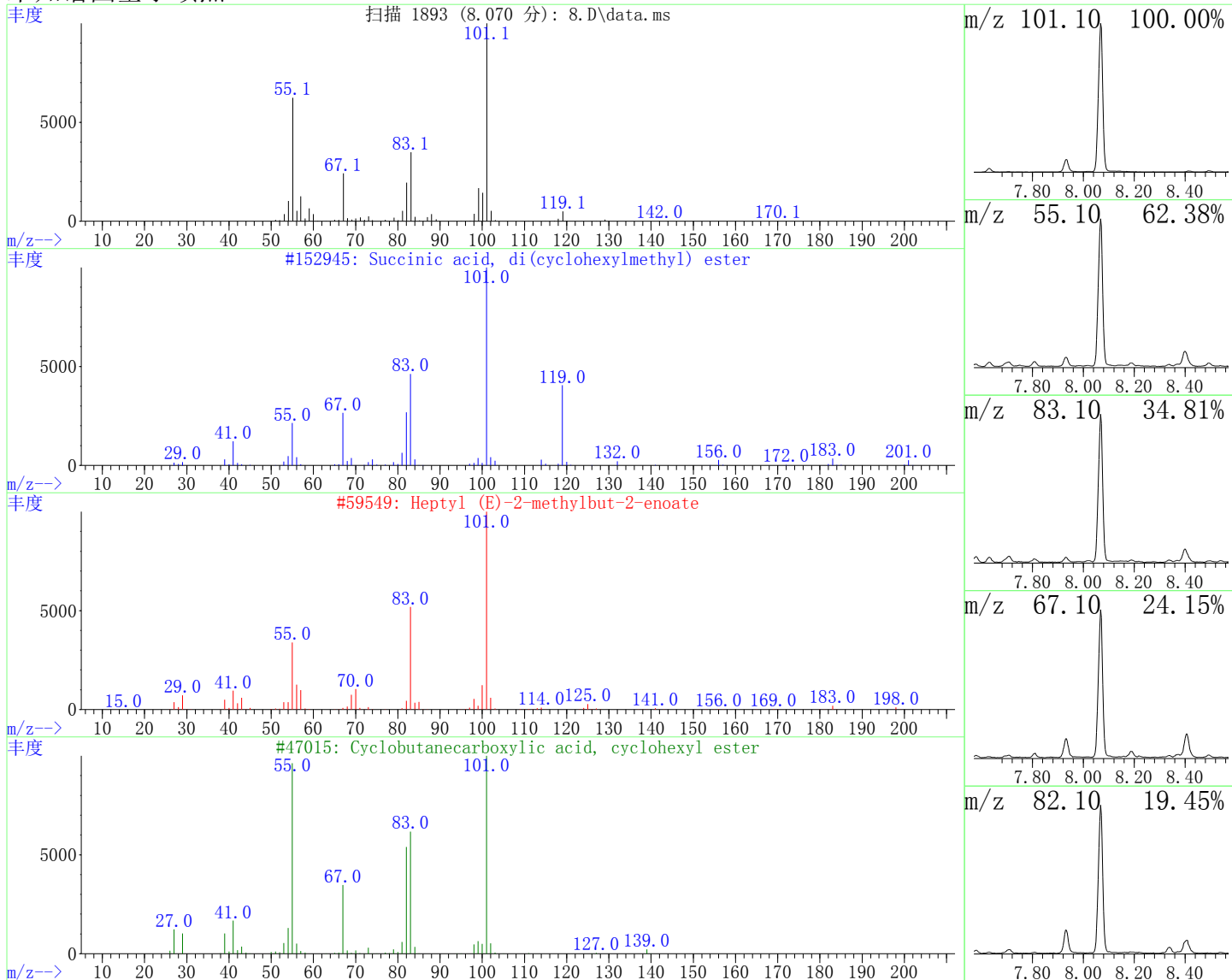
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|---------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 Cyclobutanecarboxylic acid, cycl... | 47015 | 1000282-60-7 | 53 |
| 2 Succinic acid, di(cyclohexylmeth... | 152945 | 1000325-83-4 | 45 |
| 3 1,3-Dioxolane, 4,5-dimethyl-2-pe... | 154966 | 056599-61-2 | 43 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 17 8.070 分钟处 面积: 23482636 面积 % 18.54

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

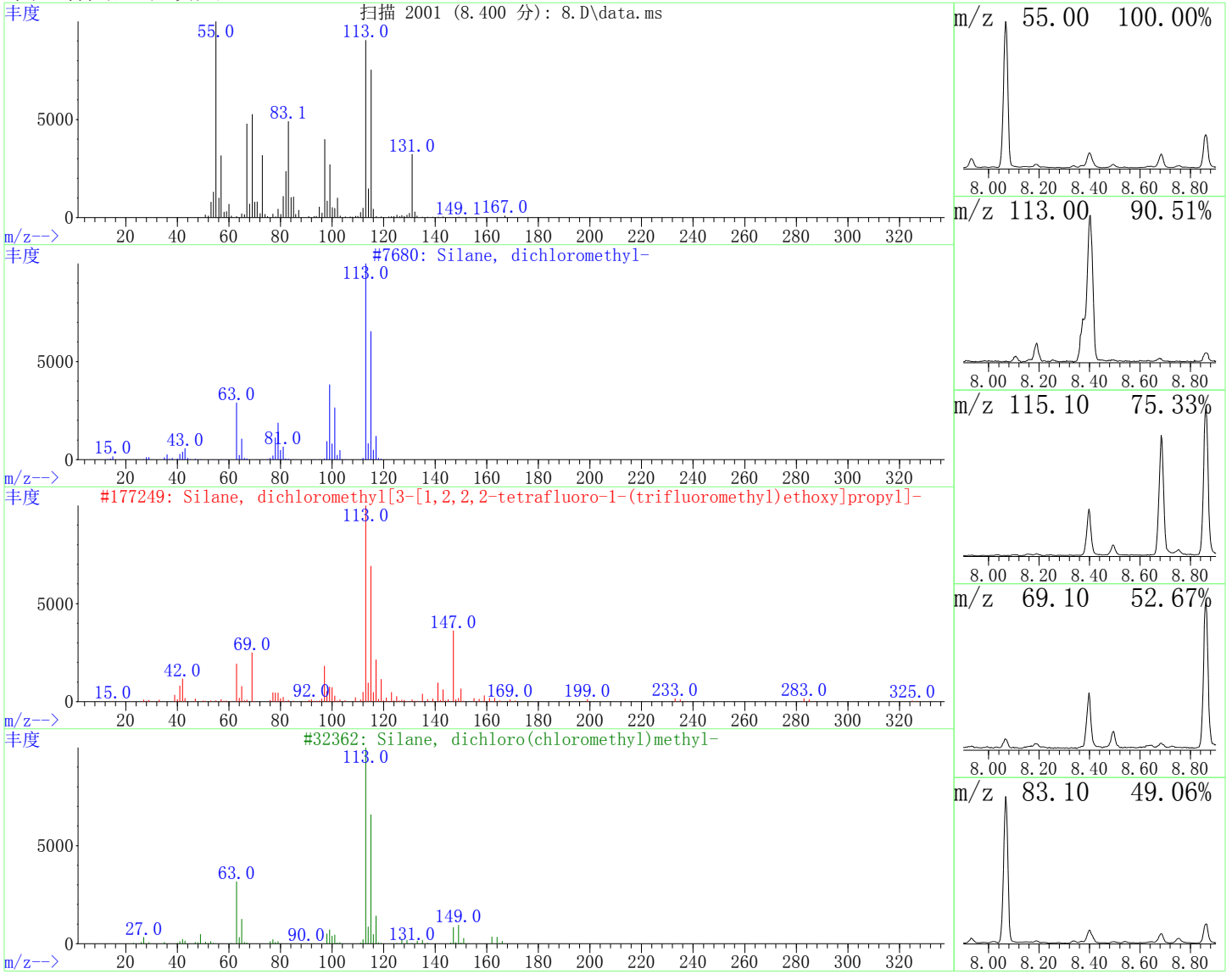
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | | |
|---|-------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 | Succinic acid, di(cyclohexylmeth... | 152945 | 1000325-83-4 | 64 |
| 2 | Heptyl (E)-2-methylbut-2-enoate | 59549 | 1000373-73-8 | 42 |
| 3 | Cyclobutanecarboxylic acid, cycl... | 47015 | 1000282-60-7 | 37 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 18 8.400 分钟处 面积: 5020177 面积 % 3.96

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

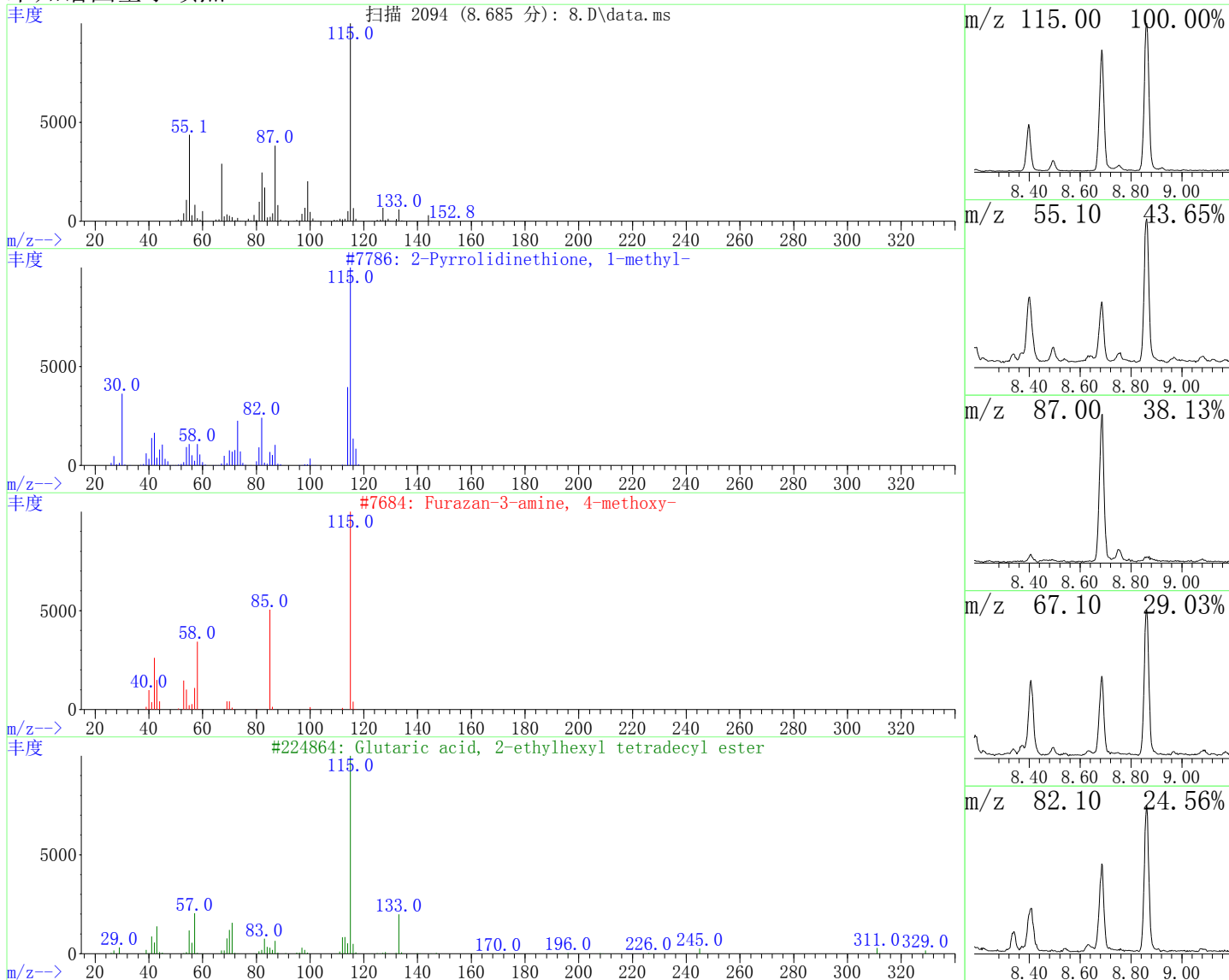
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

| | | | | |
|---|-------------------------------------|--------|-------------|----|
| 1 | Silane, dichloromethyl- | 7680 | 000075-54-7 | 38 |
| 2 | Silane, dichloromethyl[3-[1,2,2,... | 177249 | 020006-68-2 | 38 |
| 3 | Silane, dichloro(chloromethyl)me... | 32362 | 001558-33-4 | 35 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
样品: 8

峰编号: 19 8.685 分钟处 面积: 4041965 面积 % 3.19

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

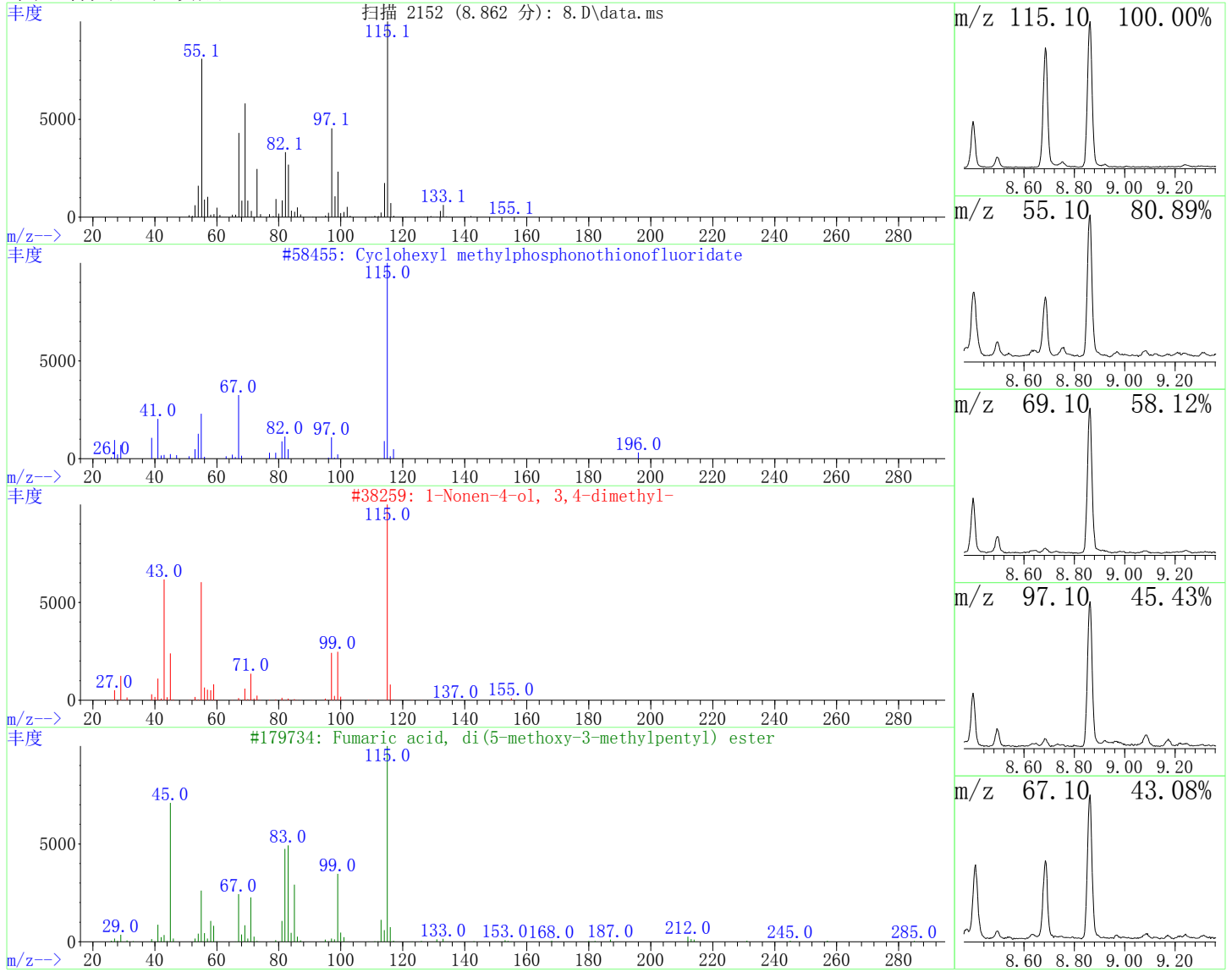
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | | |
|---|-------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 | 2-Pyrrolidinethione, 1-methyl- | 7786 | 010441-57-3 | 32 |
| 2 | Furazan-3-amine, 4-methoxy- | 7684 | 078350-48-8 | 27 |
| 3 | Glutaric acid, 2-ethylhexyl tetr... | 224864 | 1000358-24-6 | 25 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 20 8.862 分钟处 面积: 7686124 面积 % 6.07

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

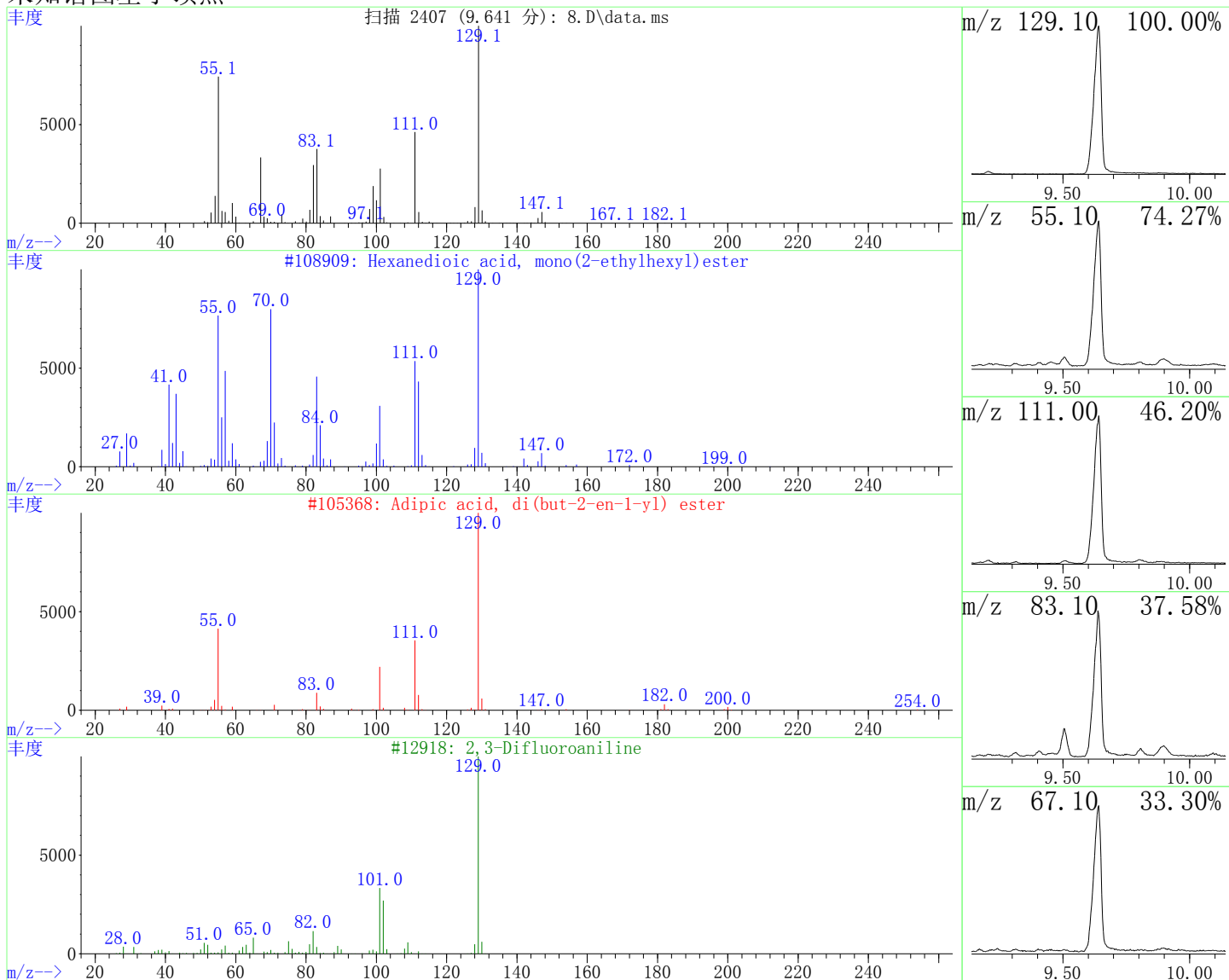
Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|---------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 Cyclohexyl methylphosphonothiono... | 58455 | 004241-34-3 | 37 |
| 2 1-Nonen-4-ol, 3,4-dimethyl- | 38259 | 1000164-23-5 | 32 |
| 3 Fumaric acid, di(5-methoxy-3-met... | 179734 | 1000330-65-7 | 32 |

未知谱图基于顶点



Data File: D:\msdchem\1\data\徐雄发\方岩雄-肖业鹏\8.D
 样品: 8

峰编号: 21 9.641 分钟处 面积: 18738765 面积 % 14.80

每个谱库中 3 个最匹配的记录。

Ref\# CAS\# 匹配度

D:\DATABASE\DEMO.L 未检索到匹配。

C:\DATABASE\NIST11.L

- | | | | |
|---------------------------------------|--------|--------------|----|
| 1 Hexanedioic acid, mono(2-ethylhe... | 108909 | 004337-65-9 | 72 |
| 2 Adipic acid, di(but-2-en-1-yl) e... | 105368 | 1000324-71-1 | 40 |
| 3 2,3-Difluoroaniline | 12918 | 004519-40-8 | 38 |