
TRABAJO FIN DE GRADO

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Agronómica

Universidad Politécnica de Cartagena

Análisis de emisión de volátiles en
Arabidopsis thaliana. Efecto de la
sobrexpresión del gen *CrDOF*



Grado en Ingeniería Agroalimentaria y de Sistemas Biológicos

Autora: María del Carmen López Guerrero

Director: Marcos Egea Gutiérrez-Cortines

Codirectora: M^a Victoria Ruiz Hernández

Cartagena, septiembre de 2015

*La vida es un juego que emana
en el que vences y no pierdes,
pues de tanto perder aprendes,
y si aprendes, también ganas.*

*Jugando, tantas veces he caído,
tantas, como me he levantado,
pues la vida es solo un dado
que te da tu merecido.*

*Un juego para todas las edades,
creo saber cómo vivirlo:
caigo, me levanto y no me rindo.*

*Superé tantas adversidades,
que ya no sé cómo decirlo,
por eso callo, aprendo y brindo.*

Raúl López Guerrero

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar agradecer a mi director del proyecto, el Dr. Marcos Egea Gutiérrez-Cortines, y a mi codirectora, M^a Victoria Ruiz Hernández, por ser unos grandes profesionales al igual que personas, ayudarme en todo momento y enseñarme tanto del maravilloso mundo de la genética molecular.

A todo el equipo del Laboratorio de genética molecular del Instituto de Biotecnología Vegetal, en especial a la Dra. Julia Weiss, Marina y Marta.

Darle las gracias a la Dra. M^a José Roca del SAIT, por todo lo que me ha enseñado y me ha ayudado con el cromatógrafo, sin ella no hubiera sido posible este trabajo.

Al Dr. Federico Valverde por las líneas de *Arabidopsis*. Proyecto BFU-2013 -45148-R.

A mis padres, por todos los desvelos, los cuidados, la educación y el cariño que he recibido, sin ellos no sería lo que soy. A mi madre, por ser una gran mujer, fuerte y luchadora, que me ha dado mucho amor y comprensión en esta etapa de mi vida, gracias por confiar siempre en mí. A mi padre, por todo lo que ha trabajado para poder verme donde estoy. Por fin ha conseguido uno de sus sueños, el de tener una hija ingeniera. Nunca olvidaré todo lo que me ha ayudado y me ha enseñado de esta preciosa rama de la ingeniería.

A mi hermano Raúl, por ser el primero que sabía que llegaría donde estoy, y confiaba desde el principio en mí. Estoy muy orgullosa de él y sé que llegará donde se proponga.

A Salvador Roca, que ha sido mi apoyo, mi aliento y un pilar fundamental durante este periodo universitario, sin duda una de las mejores personas que conozco y que más quiero. Agradecerle por haberme ayudado tanto en este proyecto, por animarme en mis momentos de debilidad y por regalarme siempre una sonrisa.

A mis amigos, que en estos 4 años de universidad se han convertido en mi pequeña familia de Cartagena, en especial agradecer a mi mejor amiga Paloma Martínez por estar siempre a mi lado en estos años y convertirse en una persona muy importante para mí.

A mis seres queridos que se fueron, pero que están siempre conmigo en mi corazón.

Este trabajo que con tanta ilusión he realizado, se lo quiero dedicar a la mujer más fuerte, maravillosa, alegre, tierna, luchadora y buena que he conocido, mi abuelita Antonia, que se fue pero que siempre estará a mi lado. Ella ha sido la fuerza y mi motivo estos meses para realizar este proyecto. Te quiero abuelita.

ÍNDICE

1	Resumen	11
2	Abstract	13
3	Introducción	15
3.1	<i>Arabidopsis thaliana</i> , su importancia genética	15
3.2	Reloj circadiano	16
3.3	Factores de transcripción DOF	16
3.4	Volátiles en plantas	18
4	Objetivo.....	21
5	Material y Métodos	23
5.1	Material vegetal.....	23
5.2	Propagación de las semillas	24
5.3	Análisis de volátiles.....	25
5.3.1	Análisis experimental	25
5.3.2	Cromatografía	28
5.4	Análisis estadístico	29
6	Resultados	31
6.1	Material vegetal.....	31
6.2	Optimizado de metodología de análisis de emisión de volátiles en <i>A. thaliana</i>	31
6.3	Análisis de Volátiles de Hoja en <i>A. thaliana</i>	32

6.3.1	Hexanal	37
6.3.2	(E)-2-Hexenal.....	39
6.3.3	Benzaldehído	41
6.3.4	β -Cyclocitral.....	43
6.3.5	β -Ionona.....	45
6.3.6	Dihydroactinidiolide.....	47
7	Discusión.....	51
7.1	Aldehídos	51
7.2	Apocarotenoides	53
7.3	Emisión de volátiles en ritmo circadiano	54
7.4	Observaciones generales.....	55
8	Conclusión	57
9	Bibliografía	59
	ANEXO I	63
	Pico cromatográfico del patrón de Metil Jasmonato comparado con cromatogramas de las muestras analizadas	63
	ANEXO II.....	65
	Cromatograma de los volátiles analizados en las líneas transgénicas frente a Col-0.....	65
	ANEXO III	71
	Ejemplo de perfil de volátiles: línea Col-0_1 en el punto de muestreo A (08:00h a 14:00h)	71

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Construcciones desarrolladas en el grupo del Dr. Federico Valverde para la sobreexpresión del gen <i>CrDOF</i>	23
Tabla 2. Puntos de muestreo en el ensayo de 24h.	25
Tabla 3. Peso de cada línea (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).	26
Tabla 4. Volátiles más relevantes emitidos en las líneas estudiadas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>).....	33
Tabla 5. Volátiles mayoritarios que se emiten en todas las líneas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) y cuya calidad es mayor de 80%.....	33
Tabla 6. Volátiles mayoritarios que se emiten en todas las líneas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) y cuya calidad es mayor de 80%. Fuente: NIST (National Institute of Standards and Technology).....	35
Tabla 7. Media de las áreas y desviación típica de cada línea. Análisis estadístico del compuesto Hexanal entre las líneas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).	37
Tabla 8. Análisis estadístico del compuesto Hexanal entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>).....	38
Tabla 9. Media de las áreas y desviación típica del compuesto (E)-2-Hexenal para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....	39
Tabla 10. Análisis estadístico del compuesto (E)-2-Hexenal entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>).....	40
Tabla 11. Media de las áreas y desviación típica del compuesto Benzaldehído para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> y <i>CrDOF3</i>) para cada	

punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....41

Tabla 12. Análisis estadístico del compuesto Benzaldehído entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).....42

Tabla 13. Media de las áreas y desviación típica del compuesto β -Cyclocitral para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....43

Tabla 14. Análisis estadístico del compuesto β -Cyclocitral entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).....44

Tabla 15. Media de las áreas y desviación típica del compuesto β -Ionona para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h)..45

Tabla 16. Análisis estadístico del compuesto β -Ionona entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).....46

Tabla 17. Media de las áreas y desviación típica del compuesto Dihydroactinidiolide para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....47

Tabla 18. Análisis estadístico del compuesto Dihydroactinidiolide entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).48

ÍNDICE DE GRÁFICOS

- Gráfico 1. Áreas integradas del compuesto Hexanal de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....38
- Gráfico 2 Áreas integradas del compuesto (E)-2-Hexenal de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....40
- Gráfico 3. Áreas integradas del compuesto Benzaldehído de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....42
- Gráfico 4. Áreas integradas del compuesto β -Cyclocitral de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).....44
- Gráfico 5. Áreas integradas del compuesto β -Ionona de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h)..... 46
- Gráfico 6. Áreas integradas del compuesto Dihydroactinidiolide de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h)..... 48

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. a) Las 4 líneas (<i>Col-0</i> , <i>CrDOF1</i> , <i>CrDOF2</i> , <i>CrDOF3</i>) a las 3 semanas de la siembra; b) Bandejas en el interior de la cámara de cultivo.....	24
Figura 2.a) Nitrógeno líquido; b) Viales de 20 mL en cuyo interior se encontraba 4 mL del medio de extracción de volátiles que se componía de una disolución de NaCl al 1% y el material vegetal triturado con nitrógeno líquido.....	27
Figura 3.a) Viales en cuyo interior se introdujo un Twister™ adherido a una barra metálica de 5 cm de longitud; b) Muestras en incubación en estufa a 50°C durante 6 h.....	28
Figura 4. Estado de crecimiento de las cuatro líneas utilizadas a las 4 semanas de la siembra. Las plantas <i>Col-0</i> (izquierda) florecieron y se desarrollaron antes que las 3 líneas transgénicas.....	31
Figura 5. Cromatograma de <i>Col-0_1 A</i> (punto de muestreo 08:00h a 14:00h) donde se marcan los COVs mayoritarios.	34
Figura 6. Estructura química de los COVs: a) Hexanal; b) (E)-2-Hexenal; c) Benzaldehído; d) β-Cyclocitral; e) β-Ionona; f) Dihydroactinidiolide. Fuente: NIST (National Institute of Standards and Technology).....	36

ANEXO I

Figura 1. Cromatograma donde se observa la abundancia de los volátiles emitidos por Col- 0 a los diferentes puntos del día en sus distintos tiempos de retención (min), y el patrón de MeJA.63

Figura 2. Cromatograma donde se observa la abundancia de los volátiles emitidos por *CrDOF1* a los diferentes puntos del día en sus distintos tiempos de retención (min), y el patrón de MeJA.64

ANEXO II

Figura 1. Cromatograma donde se compara el compuesto Hexanal entre las muestras de Col-0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).65

Figura2. Cromatograma donde se compara el compuesto (E)-2-Hexenal entre las muestras de Col- 0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).66

Figura 3. Cromatograma donde se compara el compuesto Benzaldehído entre las muestras de Col-0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).67

Figura 4. Cromatograma donde se compara el compuesto β -Cyclocitral entre las muestras de Col-0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).68

Figura 5. Cromatograma donde se compara el compuesto β -Ionona entre las muestras de Col-0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).69

Figura 6. Cromatograma donde se compara el compuesto Dihydroactinidiolide entre las muestras de Col-0 y de *CrDOF1* para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).....70

1 RESUMEN

Los compuestos orgánicos volátiles (COVs) son el interfaz de interacción entre plantas y el resto de los organismos vivos. Su síntesis puede ser sistémica, relacionada con un órgano como las flores o provocada como respuesta a estrés biótico y abiótico. Presentan aplicaciones agrícolas que van desde la búsqueda de métodos sostenibles para el control de plagas y defensa de las plantas, a la producción de sabores y fragancias. Se ha estudiado el efecto de la sobreexpresión del gen *CYCLING DOF FACTOR* (*CDF*) de *Chlamydomonas reinhardtii* (*CrDOF*) en *Arabidopsis* sobre la emisión de volátiles de hoja. Se ha analizado la producción de volátiles, por cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS), de 4 líneas de plantas de *Arabidopsis thaliana* del ecotipo Columbia (Col-0), de las cuales 3 eran líneas independientes en las que se había sobreexpresado el gen *CrDOF* y la restante era una variedad silvestre. Los volátiles mayoritarios encontrados y en los que se ha centrado este trabajo han sido: Hexanal, (E)-2-Hexenal, Benzaldehído, β -Cyclocitral, β -Ionona y Dihydroactinidiolide. Éstos tienden a emitirse en niveles superiores en las plantas que sobreexpresan *CrDOF*. Dicho aumento es estadísticamente significativo en diferentes horas del día. De hecho, las diferencias tienden a observarse en las horas diurnas. Los cambios observados, aunque no son homogéneos, permiten concluir que el gen *CrDOF* activa la emisión de volátiles en hojas de *Arabidopsis*.

2 ABSTRACT

Volatile Organic Compounds (VOCs) form an interphase of connection between plants and other living organisms. They are synthesised by default, are specific of certain organisms and can be induced by abiotic and biotic stresses. They have many applications, from plague control and plant defence sustainable methods to flavour and fragrances elaboration. We have studied the effect of overexpression of the gene *CYCLING DOF FACTOR* (*CDF*) from *Chlamydomonas reinhardtii* (*CrDOF*) in *Arabidopsis* on volatile emission. Volatiles production has been analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS), on 4 Columbia (Col-0) ecotype *Arabidopsis thaliana* plant lines: 3 of them were independent lines in which *CrDOF* gene was overexpressed, the 4th one was a wild variety. This work focuses on the main volatiles identified: Hexanal, (E)-2-Hexenal, Benzaldehyde, β -Cyclocitral, β -Ionone y Dihydroactinidiolide. These ones tend to be emitted in higher levels by plants in which *CrDOF* is overexpressed. This increase is statistically significant in different hours in one day. In fact, differences tend to be observed in daylight hours. The changes observed, although they are not homogeneous, are enough to conclude that *CrDOF* gene activates volatiles emission in *Arabidopsis* leaves.

3 INTRODUCCIÓN

3.1 *ARABIDOPSIS THALIANA*, SU IMPORTANCIA GENÉTICA

Arabidopsis es un género de plantas herbáceas de la familia de las brasicáceas (Cruciferae o Brassicaceae). Este género cuenta con muchas especies de la que cabe destacar *Arabidopsis thaliana*. Ésta es una especie con una amplia distribución natural en todo Europa, Asia, y América del Norte (Meinke et al., 1998). Muchos ecotipos diferentes han sido recogidos de poblaciones naturales y están disponibles para el análisis experimental. Los ecotipos más aceptados para estudios genéticos y moleculares son Columbia (Col-0) y Landsberg. El ciclo de vida completo, incluyendo la germinación de la semilla, la formación de la roseta, el crecimiento del tallo principal, la floración y la maduración de las primeras semillas, se completa en 6 semanas. Las flores tienen 2 mm de largo y se fecundan por auto-polinización. Las semillas presentan 0,5 mm de longitud en la madurez y se producen en las frutas conocidas como silicuas. Las hojas están cubiertas con pequeños pelos unicelulares conocidos como tricomas, que son importantes para el estudio de la morfogénesis y la diferenciación celular. Las plantas pueden ser cultivadas en placas Petri o mantenidas en macetas situadas en invernaderos o en cámaras de cultivo en el laboratorio. La floración comienza aproximadamente 3 o 4 semanas después de la siembra en condiciones de días largos, y la inflorescencia resultante forma una progresión lineal de flores y silicuas antes del inicio de la senescencia. Las flores se componen de un verticilo exterior de cuatro sépalos verdes y espirales interiores que contienen cuatro pétalos blancos, seis estambres, y un gineceo central que forma la silicua. Las plantas maduras alcanzan de 15 a 20 cm de altura. Las raíces son de estructura simple, fácil de estudiar, y realizan relaciones simbióticas con bacterias fijadoras de nitrógeno (Meinke et al., 1998).

Esta especie se ha convertido en el organismo de elección para una amplia gama de estudios de las plantas. Las investigaciones en *Arabidopsis* reflejan que esta simple angiosperma sirve como modelo no sólo para la biología de plantas, sino también para abordar cuestiones fundamentales de la estructura y la función biológica común a todos los eucariotas. La investigación con *Arabidopsis* ha aclarado el papel importante que el análisis de los genomas de plantas puede jugar en la comprensión de los principios básicos de la biología, dentro de este género. *A. thaliana* no es una planta de importancia económica desde el punto de vista agronómico, sin embargo está emparentada con la col, la coliflor y el brócoli, que si la tienen, sobre todo en la Región de Murcia. *A. thaliana* presenta diversas características como: ciclo de vida relativamente corto, requiere espacios pequeños para desarrollarse, produce muchas semillas, crece fácilmente en cámaras de crecimiento, tiene un genoma relativamente pequeño comparado con las demás plantas, y además se conoce su secuencia genómica, lo cual la convierten en un excelente modelo de estudio para la investigación de genética molecular. Así pues, estas características permiten manipular mediante ingeniería genética, de manera más fácil y rápida, el genoma de *A. thaliana*.

El genoma de *A. thaliana* cuenta con aproximadamente 125 millones de bases o 125 megabases, dentro del cual, se encuentran 33518 genes (TAIR v9), 27379 de los cuales codifican para proteínas pertenecientes a más de 11000 familias. Este material genético se encuentra distribuido dentro de 5 cromosomas, que presentan densidad génica, niveles de expresión y distribución de repetidos semejantes (*Arabidopsis* & Initiative, 2000). Esta planta es diploide, por lo que el número total de cromosomas que tiene es $n=10$. La duplicación de todo el genoma es un evento común en plantas con flores, *A. thaliana* ha experimentado dos o posiblemente tres eventos de este tipo a lo largo de su historia. Por esta razón, su genoma presenta numerosas duplicaciones, que incluyen duplicaciones de genes en “tandem” y duplicaciones a gran escala en sus diferentes cromosomas, afectando a más del 40% del total de los genes (*Arabidopsis* & Initiative, 2000).

3.2 RELOJ CIRCADIANO

Las plantas necesitan coordinar toda su fisiología y su reproducción con la información del ambiente que las rodea. Los ritmos biológicos permiten a las plantas anticiparse a ciertas condiciones exteriores cambiantes. Los relojes biológicos son los encargados de generar los ritmos biológicos, y entre éstos los de mayor relevancia para las plantas son los que ocurren en periodos cercanos a un día o ritmos circadianos (Lucas, 2013). El reloj circadiano es una compleja red de genes que controla numerosos aspectos endógenos (metabólicos o fisiológicos) que se repiten diariamente. Algunos ejemplos incluyen el mantenimiento de órganos fotosintéticos, la emisión de volátiles, el momento de polinización, la floración o los niveles hormonales (Egea et al. 2013). *A. thaliana* es una planta modelo para el estudio del reloj circadiano, dada la importancia de éste como controlador general de crecimiento de las plantas, el desarrollo y la respuesta al estrés. Además, esta planta se usa para identificar los genes del reloj circadiano que causan modificaciones en los rasgos hortícolas (Egea et al., 2013). También, el reloj circadiano presenta un amplio espectro de acción, ya que interviene en el control del patrón de expresión de aproximadamente el 30% de los genes de *Arabidopsis* (Fornara et al., 2009). Así pues, esto refleja la importancia del reloj circadiano en el control de procesos celulares básicos y también a nivel de los órganos.

3.3 FACTORES DE TRANSCRIPCIÓN DOF

Los factores de transcripción o TFs (*Transcription Factors*) son proteínas que regulan la expresión de un gran número de genes implicados en importantes procesos biológicos, al ser estimulados por señales citoplasmáticas. Los TFs presentan la capacidad de activar o reprimir la transcripción de los genes diana, por medio de su unión a los elementos cis de las secuencias promotoras de estos genes (Shuichi, 2002). Esta unión pueden realizarla por sí solos o formando complejos. Aproximadamente el 5% del genoma de *Arabidopsis* codifica para más de 1500 TFs, los cuales, en función de los dominios de unión al ADN conservado, se pueden clasificar en 50 familias.

Algunos TFs son específicos de las plantas, como por ejemplo la familia de factores de transcripción DOFs (*DNA with ONE FINGER*) (Shuichi, 2002).

Las proteínas DOFs de plantas vasculares están involucradas en procesos fisiológicos como: asimilación del nitrógeno y fijación del carbono fotosintético, germinación de semilla, metabolismo secundario, respuesta al fotoperiodo, floración y tolerancia al estrés abiótico y biótico (Shuichi, 2002).

Los *CDFs* (*CYCLING DOF FACTORS*) de *A. thaliana* llamados así porque su expresión oscila con el ritmo circadiano, codifican para un factores de transcripción del tipo DOF. Hasta el momento, la función conocida de los *CDFs* ha sido su implicación en los procesos de floración dependientes del fotoperiodo, a través de la represión del factor de transcripción CONSTANS (CO), que promueve la floración cuando los días se hacen más largos (Fornara et al., 2009).

Los TFs DOF presentan un dominio DOF de unión al ADN conservado y localizado en el extremo amino terminal de la proteína. Este dominio está constituido por 52 residuos aminoácidos con 4 cisteínas CX₂CX₂₁CX₂C (X representa cualquier aminoácido). Dichas cisteínas unen un átomo de zinc (Zn²⁺) formando la configuración típica denominada dedo de zinc (Shuichi, 2002). Un mismo DOF puede presentar una función dual, activando o reprimiendo la transcripción de diferentes genes, por tanto, el gen diana tiene un papel relevante en la determinación de su función (Shuichi, 2002). La capacidad de los DOFs de la activación o represión de la transcripción depende de diversos factores, como la presencia de dominios específicos en las regiones amino o carboxilo terminal. También está implicado en la funcionalidad de los DOFs la asociación con otros TFs DOF o con TFs de otras familias (Shuichi, 2002). Esta interacción ayuda a la especificidad y selección de las señales correctas en los promotores de los genes diana.

En *Chlamydomonas reinhardtii*, un género de algas verdes unicelulares flageladas que se usa como organismo modelo en biología molecular, se ha descrito la existencia de una única copia de este factor de transcripción (*CrDOF*) (Lucas, 2013). La expresión de *CrDOF* está regulada, tal y como ocurre con los *CDFs*, tanto por el reloj circadiano como por el fotoperiodo.

En una secuencia del genoma completo de *Arabidopsis* se han encontrado 37 genes putativos *DOF*, siendo uno de ellos un pseudogén. Un árbol filogenético categoriza las proteínas DOF de *Arabidopsis* en siete subgrupos (Shuichi, 2002). *CrDOF* filogenéticamente está relacionado con el control de la regulación fotoperiódica primitiva. Una parte de las funciones de los DOFs habrían sido heredadas del único gen presente en algas *CrDOF*, y esto podría deberse a un mecanismo de evolución conjunta de un grupo de genes o a la utilización de ciertas redes reguladoras ancestrales (Lucas, 2013). La conservación de la función del TF *CrDOF* a lo largo de la evolución se muestra en la interacción con los *CDFs*, potenciando su efecto inhibitorio de la floración en *Arabidopsis* (Lucas, 2013).

3.4 VOLÁTILES EN PLANTAS

Las plantas emiten muchos compuestos orgánicos volátiles (COVs). El olor que liberan las plantas, tanto de flores y frutos como de hojas, es muy valorado por su importancia comercial y estética. Los volátiles de plantas ocurren típicamente como una mezcla compleja de compuestos lipofílicos de bajo peso molecular derivados de diferentes rutas biosintéticas. Están aparentemente producidos como parte de una estrategia de defensa contra el estrés biótico y abiótico, así como para contribuir a diversas funciones fisiológicas del organismo productor (Maffei et al., 2011). La bioquímica y la biología molecular de las sustancias volátiles de plantas es compleja, e implica la interacción de varias vías bioquímicas y cientos de genes, que conducen a la producción de una amplia gama de COVs. Los COVs constituyen aproximadamente el 1% de los metabolitos secundarios conocidos en las plantas. Todas las plantas son capaces de almacenar y emitir COVs, pero el proceso muestra una variación genotípica notable, así como plasticidad fenotípica (Maffei et al., 2011).

Los compuestos volátiles de plantas, desde un punto de vista fisiológico, están involucrados en estos procesos: la interacción planta-planta, la señalización entre organismos simbióticos, la atracción de polinizadores y dispersores de semilla, así como la repulsión de algunos herbívoros. Por ejemplo, los daños producidos en hojas o en otros tejidos vegetativos por herbívoros estimula la emisión de compuestos volátiles que atraen a los depredadores de éstos. Así pues, este fenómeno recoge el papel de los COVs en la defensa de las plantas (Unsicker et al., 2009).

Desde un punto de vista químico los COVs pertenecen a diversas clases de productos naturales como terpenoides, productos de degradación de ácidos grasos, productos derivados de ácidos, alcoholes, aldehídos y cetonas de diverso origen biogénico (Maffei et al., 2011).

Los terpenoides o isoprenoides son un grupo diverso de compuestos que presentan una variedad de funciones en las plantas, que van desde la resistencia del estrés por calor, componente de la membrana celular, hormonas vegetales hasta pigmentos fotorreceptores, pero también desempeñan un papel de defensa directa contra los herbívoros, así como indirecta atrayendo a los enemigos naturales de los mismos (Degenhardt & Lincoln, 2006). Los carotenoides son un importante subgrupo de compuestos isoprenoides, caracterizado por la presencia de 40 carbonos (tetraterpenos), cuya degradación oxidativa produce una gran cantidad de derivados más pequeños, llamados apocarotenoides, que poseen una gama de diferentes estructuras químicas y actividades biológicas. Los apocarotenoides, que tienen menos de 15 átomos de carbono, presentan un gran interés económico en la industria química, ya que son utilizados en la producción de sabores y fragancias (Serra, 2015). Ciertos compuestos orgánicos volátiles, como la β -Ionona, se derivan a partir de la degradación de carotenoides a través de la acción de escisión de carotenoides dioxigenasas (CCDs)(Maffei et al., 2011).

Las oxilipinas son otra clase importante de COVs que se generan a partir de ácidos grasos que se escinden en volátiles de hojas verdes (GLVs, *Green Leaf Volatiles*) y derivados del ácido jasmónico (AJ) (Maffei et al., 2011), cuya producción y actuación es crítica para la activación de una respuesta

de defensa. Los AJ constituyen las hormonas de defensa de la planta, y regulan la activación de la respuesta inmune a través de rutas de señalización específicas. El Metil Jasmonato (MeJA) se deriva del AJ y es un COV utilizado en defensa de las plantas (Degenhardt & Lincoln, 2006). Tras un daño mecánico o de herbívoro los GLVs son liberados casi de inmediato, como los C₆-aldehídos, alcoholes y ésteres, derivados de la ruta de la lipoxigenasa (LOX) exclusiva de los ácidos grasos poliinsaturados (PUFAs, *Poly-Unsaturated Fatty Acids*), que caracterizan el olor típico de las hojas dañadas (Unsicker et al., 2009).

Los progresos en las técnicas de análisis, la biología molecular y la bioquímica, han permitido aclarar las vías biosintéticas, enzimas y genes involucrados en la producción y emisión de los COVs, lo que ha ayudado a conocer parcialmente la razón del porqué se producen este tipo de sustancias, así como el papel que desempeñan en la interacción con otros organismos y con el medio (Maffei et al., 2011). En la identificación de los compuestos volátiles influyen por una parte, el estado de maduración, el genotipo, las condiciones climáticas y de almacenamiento del cultivo, y por otra el método utilizado para la preparación de la muestra y de las condiciones en los análisis cromatográficos. A pesar de estos progresos, el análisis de volátiles en *Arabidopsis* no es simple, debido al pequeño tamaño de la planta y la baja emisión de los compuestos volátiles.

4 OBJETIVO

El objetivo del presente trabajo es determinar si la sobreexpresión del gen de *Chlamydomonas reinhardtii* CrDOF, produce cambios en los niveles de volátiles emitidos por la hoja en la planta modelo *Arabidopsis thaliana*.

5 MATERIAL Y MÉTODOS

5.1 MATERIAL VEGETAL

El material vegetal que se utilizó (Figura 1.a) fueron 4 líneas de *Arabidopsis thaliana* ecotipo Columbia (Col-0): tres líneas independientes de plantas transgénicas de *A. thaliana* que sobreexpresan el marco abierto de lectura completo de *CrDOF* bajo un promotor constitutivo 35S:*CrDOF* (Tabla 1) y una línea silvestre. Dichas líneas fueron suministradas por el Dr. Federico Valverde. La secuencia de cADN codificante del gen *CrDOF* y las características de la construcción utilizada se muestran a continuación.

5' - GGGGACAAGTTTGTACAAAAAAGCAGGCTTCGAAGGAGATAGAACCATGGTAG
ACGGTGGTTCG - 3' y 5' - GGGGACCACTTTGTACAAGAAAGCTGGGTCTCACCTAGCA
CCCGAGTAAGC - 3' con el codón STOP y 5' - GGGGACCACTTTGTACAAGAAAGCT
GGGTCCCTAGCACCCGAGTAAGCGGC - 3' sin el codón STOP utilizado para fusiones amino-
terminales

Tabla 1. Construcciones desarrolladas en el grupo del Dr. Federico Valverde para la sobreexpresión del gen *CrDOF*.

Plásmido	Características	Nombre de la línea transgénica	Referencia
pEG100	Vector de expresión génica en plantas (Km ^R en bacteria y BASTA ^R en plantas). Clonación mediante sistema Gateway. Usado para transformar <i>Arabidopsis</i>	35S: <i>CrDOF</i>	(Lucas, 2013)

Se sembraron 36 semillas de Col-0, y también 36 semillas de cada línea que sobreexpresa *CrDOF* (*CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) en 9 maceteros por cada línea (4 plantas/macetero). Las plantas se cultivaron en una cámara, cuyas condiciones eran 23 °C luz (16 h) y 18 °C oscuridad (8h) dispuestas de manera aleatoria sobre bandejas de plástico (Figura 1.b). El periodo de luz comenzaba a las 08:00h y finalizaba a las 00:00h, mientras que desde las 00:00h hasta las 08:00h se consideraba periodo de oscuridad (fotoperiodo: 16h luz-8h oscuridad).

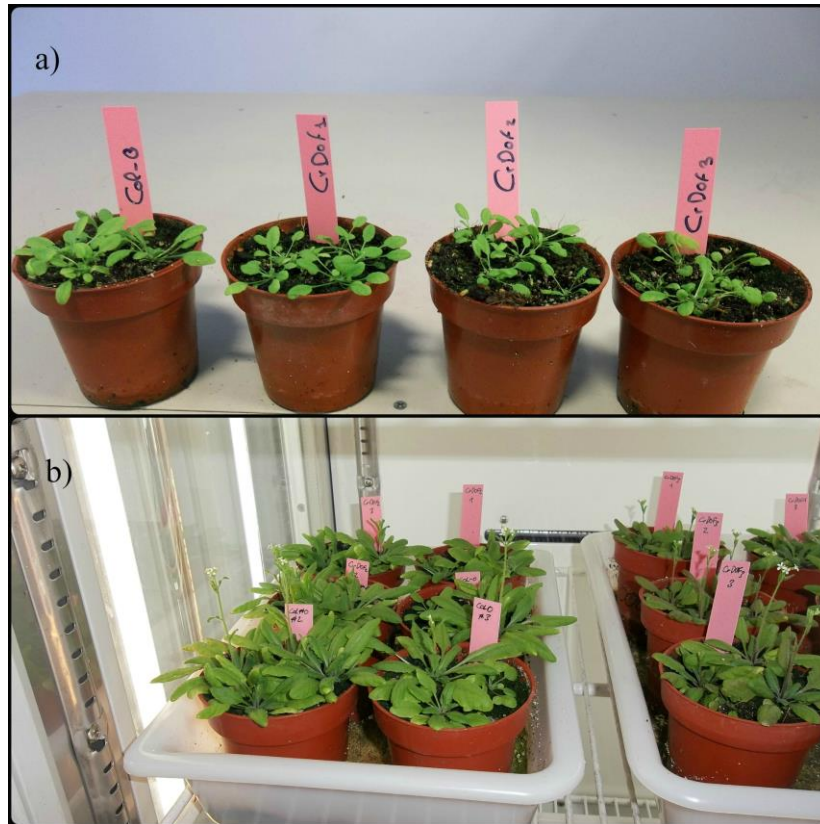


Figura1. a) Las 4 líneas (Col-0, CrDOF1, CrDOF2, CrDOF3) a las 3 semanas de la siembra; b) Bandejas en el interior de la cámara de cultivo.

5.2 PROPAGACIÓN DE LAS SEMILLAS

Para la propagación de las líneas de interés de *Arabidopsis*, primero se pusieron las semillas en placas Petri con papel secante empapado en agua durante 1 semana, a continuación las semillas se sembraron en maceteros. Se cultivaron en el interior de cámaras hasta que cumplieren su ciclo de vida (6 semanas aproximadamente), y presentaran silicuas maduras. Por otro lado, se recolectaron las semillas de las silicuas y se dejaron secar en placas Petri. Una vez secas, se procedió a la recogida, y almacenamiento de las mismas a 4 °C para su mantenimiento durante un largo periodo de tiempo.

5.3 ANÁLISIS DE VOLÁTILES

5.3.1 Análisis experimental

Para la extracción de los COVs de las hojas, se realizaron 4 puntos de muestreo durante 24 horas para medir los volátiles cada 6 horas de todas las líneas, como se indica en la Tabla 2. El orden de los puntos de muestreo fue el siguiente: B-C-D-A.

Tabla 2. Puntos de muestreo en el ensayo de 24h.

A	B	C	D
08:00h-14:00h	14:00h-20:00h	20:00h-02:00h	02:00h-08:00h

Para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) y línea se realizó el mismo procedimiento, descrito a continuación. El punto A (08:00h a 14:00h) representa las horas del día de la mañana y el punto B (14:00h a 20:00h) representa las horas del día de la tarde. El estado fenológico en el que se encontraba el material vegetal era floración y comienzo de frutos. En primera instancia, se tomó el material vegetal (hojas) de 3 plantas de 3 maceteros independientes para cada repetición, la cantidad de material utilizado osciló entre los 0,45 g y 0,60 g de peso, dependiendo del estado y cantidad de hojas (Tabla 3). Para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) y línea se hicieron 3 repeticiones (3 (replicas/línea) × 4 líneas = 12 muestras en cada punto de muestreo).

Tabla 3. Peso de cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	B (08:00h-14:00h) (g)	C (14:00h-20:00h) (g)	D (20:00h-02:00h) (g)	A (02:00h-08:00h) (g)
Co-0_1	0,601	0,601	0,559	0,553
Col-0_2	0,530	0,601	0,555	0,457
Col-0_3	0,573	0,565	0,504	0,510
CrDOF1_1	0,601	0,595	0,552	0,581
CrDOF1_2	0,575	0,598	0,597	0,599
CrDOF1_3	0,593	0,587	0,593	0,601
CrDOF2_1	0,601	0,553	0,554	0,480
CrDOF2_2	0,598	0,575	0,545	0,575
CrDOF2_3	0,599	0,572	0,450	0,501
CrDOF3_1	0,575	0,582	0,455	0,457
CrDOF3_2	0,574	0,582	0,458	0,458
CrDOF3_3	0,595	0,451	0,452	0,475

El material vegetal se trituró con nitrógeno líquido (Figura 2.a) en un mortero, y se depositó en unos viales de 20 mL provistos con tapón de cierre de rosca y septum de silicona/PTFE (Supelco), que contenían 4 mL de una disolución de cloruro sódico (NaCl) al 1%. (Figura 2.b).

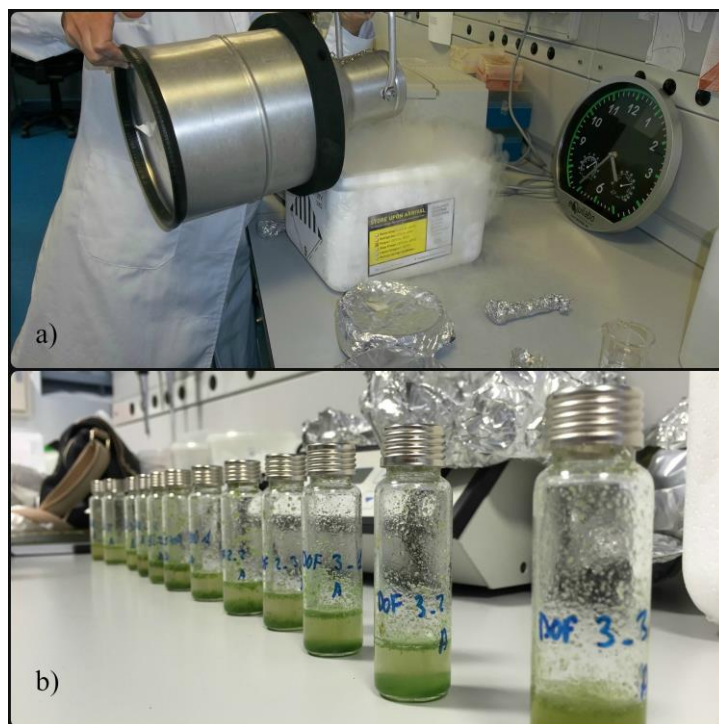


Figura 2.a) Nitrógeno líquido; b) Viales de 20 mL en cuyo interior se encontraba 4 mL del medio de extracción de volátiles que se componía de una disolución de NaCl al 1% y el material vegetal triturado con nitrógeno líquido.

Dentro de cada vial se introdujo, adherido a una barra metálica de 5 cm de longitud, un Twister™ (Gerstel, Figura 3.a). Los Twisters, que son pequeñas barras magnéticas recubiertas de polidimetilsiloxano (PDMS), tenían una longitud de 10 mm y un espesor de adsorbente de 0.5 mm. Los viales con las muestras se incubaron en estufa (Kendro Heraeus® Herahybrid 6 Hybridisation Incubator) a 50°C durante 6 horas (Figura 3.b), durante este tiempo cada Twister™ estuvo adsorbiendo volátiles del espacio de cabeza generado en cada vial.

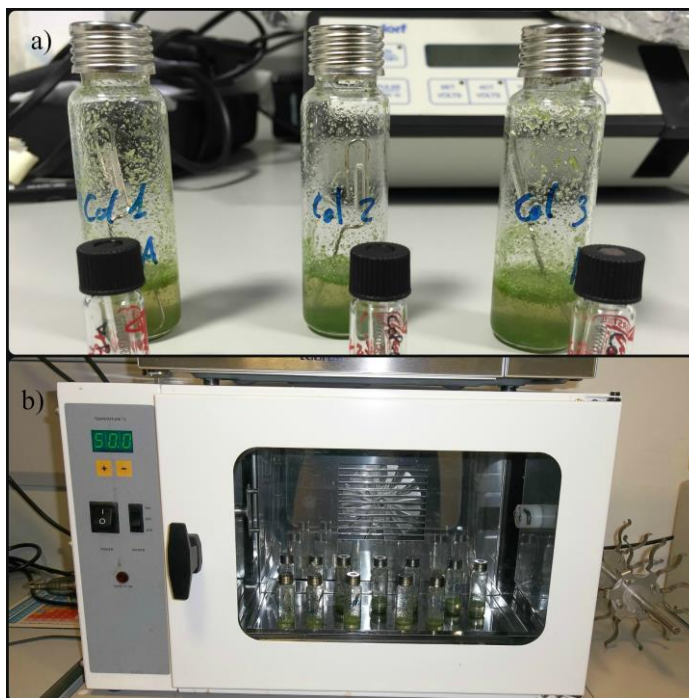


Figura 3.a) Viales en cuyo interior se introdujo un Twister™ adherido a una barra metálica de 5 cm de longitud; b) Muestras en incubación en el interior de una estufa a 50°C durante 6 h.

Además, también se realizó un control negativo de volátiles. Para ello se utilizaron tres viales con la disolución de NaCl al 1%, pero sin material vegetal. Estos datos se han empleado para la discriminación de los compuestos no emitidos por el material vegetal.

5.3.2 Cromatografía

Para la determinación analítica de los componentes volátiles que emiten las hojas en las condiciones de ensayo anteriormente descritas se recurrió a técnicas cromatográficas concretamente a la cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC-MS). Los compuestos retenidos sobre el adsorbente eran liberados por desorción térmica directa y analizados en un cromatógrafo de gases Agilent 6890N con detector de espectrometría de masas 5975 (Agilent Technologies, Palo Alto, CA, USA) provisto con una unidad térmica de desorción (TDU) e inyector con temperatura programable (PTV) con sistema de enfriamiento CIS 4 (Cooling Injector Sistem, Gerstel, Muelheim/Ruhr, Alemania).

La desorción se llevó a cabo mediante calentamiento a 270° C durante 5 minutos en la unidad de desorción térmica (TDU) en modo splitless y capturados en una trampa fría a -100° C, para su

posterior análisis cromatográfico. Además, este sistema estaba dotado de un brazo multifunción MPS2 (Gerst Muelheim/Ruhr, Alemania) que automatizaba todo este proceso.

La separación cromatográfica se realizó en una columna HP-5MS UI (Agilent_J&W Capillary GC., Agilent Tech., CA) de 30 m de longitud, 250 μm de diámetro interno y 0,25 μm de espesor de relleno. Se utilizó helio como gas portador. Se trabajó en condiciones de presión constante y modo de inyección de venteo de disolvente (solvent vent) y ratio de Split 1:50. La temperatura del horno inicial fue de 50°C y ésta se incrementó hasta 70°C, a 5°C por minuto, y se mantuvo durante un minuto; después se incrementó hasta 240°C a 10°C por minuto, y se mantuvo durante 15 minutos.

Para la detección en el espectrómetro de masas se empleó una fuente de impacto electrónico a 70 eV. Las temperaturas de la fuente y cuadrípulo fueron 230° y 150° C respectivamente y el rango de masas establecido fue de 40 a 450 uma a 4 scan/segundo. La línea de transferencia con el detector se mantuvo a 280° C.

Los cromatogramas y espectros de masas se evaluaron con el software ChemStation G1701EA revisión E.02.02 SP1 (Agilent Technol). Los compuestos de interés se identificaron cualitativamente por comparación con la base de datos espectral del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (Wiley 10th Ed. 2013, NIST 2011b, USA).

5.4 ANÁLISIS ESTADÍSTICO

Para el análisis estadístico se ha utilizado el programa R Commander y se ha calculado mediante el test t-Student. La hipótesis nula (entendida como la igualdad de las medias de las muestras) ha sido rechazada en el caso de que el valor P fuese menor o igual que 0,05.

Previo a este test t-Student ha sido necesario realizar un test de Levéne para comprobar si se puede asumir que las varianzas de las muestras son iguales, ya que en función de esto va a ser diferente el test t-Student. La hipótesis nula (entendida como la igualdad de las varianzas de las muestras) ha sido rechazada en el caso de que el valor P fuese menor o igual que 0,05.

Para el estudio de los compuestos de interés, se han analizado los datos referentes a las áreas integradas de los picos cromatográficos. La aplicación del test t-Student se ha realizado para comparar Col-0 con cada línea de *CrDOF* de cada compuesto para cada punto de muestreo, y por otro lado, para comparar por pares los puntos de muestreo para cada línea.

6 RESULTADOS

6.1 MATERIAL VEGETAL

A lo largo del seguimiento del cultivo hasta el momento óptimo del ensayo (5-6 semanas), se observaron notables diferencias fenotípicas entre las diferentes líneas. Col-0 floreció y se desarrolló antes que las 3 líneas transgénicas (*CrDOF1*, *CrDOF2*, *CrDOF3*) (Figura 4). Además, la línea *CrDOF1*, presentó un desarrollo más lento.

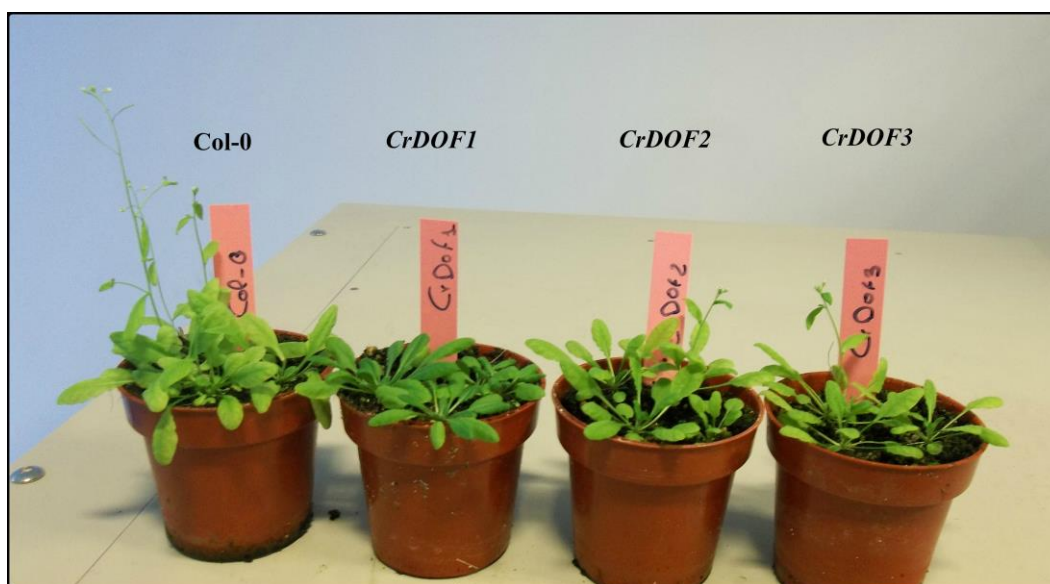


Figura 4. Estado de crecimiento de las cuatro líneas utilizadas a las 4 semanas de la siembra. Las plantas Col-0 (izquierda) florecieron y se desarrollaron antes que las 3 líneas transgénicas.

6.2 OPTIMIZADO DE METODOLOGÍA DE ANÁLISIS DE EMISIÓN DE VOLÁTILES EN *A. THALIANA*

Se realizaron varias metodologías hasta hallar con la favorable para analizar los volátiles de *A. thaliana*.

En la primera metodología que se aplicó se realizaron 3 repeticiones, 3 (replicas/línea) \times 4 líneas = 12 muestras, para cada línea (*Col-0*, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*). En el interior de un vaso de precipitado se introdujeron 3 hojas de plantas de 3 maceteros independientes para cada repetición. En los mismos se añadió 4 mL de agua con 0,2 g de glucosa y un Twister™ sostenido en una barra metálica de 5 cm de longitud. Las 3 hojas poseían un peso aproximado de (0,022-0,036 g). Cada vaso de precipitado con las muestras se introdujo en un desecador (2 L en el interior de una

cámara de cultivo durante 24 horas. Para la determinación de los compuestos volátiles de las hojas se analizaron las muestras por GC-MS.

La segunda metodología aplicada fue igual que la descrita anteriormente, pero se varió el peso de las muestras de hojas a 0,5 g. En otro ensayo realizado para averiguar el material vegetal necesario se cogió 1 g de hojas, aplicando el mismo procedimiento.

Los resultados obtenidos en la primera y segunda metodología que se realizaron no fueron de gran relevancia, ya que la emisión de volátiles se acercaba al ruido. Estas muestras también presentaban contaminación del entorno, debido a la poca emisión de las hojas y a que las muestras se encontraban en el interior de la cámara donde previamente había estado otro material vegetal.

La tercera metodología que se realizó fue con inflorescencias. En viales de 10 mL se introdujeron entre 40 a 50 inflorescencias de cada línea, 0,3 mL de la solución de agua y glucosa, y un Twister™ sostenido en una barra metálica de 5 cm de longitud. Estos viales se metieron en el interior de la cámara durante 24h. En este caso sí se obtuvieron resultados de volátiles emitidos por las inflorescencias, pero esta metodología no era viable para nuestro ensayo, debido a la gran cantidad de inflorescencias que se requerían para el mismo y la escasez de éstas.

6.3 ANÁLISIS DE VOLÁTILES DE HOJA EN *A. THALIANA*

De todos los resultados de las áreas integradas de los picos cromatográficos obtenidas, tanto en las líneas transgénicas (*CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) de *A. thaliana* como en Col-0, los volátiles más relevantes son los que aparecen en la Tabla 4, ya que lo emiten la mayoría de ellas. Este trabajo sólo se ha centrado en aquellos volátiles mayoritarios, que se emiten en todas las repeticiones de todas las líneas y cuya calidad de identificación es mayor del 80% (Tablas 5, 6 y Figuras 5, 6).

Tabla 4. Volátiles más relevantes emitidos en las líneas estudiadas (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3).

CAS	Nombre del compuesto	Tiempo de Retención (TR) (min)
000066-25-1	Hexanal	2.606
006728-26-3	(E)-2-Hexenal	3.25
000111-27-3	1-Hexanol	3.458
000111-71-7	Heptanal	3.963
018829-55-5	2-Heptenal	5.092
000100-52-7	Benzaldehído	5.168
004313-03-5	2,4-Heptadienal, (E,E)-	6.016
004313-03-5	2,4-Heptadienal, (E,E)-	6.315
000098-86-2	1-phenyl-ethanone, Acetophenone	7.492
000432-25-7	β -Cyclocitral	10.40
020189-42-8	1H-Pyrrole-2,5-dione	10.56
000472-66-2	1-Cyclohexene-1-acetaldehyde	11.02
002257-09-2	Benzene, (2-isothiocyanatoethyl)-	14.116
014901-07-6	β -Ionona	14.392
017092-92-1	Dihydroactinidiolide	15.001
004237-44-9	Phenol, 2-(1-phenylethyl)-	17.301

Tabla 5. Volátiles mayoritarios que se emiten en todas las líneas (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) y cuya calidad es mayor de 80%.

CAS	Nombre del compuesto	TR (min)
000066-25-1	Hexanal	2.606
006728-26-3	(E)-2-Hexenal	3.25
000100-52-7	Benzaldehído	5.168
000432-25-7	β -Cyclocitral	10.40
014901-07-6	β -Ionona	14.392
017092-92-1	Dihydroactinidiolide	15.001

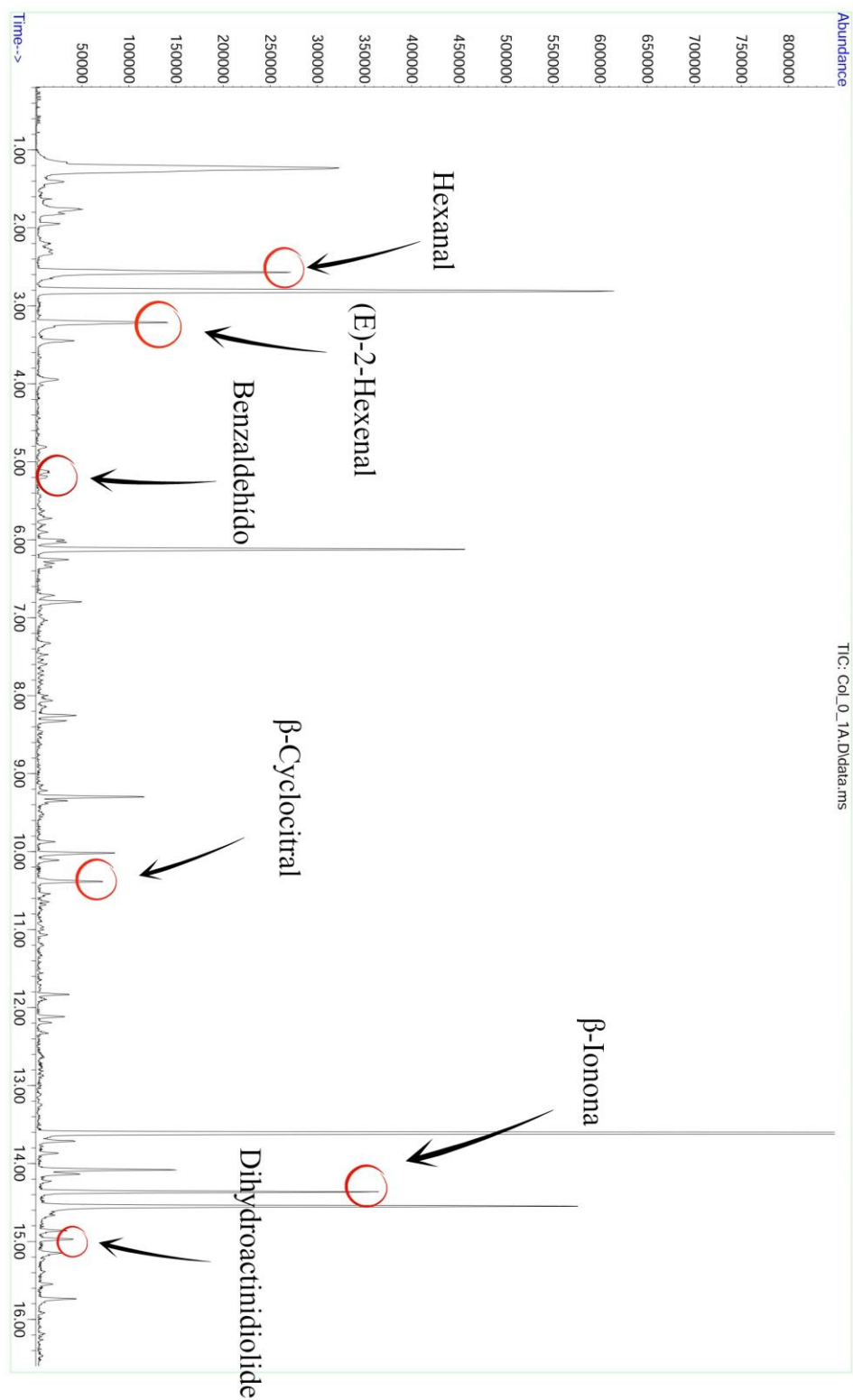


Figura 5. Cromatograma de Col-0_1 A (punto de muestreo 08:00h a 14:00h) donde se marcan los COVs mayoritarios.

Tabla 6. Volátiles mayoritarios que se emiten en todas las líneas (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) y cuya calidad es mayor de 80%. Fuente: NIST (National Institute of Standards and Technology).

Compuesto	Fórmula	IUPAC InChI Estándar
Hexanal	C ₆ H ₁₂ O	InChI=1S/C6H12O/c1-2-3-4-5-6-7/h6H,2-5H2,1H3
(E)-2-Hexenal	C ₆ H ₁₀ O	InChI=1S/C6H10O/c1-2-3-4-5-6-7/h4-6H,2-3H2,1H3/b5-4+
Benzaldehído	C ₇ H ₆ O	InChI=1S/C7H6O/c8-6-7-4-2-1-3-5-7/h1-6H
β-Cyclocitral	C ₁₀ H ₁₆ O	InChI=1S/C10H16O/c1-8-5-4-6-10(2,3)9(8)7-11/h7H,4-6H2,1-3H3
β-Ionona	C ₁₃ H ₂₀ O	InChI=1S/C13H20O/c1-10-6-5-9-13(3,4)12(10)8-7-11(2)14/h7-8H,5-6,9H2,1-4H3/b8-7+
Dihydroactinidiolide	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	InChI=1S/C11H16O2/c1-10(2)5-4-6-11(3)8(10)7-9(12)13-11/h7H,4-6H2,1-3H3/t11-/m0/s1

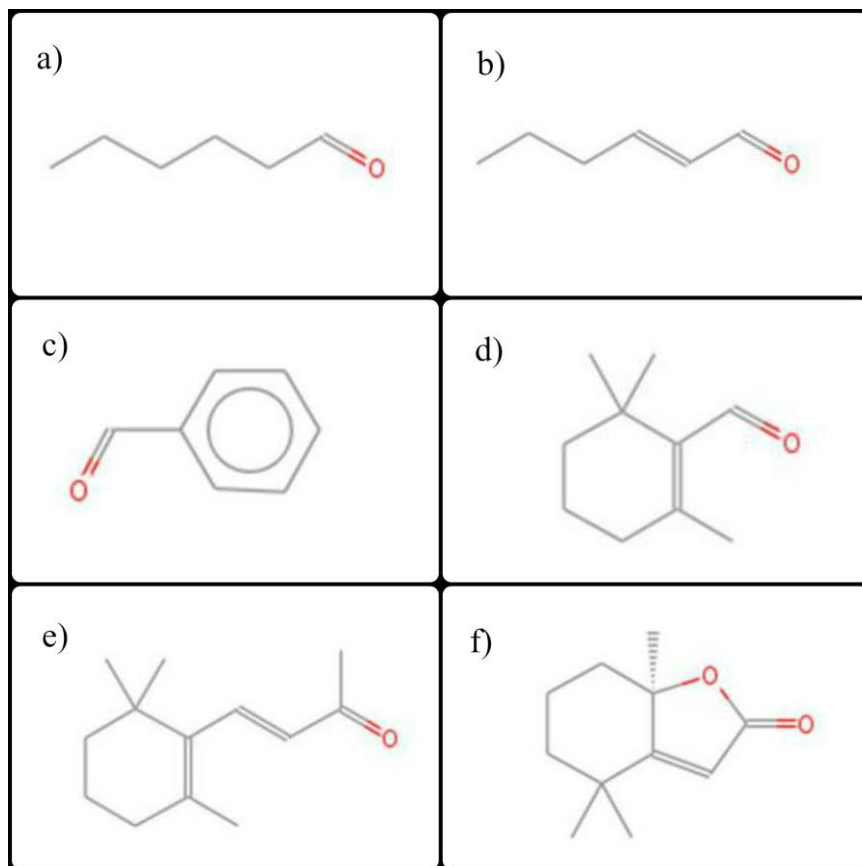


Figura 6. Estructura química de los COVs: a) Hexanal; b) (E)-2-Hexenal; c) Benzaldehído; d) β -Cyclocitral; e) β -Ionona; f) Dihydroactinidiolide. Fuente: NIST (National Institute of Standards and Technology).

Se conoce que la sobreexpresión de *CrDOF* activa la ruta de síntesis o transducción de señales de MeJA en base a análisis de micromatrices de ARN (estudios no publicados). Es por ello, que se utilizó un patrón (Sigma-Aldrich Methyl jasmonate 95%, 392707 Aldrich) de este compuesto para su correcta identificación y eventual cuantificación, pero nuestros resultados indican la ausencia de emisión de MeJA (Anexo I).

A continuación, se muestran las áreas integradas de los picos cromatográficos y el análisis estadístico de los compuestos Hexanal, (E)-2-Hexenal, Benzaldehído, β -Cyclocitral, β -Ionona y Dihydroactinidiolide, de cada línea (*Col-0*, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) y punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

6.3.1 Hexanal

El compuesto Hexanal tiende a emitirse por encima de Col-0 en las líneas transgénicas, en la mayoría de los puntos de muestreo, excepto en *CrDOF3* que está por debajo en los puntos C (20:00h a 02:00h) y D (02:00h a 08:00h) (Tabla 7 y Gráfico 1). Hay diferencias estadísticas significativas (teniendo en cuenta que el p-valor es menor que 0,05) en el punto A (08:00h a 14:00h) entre Col-0 vs *CrDOF3*, en el punto B (14:00h a 20:00h) las hay entre Col-0 vs *CrDOF2*, y en el D (02:00h a 08:00h) entre Col-0 vs *CrDOF1*. Por tanto, se puede decir que a lo largo del día se aprecian notables diferencias entre las líneas transgénicas y Col-0 para este compuesto.

Tabla 7. Media de las áreas y desviación típica de cada línea. Análisis estadístico del compuesto Hexanal entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	Hexanal							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)
Col-0	7925	1003	8627	708	9709	6145	9363	2239
<i>CrDOF1</i>	15742	6604	18502	6546	18928	5819	14604	1726
<i>CrDOF2</i>	8921	2730	21752	1509	14077	6504	9862	1223
<i>CrDOF3</i>	14191	949	11410	4823	9468	2561	8881	232
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs <i>CrDOF1</i>	0.1742		0.1189		0.1322		0.03255	
Col-0 vs <i>CrDOF2</i>	0.585		0.0001675		0.4454		0.7517	
Col-0 vs <i>CrDOF3</i>	0.001416		0.3786		0.9529		0.7295	

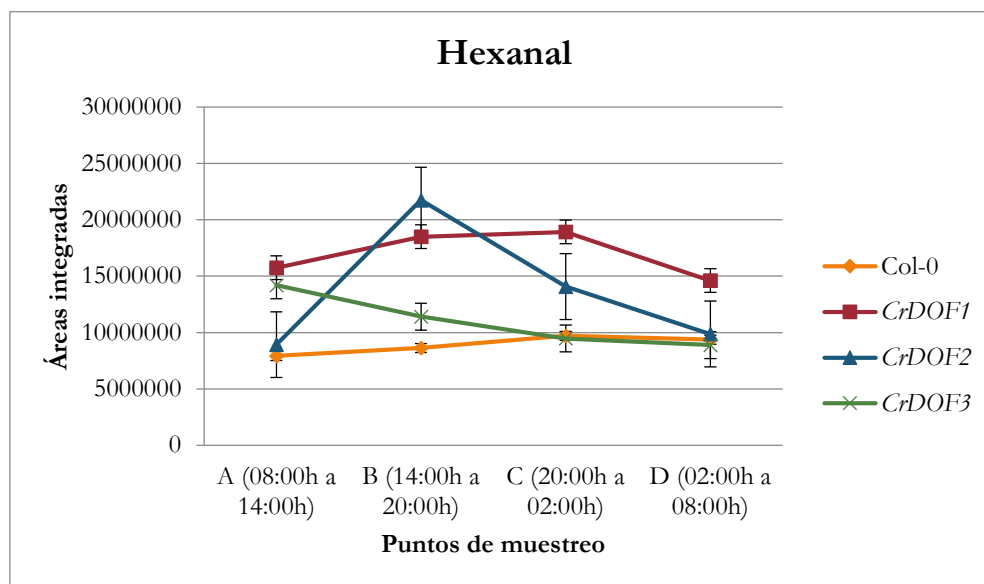


Gráfico 1. Áreas integradas del compuesto Hexanal de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

Se encuentran diferencias significativas para Hexanal a lo largo de las 24 h estudiadas (Tabla 8) en dos de las líneas. En *CrDOF2* presenta un máximo en el punto B (14:00h a 20:00h), un mínimo en el punto A (08:00h a 14:00h). Mientras que *CrDOF3* tiene diferencias significativas entre las horas de luz y de oscuridad, emitiendo mayor cantidad en las primeras.

Tabla 8. Análisis estadístico del compuesto Hexanal entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).

	Hexanal			
	p-valor Col-0	p-valor <i>CrDOF1</i>	p-valor <i>CrDOF2</i>	p-valor <i>CrDOF3</i>
A vs B	0.3785	0.6343	0.002051	0.3825
A vs C	0.6458	0.5648	0.2742	0.0401
A vs D	0.3676	0.787	0.6148	0.0007088
B vs C	0.7769	0.9369	0.1173	0.5712
B vs D	0.616	0.3751	0.0004484	0.4596
C vs D	0.9313	0.2848	0.3318	0.7301

6.3.2 (E)-2-Hexenal

El compuesto (E)-2-Hexenal tiende a estar por encima de Col-0 en las líneas transgénicas en la mayoría de los puntos de muestreo (Tabla 9 y Gráfico 2), excepto *CrDOF2* que está por debajo en los puntos correspondientes a las horas de oscuridad y previas a éstas (puntos C y D) y *CrDOF3* en las horas nocturnas (02:00h a 08:00h). Por otro lado, está muy igualado con Col-0 en el punto C (20:00h a 02:00h). No hay diferencias estadísticas significativas entre las líneas para cada punto de muestreo.

Tabla 9. Media de las áreas y desviación típica del compuesto (E)-2-Hexenal para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	(E)-2-Hexenal							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media (×10³)	SD (×10³)	Media (×10³)	SD (×10³)	Media (×10³)	SD (×10³)	Media (×10³)	SD (×10³)
Col-0	2640	517	6467	1491	7208	3604	5864	1403
<i>CrDOF1</i>	4903	1788	8725	2664	8972	672	7703	1168
<i>CrDOF2</i>	3188	1731	10480	2034	6155	1661	4488	1716
<i>CrDOF3</i>	3085	1344	7899	1787	7305	1752	3850	403
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs <i>CrDOF1</i>	0.103		0.2694		0.4515		0.1559	
Col-0 vs <i>CrDOF2</i>	0.6274		0.05103		0.6696		0.3429	
Col-0 vs <i>CrDOF3</i>	0.6208		0.3466		0.9686		0.07513	

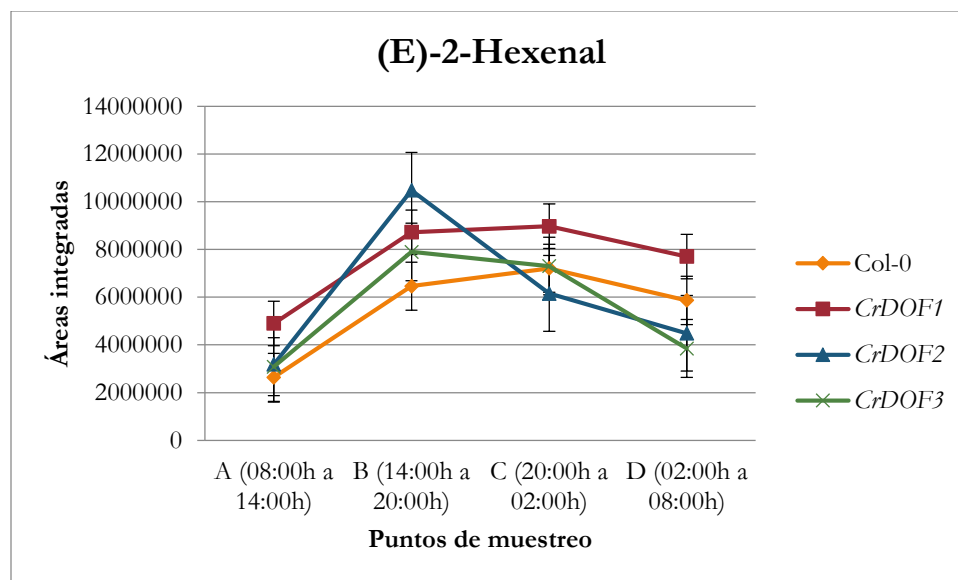


Gráfico 2 Áreas integradas del compuesto (E)-2-Hexenal de cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

Respecto a las diferencias del compuesto 2-Hexenal, (E)- dependiendo del punto de muestreo (Tabla 10 y Gráfico 2), las líneas presentan diferencias significativas entre los puntos de las horas diurnas, presentando un mínimo en las horas de la mañana (A=08:00h a 14:00h) y un aumento en las horas de la tarde (B=14:00h a 20:00h). Tanto Col-0 como CrDOF1, mantienen ese aumento de emisión en las horas nocturnas, en cambio, las otras líneas transgénicas baja la emisión de este volátil.

Tabla 10. Análisis estadístico del compuesto (E)-2-Hexenal entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3).

(E)-2-Hexenal				
	p-valor Col-0	p-valor CrDOF1	p-valor CrDOF2	p-valor CrDOF3
A vs B	0.0137	0.1081	0.009105	0.02033
A vs C	0.09547	0.02102	0.09876	0.02966
A vs D	0.02021	0.0856	0.4077	0.3989
B vs C	0.7584	0.8836	0.04625	0.7023
B vs D	0.637	0.5759	0.01754	0.01865
C vs D	0.5796	0.1782	0.2932	0.02912

6.3.3 Benzaldehído

El compuesto Benzaldehído tiende a estar por encima de Col-0 en las líneas transgénicas en el punto B (14:00h a 20:00h), y por debajo del mismo en las horas que corresponde a las horas de oscuridad y previas a éstas (Tabla 11 y Gráfico 3). No hay diferencias estadísticas significativas entre las líneas para cada punto de muestreo.

Tabla 11. Media de las áreas y desviación típica del compuesto Benzaldehído para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	Benzaldehído							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)
Col-0	403	154	920	169	977	171	1085	642
CrDOF1	391	61	1164	340	998	161	1089	89
CrDOF2	525	128	1320	442	597	208	976	120
CrDOF3	448	64	1102	102	769	86	854	205
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs CrDOF1	0.9075		0.431		0.8872		0.9937	
Col-0 vs CrDOF2	0.3514		0.326		0.07015		0.7863	
Col-0 vs CrDOF3	0.6651		0.2176		0.1322		0.5842	

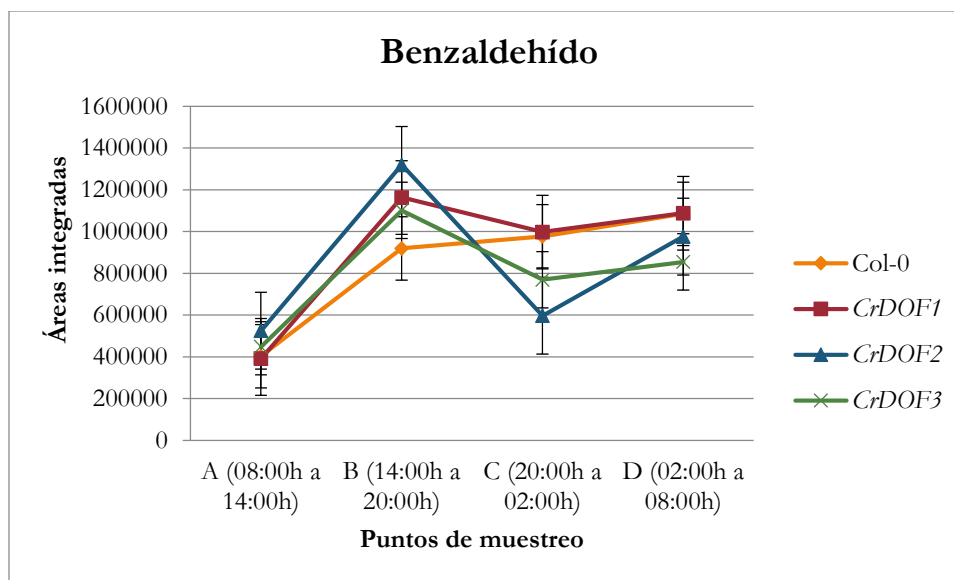


Gráfico 3. Áreas integradas del compuesto Benzaldehído de cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

Respecto a las diferencias del compuesto Benzaldehído (Tabla 12 y Gráfico 3) dependiendo del punto de muestreo, en las horas de la mañana hay un mínimo (A= 08:00h a 14:00h) y un aumento de emisión en las horas de la tarde (B=14:00h a 20:00h), donde hay diferencias significativas en Col-0, CrDOF2 y CrDOF3. En cambio, las líneas transgénicas tienden a emitir en menor cantidad en las horas nocturnas que en las horas de la tarde. Los resultados indican un desplazamiento de la emisión de benzaldehído que aumenta en las horas matutinas en presencia de CrDOF.

Tabla 12. Análisis estadístico del compuesto Benzaldehído entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3).

	Benzaldehído			
	p-valor Col-0	p-valor CrDOF1	p-valor CrDOF2	p-valor CrDOF3
A vs B	0.03798	0.0548	0.04026	0.0007033
A vs C	0.0124	0.003629	0.6371	0.006637
A vs D	0.1479	0.000366	0.01119	0.03059
B vs C	0.7352	0.4877	0.01119	0.01248
B vs D	0.7561	0.7432	0.5759	0.1344
C vs D	0.7922	0.4404	0.05203	0.5438

6.3.4 β -Cyclocitral

El compuesto β -Cyclocitral tiende a estar por encima de Col-0 en las líneas transgénicas (Tabla 13 y Gráfico 4), excepto *CrDOF2* y *CrDOF3* en las horas previas a oscuridad (punto C) y *CrDOF3* en las horas nocturnas. Hay diferencias estadísticas significativas en los puntos correspondientes de las horas nocturnas (C y D) entre Col-0 y *CrDOF1*.

Tabla 13. Media de las áreas y desviación típica del compuesto β -Cyclocitral para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	β -Cyclocitral							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)
Col-0	1588	476	3095	1240	2728	856	2757	80
<i>CrDOF1</i>	3402	1187	4285	1495	4599	545	4702	642
<i>CrDOF2</i>	2304	749	4630	245	2346	837	3570	1273
<i>CrDOF3</i>	2162	674	3419	1062	2648	349	2597	217
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs <i>CrDOF1</i>	0.07008		0.3486		0.03307		0.006489	
Col-0 vs <i>CrDOF2</i>	0.2349		0.1034		0.6098		0.3316	
Col-0 vs <i>CrDOF3</i>	0.2952		0.749		0.8876		0.2982	

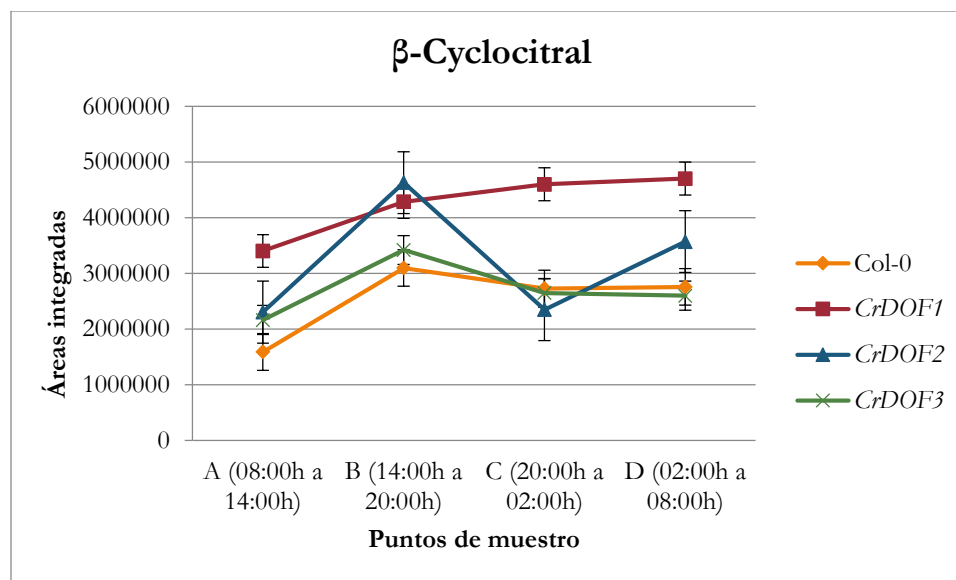


Gráfico 4. Áreas integradas del compuesto β -Cyclocitral de cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

Se encuentran diferencias significativas para β -Cyclocitral (Tabla 14 y Gráfico 4) a lo largo de las 24h estudiadas en dos de las líneas. *CrDOF2* presenta un aumento de emisión en el punto B (14:00h A 20:00h) y un mínimo en el punto C (20:00h a 02:00h). Mientras que Col-0 tiene diferencias significativas entre el punto D (02:00h a 08:00) y A (08:00h a 14:00h). Tanto Col-0 como *CrDOF1* mantienen ese aumento de emisión en las horas nocturnas, sin embargo, para *CrDOF2* y *CrDOF3* la emisión disminuye.

Tabla 14. Análisis estadístico del compuesto β -Cyclocitral entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3).

	β -Cyclocitral			
	p-valor Col-0	p-valor CrDOF1	p-valor CrDOF2	p-valor CrDOF3
A vs B	0.1209	0.4677	0.006933	0.1584
A vs C	0.114	0.1875	0.9514	0.329
A vs D	0.0477	0.1705	0.2121	0.3463
B vs C	0.6947	0.7495	0.01053	0.2984
B vs D	0.6616	0.68	0.2299	0.2595
C vs D	0.9569	0.843	0.2367	0.8412

6.3.5 β -Ionona

El compuesto β -Ionona tiende a estar por encima de Col-0 en las líneas transgénicas (Tabla 15 y Gráfico 5), excepto *CrDOF2* y *CrDOF3* en las horas previas a oscuridad (punto C) y *CrDOF3* en las horas nocturnas. Este compuesto presenta diferencias estadísticas significativas en el punto A (08:00h a 14:00) entre Col-0 vs *CrDOF3* y en el punto D (02:00h y 08:00) entre Col-0 vs *CrDOF1*.

Tabla 15. Media de las áreas y desviación típica del compuesto β -Ionona para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	β -Ionona							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media ($\times 103$)	SD ($\times 103$)	Media ($\times 103$)	SD ($\times 103$)	Media ($\times 103$)	SD ($\times 103$)	Media ($\times 103$)	SD ($\times 103$)
Col-0	5504	555	12744	5983	12364	4630	11508	630
<i>CrDOF1</i>	14235	6112	17526	6660	18697	3089	19656	4527
<i>CrDOF2</i>	10135	3557	20948	2375	9492	4038	15862	8086
<i>CrDOF3</i>	8899	1886	15661	5456	11207	1254	11490	946
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs <i>CrDOF1</i>	0.06938		0.4072		0.1201		0.03667	
Col-0 vs <i>CrDOF2</i>	0.08981		0.09187		0.4635		0.4051	
Col-0 vs <i>CrDOF3</i>	0.04032		0.5664		0.6975		0.9795	

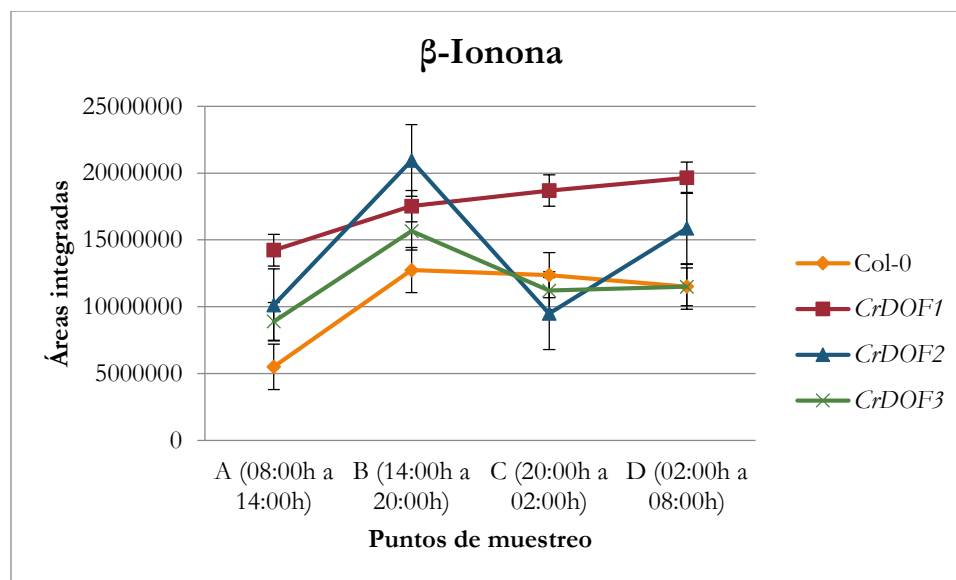


Gráfico 5. Áreas integradas del compuesto β -Ionona de cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

A lo largo de las 24h estudiadas se encuentran diferencias significativas en dos de las líneas para β -Ionona (Tabla 16 y Gráfico 5). *CrDOF2* presenta un máximo en el punto B (14:00h a 20:00h) y un mínimo en el punto C (20:00h a 02:00h). Mientras que Col-0 tiene diferencias significativas entre el punto D (02:00h a 08:00h) y A (08:00h a 14:00h). En general en las horas de la mañana hay un mínimo y en las horas de la tarde un aumento de emisión. Tanto Col-0 como *CrDOF1* mantienen ese aumento de emisión en las horas nocturnas, sin embargo, para *CrDOF2* y *CrDOF3* la emisión disminuye.

Tabla 16. Análisis estadístico del compuesto β -Ionona entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, CrDOF1, CrDOF2 y CrDOF3).

β -Ionona				
	p-valor Col-0	p-valor CrDOF1	p-valor CrDOF2	p-valor CrDOF3
A vs B	0.1052	0.5626	0.01188	0.1123
A vs C	0.1222	0.3222	0.8461	0.1524
A vs D	0.0002448	0.2847	0.3243	0.1006
B vs C	0.9349	0.796	0.01331	0.291
B vs D	0.74	0.6707	0.3549	0.3156
C vs D	0.7801	0.777	0.2892	0.7704

6.3.6 Dihydroactinidiolide

El compuesto Dihydroactinidiolide tiende a estar por encima de Col-0 en las líneas transgénicas (Tabla 17 y Gráfico 6), excepto *CrDOF2* y *CrDOF3* en las horas previas a oscuridad (punto C) y *CrDOF3* en las horas nocturnas. Éste no presenta diferencias estadísticas significativas entre las líneas para cada punto.

Tabla 17. Media de las áreas y desviación típica del compuesto Dihydroactinidiolide para cada línea y punto de muestreo. Análisis estadístico entre las líneas (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

	Dihydroactinidiolide							
	Áreas A (08:00h-14:00h)		Áreas B (14:00h-20:00h)		Áreas C (20:00h-02:00h)		Áreas D (02:00h-08:00h)	
	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)	Media ($\times 10^3$)	SD ($\times 10^3$)
Col-0	653	120	1373	909	1330	413	1384	363
<i>CrDOF1</i>	1231	639	1859	453	1622	208	2072	617
<i>CrDOF2</i>	939	330	2042	434	1152	510	1817	667
<i>CrDOF3</i>	873	83	1673	343	1196	47	1063	262
	p-valor A		p-valor B		p-valor C		p-valor D	
Col-0 vs <i>CrDOF1</i>	0.1986		0.4546		0.3354		0.1713	
Col-0 vs <i>CrDOF2</i>	0.2313		0.3147		0.6629		0.3785	
Col-0 vs <i>CrDOF3</i>	0.05985		0.622		0.6073		0.2826	

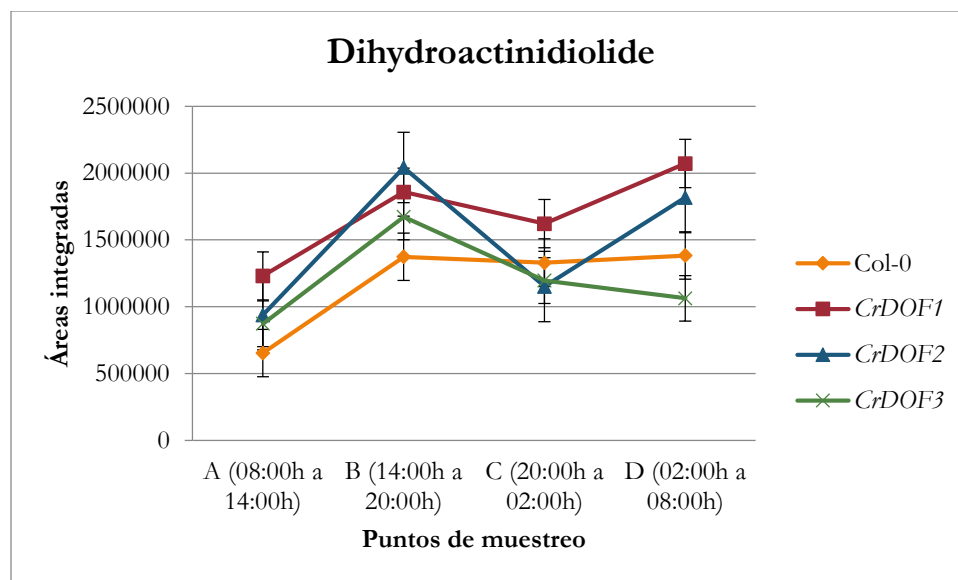


Gráfico 6. Áreas integradas del compuesto Dihydroactinidiolide de cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) para cada punto de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h).

Respecto a las diferencias significativas del compuesto Dihydroactinidiolide (Tabla 18 y Gráfico 6) dependiendo del punto de muestreo, en *CrDOF2* y *CrDOF3* presentan un máximo en el punto B (14:00h a 20:00 h) donde hay diferencias significativas; hay un mínimo en el punto C (20:00h a 02:00) en *CrDOF2*; y en Col-0 hay diferencias significativas entre el punto D (02:00h a 08:00 h) y A (08:00 h a 14:00 h). En general en las horas de la mañana hay un mínimo y en las horas de la tarde un aumento de emisión. Tanto Col-0 como *CrDOF1* mantienen ese aumento de emisión en las horas nocturnas, sin embargo, para *CrDOF2* y *CrDOF3* la emisión disminuye.

Tabla 18. Análisis estadístico del compuesto Dihydroactinidiolide entre los puntos de muestreo (A=08:00h a 14:00h; B=14:00h a 20:00h; C=20:00h a 02:00h y D= 02:00h a 08:00h) para cada línea (Col-0, *CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*).

Dihydroactinidiolide				
	p-valor Col-0	p-valor <i>CrDOF1</i>	p-valor <i>CrDOF2</i>	p-valor <i>CrDOF3</i>
A vs B	0.3032	0.2371	0.02484	0.01711
A vs C	0.05277	0.3704	0.5768	0.004253
A vs D	0.02969	0.1763	0.1103	0.2969
B vs C	0.9431	0.4564	0.08273	0.07532
B vs D	0.9864	0.6547	0.6509	0.07058
C vs D	0.873	0.2973	0.6509	0.4359

Cabe destacar, que los compuestos Hexanal, β -Cyclocitral, β -Ionona y Dihydroactinidiolide tienden a emitirse en niveles superiores en las plantas que sobreexpresan *CrDOF*. En el caso del compuesto (E)-2-Hexenal y Benzaldehído tiende a emitir por debajo o igual que Col-0, excepto en *CrDOF1* y durante las horas de la tarde que se emite mayor cantidad en las transgénicas que en Col-0. Dicho aumento es estadísticamente significativo en diferentes horas del día. De hecho, las diferencias tienden a observarse en las horas correspondientes al día.

La emisión de volátiles, tanto en Col-0 como en las líneas transgénicas, tiene un mínimo en las horas de la mañana (08:00h a 14:00) (excepto Hexanal) y tiende a aumentar en las horas de la tarde (14:00 a 21:00). Tanto Col-0 como *CrDOF1* mantienen ese aumento de emisión en las horas nocturnas, sin embargo, en *CrDOF2* y *CrDOF3* la emisión disminuye.

7 DISCUSIÓN

En este trabajo se ha estudiado el cambio en los niveles de volátiles emitidos por la hoja cuando se sobreexpresa el gen *CrDOF* en la planta modelo *A. thaliana*. En el estudio en el que se ha sobreexpresado este gen en *Arabidopsis* se ha descubierto que *CrDOF* inhibe la floración en esta planta modelo (Lucas, 2013). Este fenotipo se ha corroborado en este trabajo, porque se observaron notables diferencias, pues las plantas testigo Col-0 florecieron y se desarrollaron antes que las 3 líneas transgénicas. Este retraso en la floración es debido a la sobreexpresión de *CrDOF*, ya que reprime la expresión de *CONSTANS* (*CO*). *CO* es uno de los genes centrales de la ruta fotoperiódica en plantas, ya que codifica a un activador transcripcional que induce la expresión del integrador floral *FT* (*Flowering Locus T*) en el momento adecuado del año (Lucas, 2013). El retraso de la floración por la sobreexpresión de *CrDOF* solo se observa en DL, al igual que los CDFs, ya que reprimen su transcripción cuando los días se hacen más largos (Lucas, 2013). Por tanto, esto demuestra que *CrDOF* está implicado en la ruta fotoperiódica de la floración.

Este estudio sólo se ha centrado en aquellos compuestos volátiles mayoritarios, ya que se emiten tanto en las líneas transgénicas (*CrDOF1*, *CrDOF2* y *CrDOF3*) de *A. thaliana* como en Col-0 y cuya calidad de identificación por espectro de masas en base a la NIST, es mayor del 80%. Estos compuestos han sido: Hexanal, (E)-2-Hexenal, Benzaldehído, β -Cyclocitral, β -Ionona y Dihydroactinidiolide. Debido a que el gen de *CrDOF* está regulado tanto por el reloj circadiano como por el fotoperiodo, el ensayo ha sido realizado durante 24 horas.

7.1 ALDEHÍDOS

Los C₆-aldehídos: Hexanal y Hexenal; junto con los alcoholes correspondientes son los principales compuestos volátiles responsables del olor de las hojas. Los aldehídos son los productos resultantes de la lisis de los hidroperóxidos por acción del enzima hidroperóxido liasa (HPL). Los hidroperóxidos a su vez, son los compuestos resultantes de la reacción enzimática de LOX con los ácidos grasos poliinsaturados (PUFAs) en hojas de plantas (Zhuang et al., 1996). Los ácidos C₁₈ se escinden en los compuestos C₁₂ y C₆ mediante la enzima HPL. El primer compuesto C₆ sintetizado es (Z) -hex-3-enal, que se convierte entonces en otros GLVs, tales como (E) -2-hexenal (aldehído sintetizado en hojas) que conduce al 2-hexenol, o (Z) -3-hexenol (alcohol sintetizado en hojas) y (Z) acetato hex-3-enil (éster sintetizado en hojas) (Maffei et al., 2011). Los aldehídos producidos por HPL pueden ser reducidos a los correspondientes alcoholes en algunos vegetales. Estos productos con función aldehído y alcohol son componentes habituales del sabor y olor de hojas y frutos. Los aldehídos presentan una alta toxicidad debido a la gran reactividad de la función enal con grupos sulfhidrilo, amino e hidroxilo a través de reacciones de adición o formación de bases de Schiff (azometino). Por tanto, esto indica que hay una relación entre los aldehídos y el mecanismo de defensa de las plantas.

Distintas investigaciones han demostrado que Hexanal y Hexenal inhiben el crecimiento de microorganismos in vitro, principalmente hongos, y participan en la defensa de la planta (Gomi et al., 2010; Zhuang et al., 1996). Los C₆-aldehídos, tales como (E)-2-Hexenal y Hexanal, son compuestos que se han encontrado en hojas de *A. thaliana*, y estos volátiles fungicidas y bactericidas, también representan compuestos de señalización para inducir respuestas de defensa de las plantas (Gomi et al., 2010; Zhuang et al., 1990). El (E)-2-Hexenal muestra una acción considerablemente más inhibitoria que el Hexanal (Zhuang et al., 1996). Se ha confirmado que al aplicar un daño mecánico en las hojas de arroz (*Oryza sativa*), se produce una mayor emisión de (E)-2-Hexenal y Hexanal (Chehab et al., 2006). Todo esto indica la relación de estos volátiles con la respuesta de las plantas frente a estrés tanto abiótico como biótico. En un estudio se ha demostrado que aplicando MeJA de manera exógena, aumenta en las plantas de *A. thaliana*, la cantidad de producción de Hexanal más de 5 veces y la de (E)-2-Hexenal 4,6 veces (Avdiushko et al., 1995).

La defensa de la planta hacia patógenos potenciales abarca una amplia variedad de mecanismos, como la síntesis de una gran diversidad de compuestos relacionados con la defensa a través la activación transcripcional de los genes correspondientes (Somssich et al., 1996). Se sabe que algunos factores de transcripción DOF están involucrados en procesos de respuesta a estrés biótico y abiótico, como es el caso del gen de *Arabidopsis* *OBP2*, que está implicado en la síntesis de sustancias de defensa como respuesta al ataque de herbívoros (Shuichi, 2002). La sobreexpresión de *CrDOF* activa la ruta del AJ (estudios no publicados) que está implicada en la defensa de las plantas, aun así en el análisis cromatográfico que se ha realizado no se ha detectado emisión de su éster metílico el MeJA. En cambio, sí que se han obtenido otros productos como son el Hexanal y el (E)-2-Hexenal que son oxilipinas al igual que el MeJA. Las oxilipinas son compuestos resultantes de la oxidación de los PUFAs por medio de la LOX. En diversos estudios se han relacionado con la participación en la defensa vegetal, mediante la protección ante un daño celular ocasionado en los tejidos por patógenos o herbívoros, en tales plantas: *A. thaliana*, *Nicotiana attenuata*, *Brassica oleracea*, *Zea mays* y *Lycopersicon esculentum*, entre otras (Maffei et al., 2011).

No se conocía hasta el momento que *CrDOF* en *Arabidopsis* aumentara en algunos puntos del día la emisión de Hexanal. Dentro de las líneas estudiadas, la que presentó una mayor emisión de este compuesto es *CrDOF1*. Esta mayor emisión de Hexanal puede estar relacionada con un mayor estrés de las plantas y el consecuente menor crecimiento de esta línea transgénica (*CrDOF1*). En el caso del compuesto (E)-2-Hexenal, tiende a emitirse en niveles inferiores o iguales en las plantas transgénicas frente a Col-0. Excepto en el caso de *CrDOF1* y en las horas de la tarde (14:00h a 20:00h), que se emite en mayor cantidad en las transgénicas que en Col-0.

Por otro lado y desde un punto de vista aplicado, el estudio de genes involucrados en la defensa vegetal tiene un gran interés de cara a la producción de cultivos. Esto puede presentar un avance en diversas aplicaciones agrícolas enfocadas a métodos sostenibles para el control de plagas y enfermedades fúngicas. Como se ha visto en este estudio, una posible desventaja de la activación constitutiva de las rutas de respuesta a estrés es el detrimento del desarrollo de las plantas.

El Benzaldehído es un compuesto químico que consiste en un anillo de benceno con un sustituyente aldehído. Es uno de los COVs más utilizados a nivel industrial, también se emplea normalmente como potenciador del sabor en alimentos y está relacionado con la defensa de las plantas. En algunos estudios se ha demostrado que el uso de compuestos aromáticos, como el Benzaldehído, en enmiendas orgánicas, pueden reprimir el número de nematodos parásitos de las plantas y algunas enfermedades transmitidas por el suelo (Avdiushko et al., 1995). En *A. thaliana* se ha demostrado la emisión de Benzaldehído en relación con la defensa de esta especie (Somssich et al., 1996). En *A. thaliana*, las silicuas presentan niveles más altos de Benzaldehído que en las hojas (Ibdah et al., 2009). En el presente estudio la emisión de Benzaldehído en hojas de *A. thaliana*, tanto de las líneas transgénicas como de Col-0, es muy baja. A pesar de esto, en las horas de la tarde (14:00h a 20:00h) tiende a estar por encima de Col-0, aunque estadísticamente no es significativo.

7.2 APOCAROTENOIDES

Los apocarotenoides, tales como β -Ionona y β -Ciclocitral, son componentes importantes del sabor y el aroma en muchas frutas, verduras, y plantas ornamentales (Ohmiya, 2009).

La caracterización de un número de carotenoides dioxigenasas (CCD) de plantas han permitido la preparación directa de sabores específicos. Estas enzimas son capaces de escindir diferentes carotenoides proporcionando β -Ionona y β -Ciclocitral, entre otros (Serra, 2015). Estos dos compuestos han sido descritos en *A. thaliana* por (Kusano et al., 2013; Ramel et al., 2012), respectivamente. En *A. thaliana* se ha identificado CCD para la escisión de carotenoides que da lugar a derivados C₁₃, C₁₁, C₁₀ y C₉, principalmente (Serra, 2015).

Algunos estudios han hecho hincapié en el papel funcional de moléculas derivadas de carotenoides como fitohormonas o mensajeros en las vías de señalización de estrés (Shumbe et al., 2014). Por ejemplo, el estrés que induce la luz, produce la oxidación β -Caroteno en plantas de *Arabidopsis*, lo que lleva a la acumulación de diferentes derivados volátiles (Ramel et al., 2012). Cabe destacar, el papel importante que presenta β -Ciclocitral en *A.thaliana*, debido a que induce cambios en la expresión de un gran conjunto de genes de respuesta al oxígeno singlete (1O_2), una especie de oxígeno reactivo altamente tóxico, ya que provoca la oxidación de las biomoléculas y puede actuar como una molécula señal que conduce a la muerte celular. Este oxígeno se forma a partir de triplete de clorofilas excitados en los cloroplastos, especialmente cuando las plantas son expuestas a un exceso de energía de la luz (Ramel et al., 2012). Así pues, β -Ciclocitral se asoció con un aumento de la tolerancia del estrés fotooxidativo de las plantas (Shumbe et al., 2014). Estos efectos parecen ser específicos de β -Ciclocitral, ya que no se han observado con β -Ionona que no era capaz de inducir o reprimir la expresión de este gen. Sin embargo, se sabe que la oxidación de β -Caroteno produce otros compuestos volátiles, además de β -Ciclocitral y β -Ionona, tales como Dihydroactinidiolide (DHA) (Shumbe et al., 2014). Este último es una lactona (éster cíclico) resultante de la oxidación secundaria de β -Ionona. Curiosamente, DHA se acumula en hojas de *Arabidopsis* bajo alta tensión de luz (Shumbe et al., 2014). En realidad, el DHA es conocido por ser una molécula bioactiva en

animales. Es un componente de feromonas en insectos, como hormigas y en mamíferos tales como el gato y el zorro rojo (Rocca et al., 1983), además se encontraron en este volátil efectos citotóxicos contra líneas celulares de cáncer (Malek et al., 2009). Por el contrario, se sabe mucho menos sobre las acciones de DHA en las plantas vasculares. Sin embargo, el DHA fue identificado como un componente importante de los extractos de acetato de etilo de cianobacterias o macrófitos acuáticos que inhiben la germinación de las semillas y crecimiento de las plántulas (Stevens & Merrill, 1980).

Los apocarotenoides analizados en este estudio tienden a emitirse en niveles superiores en las plantas que sobreexpresan *CrDOF* en las horas diurnas. También, en las horas nocturnas *CrDOF1* y *CrDOF2* presentan una emisión superior a Col-0.

7.3 EMISIÓN DE VOLÁTILES EN RITMO CIRCADIANO

Algunas plantas emiten compuestos de manera rítmica durante un período de 24 horas, mientras que otros no, por lo que hay diferentes mecanismos que regulan la biosíntesis y/o emisión de estos compuestos volátiles (Kolossova et al., 2001). En lo que concierne a la emisión de volátiles, en la bibliografía consultada no se ha encontrado ningún estudio sobre la emisión de volátiles en ritmo circadiano en hojas de *A. thaliana*.

No se ha encontrado en la bibliografía ningún estudio sobre la emisión de apocarotenoides en circadiano en *A. thaliana*, pero sí en *Petunia spp.* (Simkin et al., 2004). En el inicio del periodo de luz (18h de luz), los niveles de β -Ionona de corolas de petunia aumentan durante todo el día alcanzando un pico a las 20:30, mientras que durante la noche (6h de oscuridad) se produce una disminución (Simkin et al., 2004). Esto muestra que la formación de este apocarotenoide en petunia es diurna y está regulada directamente con la luz. En cambio, en este trabajo los resultados obtenidos nos revelan que durante las horas de la mañana (08:00h a 14:00h) hay un mínimo en la emisión, y en las horas de la tarde (14:00h a 20:00h) se produce un aumento. Col-0 y *CrDOF1* mantienen esos niveles durante la noche, y en *CrDOF2* y *CrDOF3* disminuyen los niveles.

El Benzaldehído en flores de petunia, se emite antes de la aparición de la oscuridad y los niveles permanecen altos durante la noche antes de disminuir durante el día (Underwood et al., 2005). Al igual que se ha visto en este estudio, la emisión de Benzaldehído, presenta un mínimo en las horas de la mañana (08:00h a 14:00h) y por la tarde se produce un aumento de emisión (14:00h a 20:00h) que se mantiene en las horas diurnas en Col-0 y *CrDOF1*.

En los volátiles analizados en este trabajo, en las primeras horas de la mañana (08:00h a 14:00h) se tiende a formar mínimos (excepto en el caso de Hexanal) y en las horas de la tarde (14:00h a 20:00h) aumenta los niveles de emisión. En *CrDOF2* y *CrDOF3* se presentan niveles bajos de emisión por la noche, en cambio, Col-0 y *CrDOF1* mantienen los niveles altos de emisión por la noche. Cabe destacar que algunas plantas de las líneas de *CrDOF2* y *CrDOF3* no eran de muy buena

calidad, y se tuvieron que realizar en los muestreos previos a oscuridad y en las horas nocturnas, por tanto es uno de los motivos por los que se postula que éstas estén por debajo de Col-0 en estas horas (de 20:00h a 02:00h y de 02:00h a 8:00h). También hay que tener en cuenta la dificultad de analizar volátiles en esta planta modelo, debido a su pequeño tamaño y a sus bajos niveles de emisión.

7.4 OBSERVACIONES GENERALES

Por tanto, este trabajo sirve como precedente para estudios posteriores, ya que es necesario realizar otros con un mayor número de muestras vegetales para un mejor análisis estadístico, pero por falta de material no ha sido posible un mayor número de repeticiones. También, sería interesante realizar este ensayo con una mayor cantidad de muestra. La importancia de este estudio radica en que se ha podido observar una tendencia a una mayor emisión de volátiles en las líneas transgénicas. A pesar de que no se ha detectado MeJA, se han obtenido otros compuestos volátiles que pertenecen al grupo de las oxilipinas, como Hexanal y (E)-2-Hexenal. Estos resultados son de gran interés, debido a que las oxilipinas están directamente relacionadas con los mecanismos en la defensa de las plantas. Los apocarotenoides también presentan un enorme interés en la industria como potenciador del sabor y fragancias naturales. Las sustancias de sabor "natural" sólo se pueden preparar mediante procesos físicos (extracción de fuentes naturales) o por procesos enzimáticos o microbianos. Estos productos se han convertido en productos rentables, mientras que otros sabores que se producen en la naturaleza pero se obtienen a través métodos químicos, son menos apreciados por el consumidor (Ohmiya, 2009). Desde un punto de vista químico, no hay diferencia entre un compuesto sintetizado en la naturaleza y la molécula idéntica producida en el laboratorio, pero aun así el precio de un sabor que se vende como natural es a menudo significativamente más alto que los preparados por síntesis química.

Así pues, se ha descubierto que *CrDOF* además de provocar en *Arabidopsis* un retraso en la floración, puede estar implicado en una mayor emisión en ciertos volátiles en diferentes horas del día.

8 CONCLUSIÓN

Los volátiles analizados, Hexanal, 2-Hexenal, (E)-, Benzaldehído, β -Cyclocitral, β -Ionona y Dihydroactinidiolide, por GC-MS en las 4 líneas de *A. thaliana* (3 líneas independientes de sobreexpresión del gen *CrDOF* y Col-0 como control), tienden a emitirse en mayores niveles en las líneas transgénicas en distintos puntos del día. Los cambios observados, aunque no son homogéneos permiten concluir que el gen *CrDOF* activa la emisión de volátiles en hojas de *A. thaliana*. Dicho aumento es estadísticamente significativo en diferentes horas del día. Las diferencias tienden a observarse en las horas diurnas, con mínimos en las horas de la mañana y máximos en las horas de la tarde.

Cabe resaltar la alta emisión de Hexanal en las líneas transgénicas (que activan la ruta de síntesis del ácido jasmónico) y la relación existente entre este hecho y el aumento de la emisión de este compuesto, según la bibliografía consultada, por aplicación exógena de Metil Jasmonato, así como respuesta a estrés.

A pesar de estas conclusiones es necesario realizar estudios posteriores, para poder recabar datos adicionales que permitan aceptar o rechazar la hipótesis de una mayor emisión de volátiles en las plantas con sobreexpresión del gen *CrDOF*.

9 BIBLIOGRAFÍA

- Arabidopsis, T., & Initiative, G. (2000). Analysis of the genome sequence of the flowering plant *Arabidopsis thaliana*. *Nature*, *408*(6814), 796–815.
- Avdiushko, S., Croft, K. P., Brown, G. C., Jackson, D. M., Hamilton-Kemp, T. R., & Hildebrand, D. (1995). Effect of volatile methyl jasmonate on the oxylipin pathway in Tobacco, Cucumber, and Arabidopsis. *Plant Physiology*, *109*(4), 1227–1230.
- Chehab, E. W., Raman, G., Walley, J. W., Perea, J. V., Banu, G., Theg, S., & Dehesh, K. (2006). Rice hydroperoxide lyases with unique expression patterns generate distinct aldehyde signatures in *Arabidopsis*. *Plant Physiology*, *141*(1), 121–134.
- Degenhardt, D. C., & Lincoln, D. E. (2006). Volatile emissions from an odorous plant in response to herbivory and methyl jasmonate exposure. *Journal of Chemical Ecology*, *32*(4), 725–743.
- Egea-Cortines, M., Ruíz-Ramón, F., & Weiss, J. (2013). Circadian Regulation of Horticultural Traits: Integration of Environmental Signals in Plants. *Horticultural Reviews*, *41*, 1–46.
- Fornara, F., Panigrahi, K. C. S., Gissot, L., Sauerbrunn, N., Rühl, M., Jarillo, J. A., & Coupland, G. (2009). *Arabidopsis* DOF transcription factors act redundantly to reduce *CONSTANS* expression and are essential for a photoperiodic flowering response. *Developmental Cell*, *17*(1), 75–86.
- Gomi, K., Satoh, M., Ozawa, R., Shinonaga, Y., Sanada, S., Sasaki, K., & Takabayashi, J. (2010). Role of hydroperoxide lyase in white-backed planthopper (*Sogatella furcifera* Horváth)-induced resistance to bacterial blight in rice, *Oryza sativa* L. *Plant Journal*, *61*(1), 46–57.
- Ibdah, M., Chen, Y.T., Wilkerson, C. G., & Pichersky, E. (2009). An aldehyde oxidase in developing seeds of *Arabidopsis* converts benzaldehyde to benzoic Acid. *Plant Physiology*, *150*(1), 416–423.
- Kolossova, N., Gorenstein, N., Kish, C. M., & Dudareva, N. (2001). Regulation of circadian methyl benzoate emission in diurnally and nocturnally emitting plants. *Plant Cell*, *13*(10), 2333–2347.
- Kusano, M., Iizuka, Y., Kobayashi, M., Fukushima, A., & Saito, K. (2013). Development of a Direct Headspace Collection Method from *Arabidopsis* Seedlings Using HS-SPME-GC-TOF-MS Analysis. *Metabolites*, *3*(2), 223–242.
- Lucas, E. (2013). Caracterización del factor de transcripción CrDOF en la señalización por fotoperiodo en *Chlamydomonas reinhardtii*: aspectos funcionales y evolutivos. *Tesis Doctoral*.
- Maffei, M. E., Gertsch, J., & Appendino, G. (2011). Plant volatiles: production, function and pharmacology. *Natural Product Reports*, *28*(8), 1359–1380.
- Malek, S. N. A., Shin, S. K., Wahab, N. A., & Yaacob, H. (2009). Cytotoxic components of *Pereskia bleo* (Kunth) DC. (Cactaceae) leaves. *Molecules*, *14*(5), 1713–1724.

- Meinke, D. W., Cherry, J. M., Dean, C., Rounsley, S. D., & Koornneef, M. (1998). *Arabidopsis thaliana*: a model plant for genome analysis. *Science*, 282(5389), 679–682.
- NIST. Libro del Web de Química del NIST . Visita online: 31 de agosto de 2015:
<http://webbook.nist.gov/>
- Ohmiya, A. (2009). Carotenoid cleavage dioxygenases and their apocarotenoid products in plants. *Plant Biotechnology*, 26(4), 351–358.
- Ramel, F., Birtic, S., Ginies, C., Soubigou-Taconnat, L., Triantaphylides, C., & Havaux, M. (2012). Carotenoid oxidation products are stress signals that mediate gene responses to singlet oxygen in plants. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109(14), 5535–5540.
- Rocca, J.R., Tumlinson, J.H., Glancey, B.M., & Lofgren, C. S. (1983). Synthesis and stereochemistry of tetrahydro-3,5-dimethyl-6-(1-methylbutyl)-2H-pyran-2-one, a component of the queen recognition pheromone of *Solenopsis invicta*. *Tetrahedron Lett*, 24, 1893–1896.
- Serra, S. (2015). Recent Advances in the Synthesis of Carotenoid-Derived Flavours and Fragrances. *Molecules*, 20(7), 12817–12840.
- Shuichi, Y. (2002). The Dof family of plant transcription factors. *Trends in Plant Science*, 7(12), 555–560.
- Shumbe, L., Bott, R., & Havaux, M. (2014). Dihydroactinidiolide, a High Light-Induced β -Carotene Derivative that Can Regulate Gene Expression and Photoacclimation in *Arabidopsis*. *Molecular Plant*, 7(7), 1248–1251.
- Sigma-Aldrich. Methyl jasmonate 95%. Visita online: 31 de agosto de 2015:
<http://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/392707>
- Simkin, A. J., Underwood, B. A., Auldrige, M., Loucas, H. M., Shibuya, K., Schmelz, E., & Klee, H. J. (2004). Circadian regulation of the PhCCD1 carotenoid cleavage dioxygenase controls emission of beta-ionone, a fragrance volatile of petunia flowers. *Plant Physiology*, 136(3), 3504–3514.
- Somssich, I. E., Wernert, P., Kiedrowski, S., & Hahlbrock, K. (1996). *Arabidopsis thaliana* defense-related protein ELI3 is an aromatic alcohol:NADP⁺ oxidoreductase. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 93(24), 14199–14203.
- Stevens, K.L., and Merrill, G. B. (1980). Growth inhibitors from spikerush. *J. Agric. Food Chem*, 28(3), 644–646.
- Underwood, B. A., Tieman, D. M., Shibuya, K., Dexter, R. J., Loucas, H. M., Simkin, A. J., & Clark, D. G. (2005). Ethylene-regulated floral volatile synthesis in petunia corollas. *Plant Physiology*, 138(1), 255–266.

Unsicker, S. B., Kunert, G., & Gershenzon, J. (2009). Protective perfumes: the role of vegetative volatiles in plant defense against herbivores. *Current Opinion in Plant Biology*, 12(4), 479–485.

Zhuang, H., Hamilton-Kemp, T. R., Andersen, R. a, & Hildebrand, D. F. (1996). The impact of alteration of polyunsaturated fatty acid levels on C6-aldehyde formation of *Arabidopsis thaliana* leaves. *Plant Physiology*, 111(3), 805–812.

ANEXO I

Pico cromatográfico del patrón de Metil Jasmonato comparado con cromatogramas de las muestras analizadas

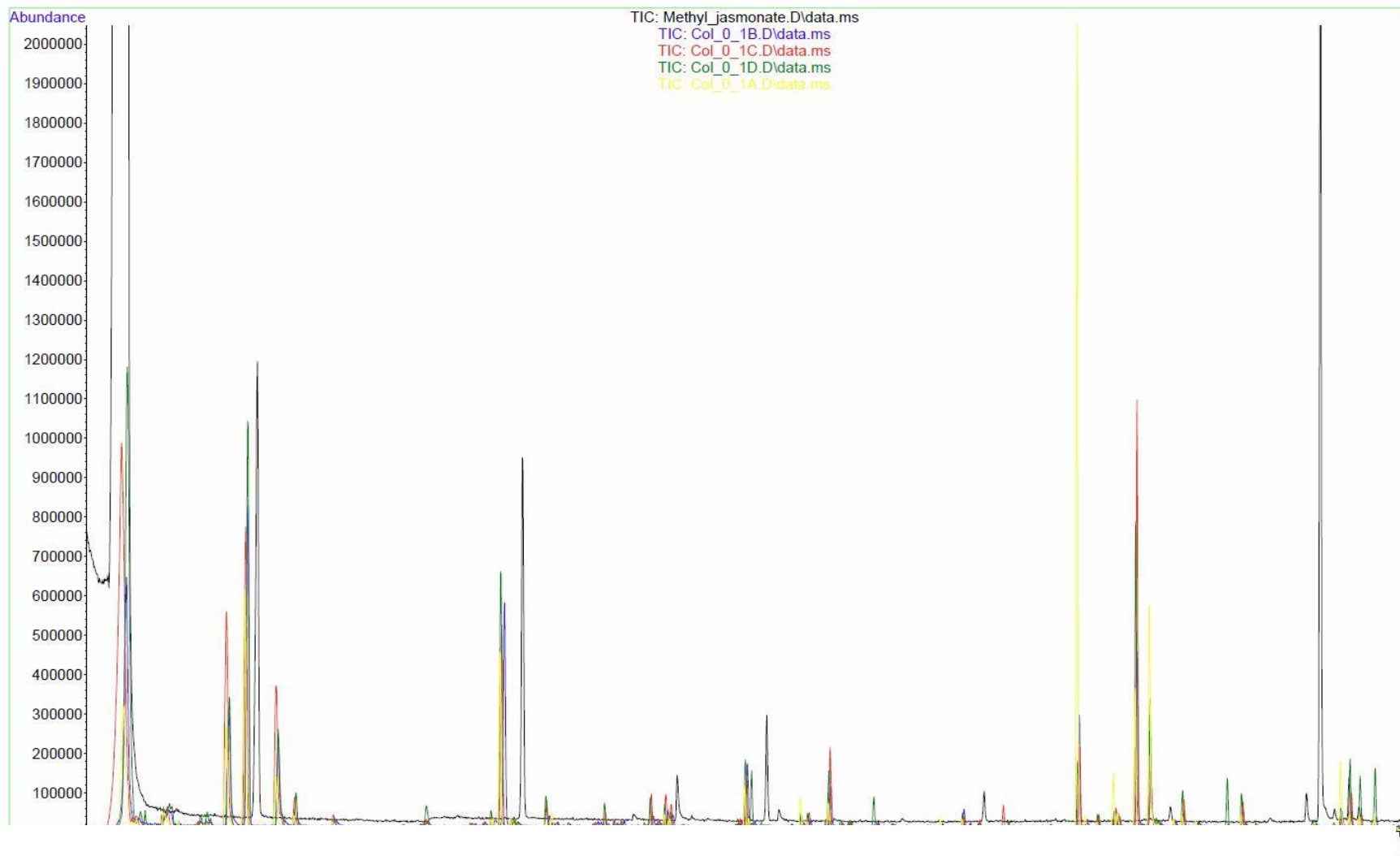


Figura 1. Cromatograma donde se observa la abundancia de los volátiles emitidos por Col-0 a los diferentes puntos del día en sus distintos tiempos de retención (min), y el patrón de MeJA.

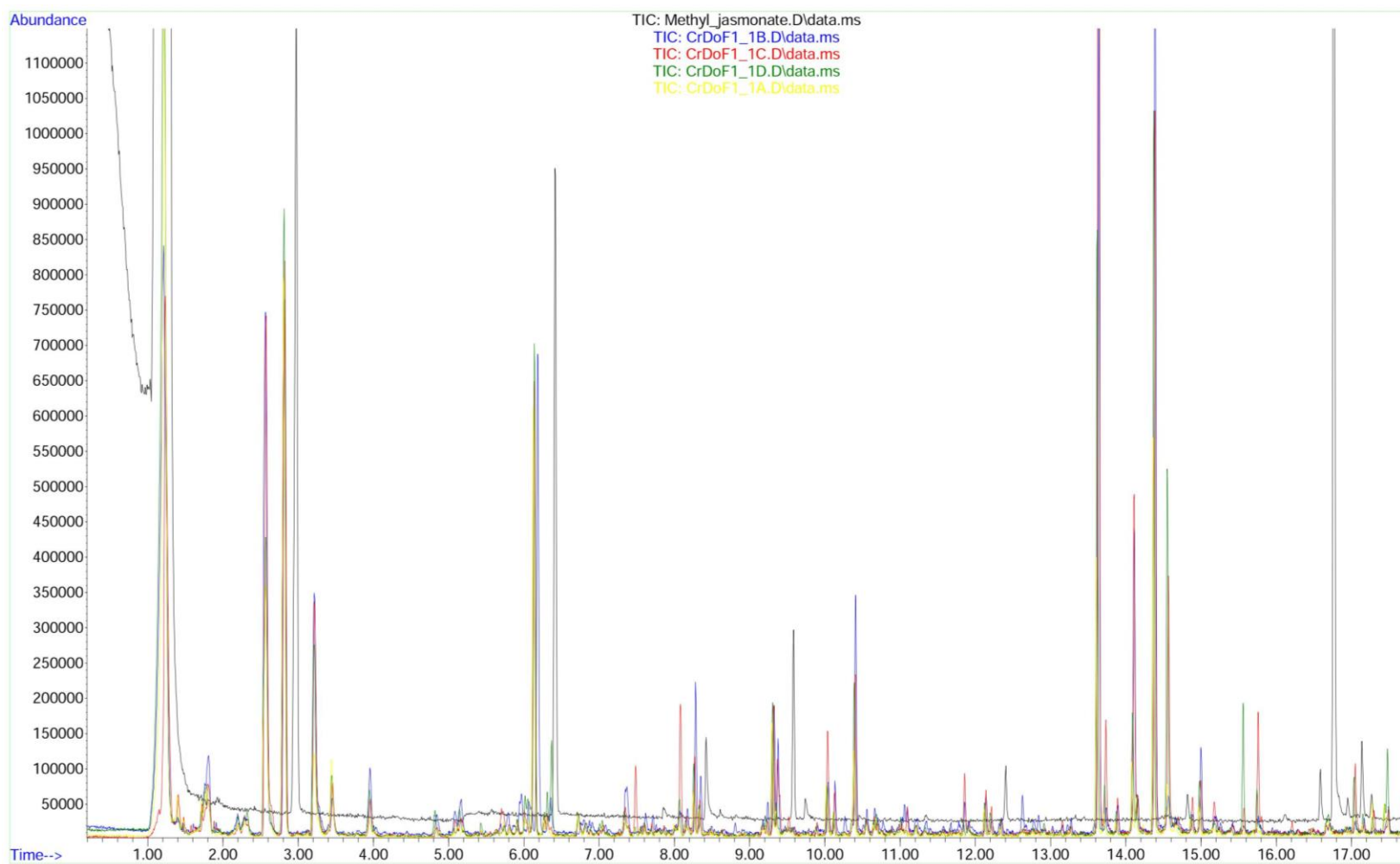


Figura 2. Cromatograma donde se observa la abundancia de los volátiles emitidos por CrDOF1 a los diferentes puntos del día en sus distintos tiempos de retención (min), y el patrón de MeJA.

ANEXO II

Cromatograma de los volátiles analizados en las líneas transgénicas frente a Col-0

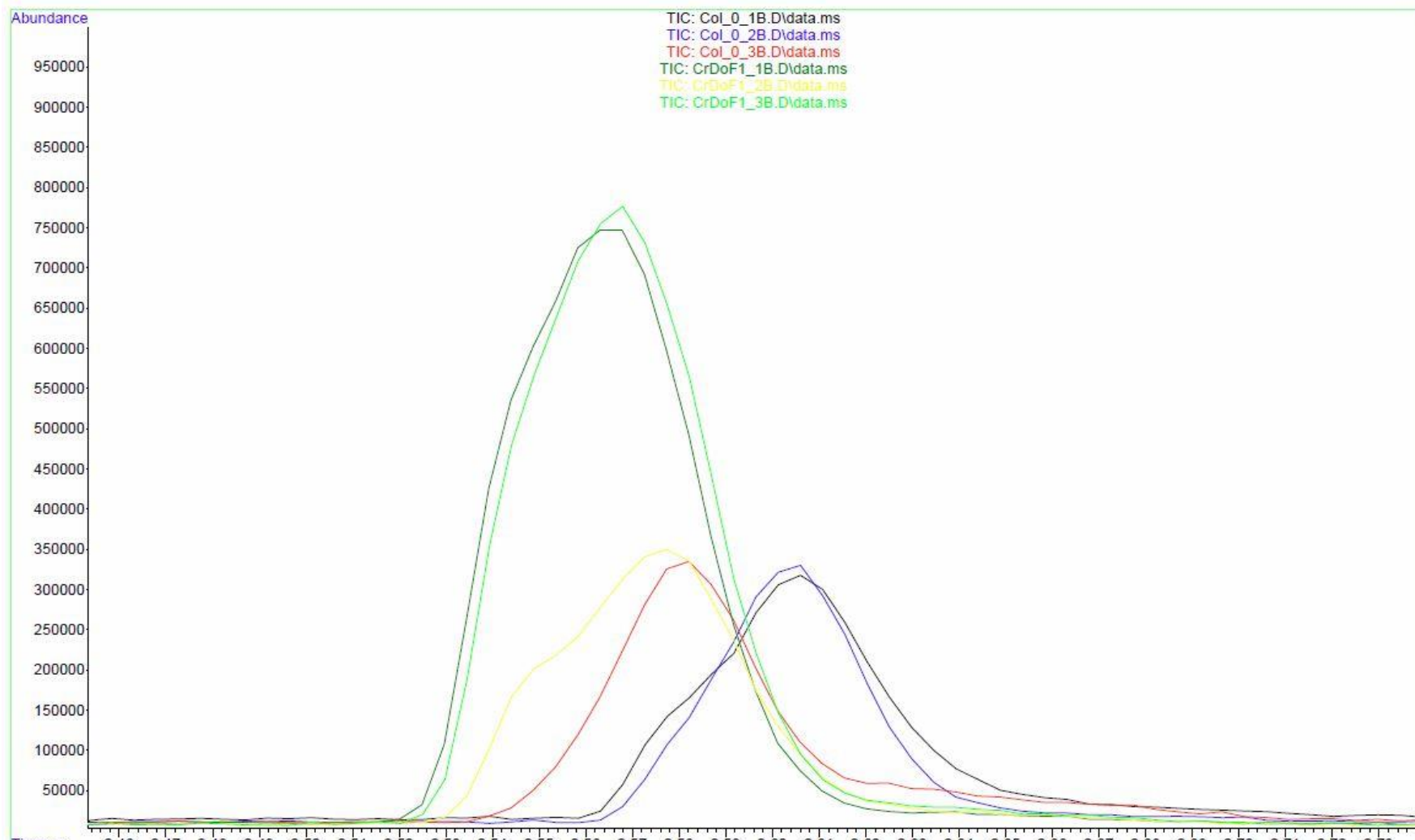


Figura 1. Cromatograma donde se compara el compuesto Hexanal entre las muestras de Col-0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

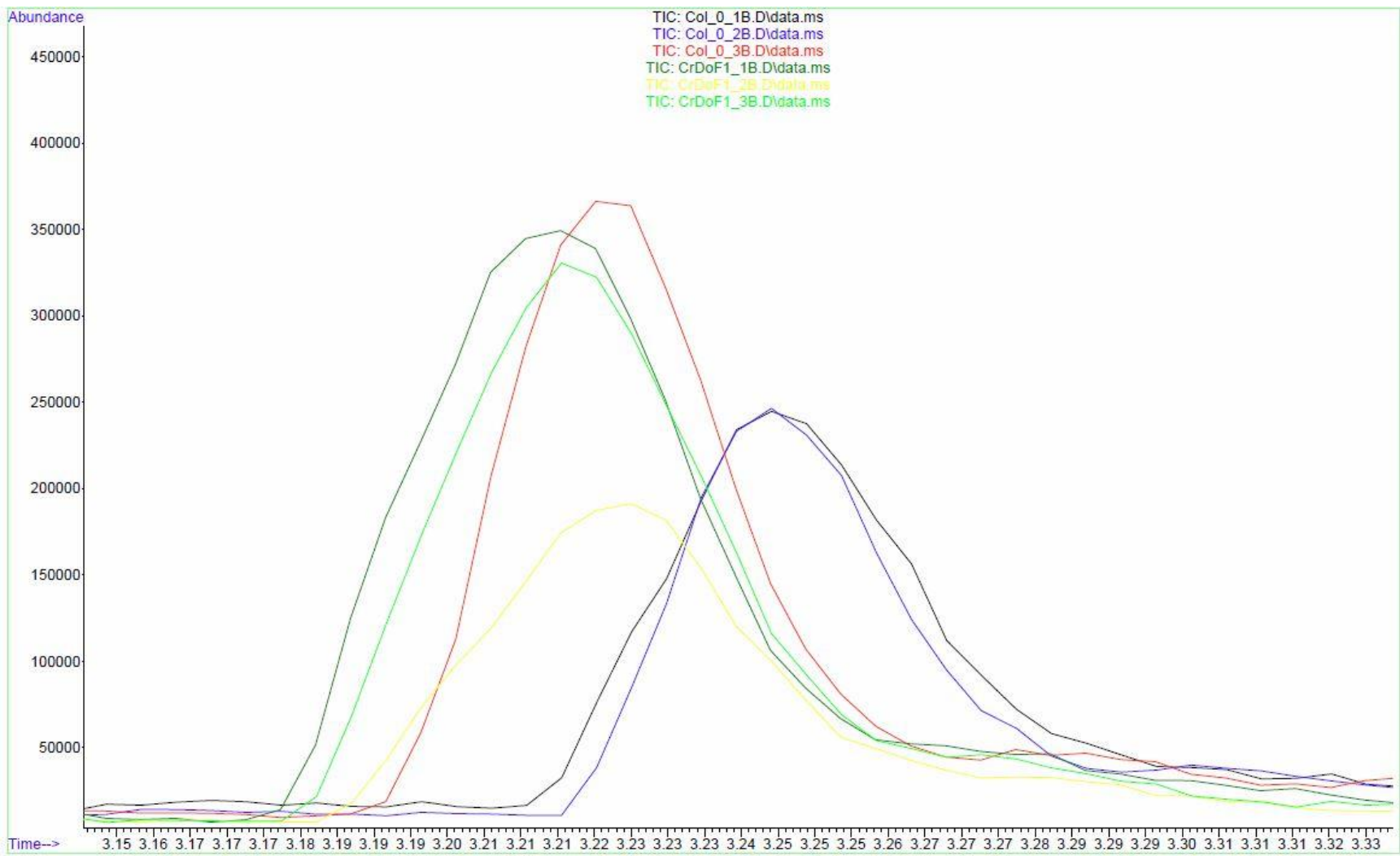


Figura2. Cromatograma donde se compara el compuesto (E)-2-Hexenal entre las muestras de Col- 0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

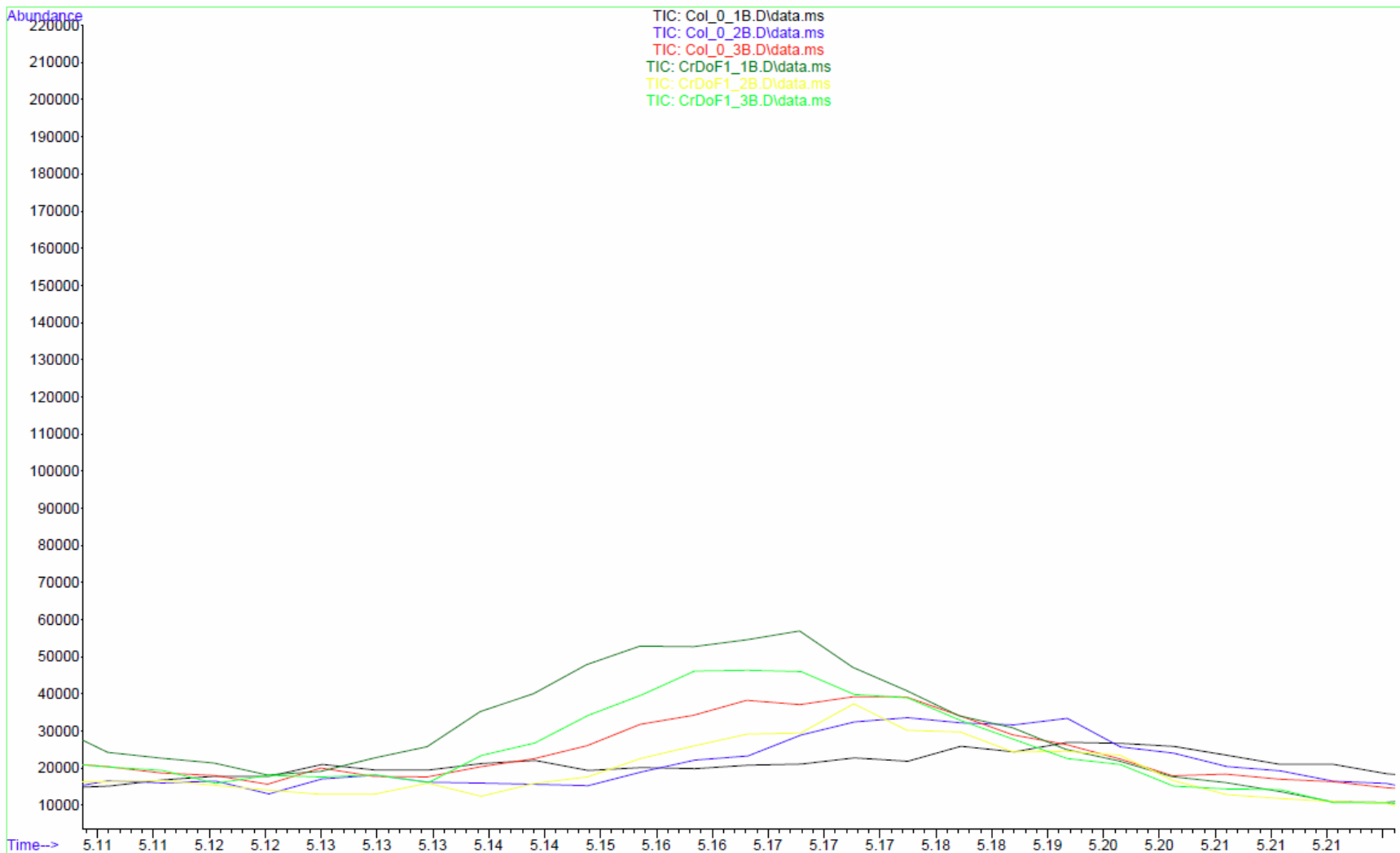


Figura 3. Cromatograma donde se compara el compuesto Benzaldehído entre las muestras de Col-0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

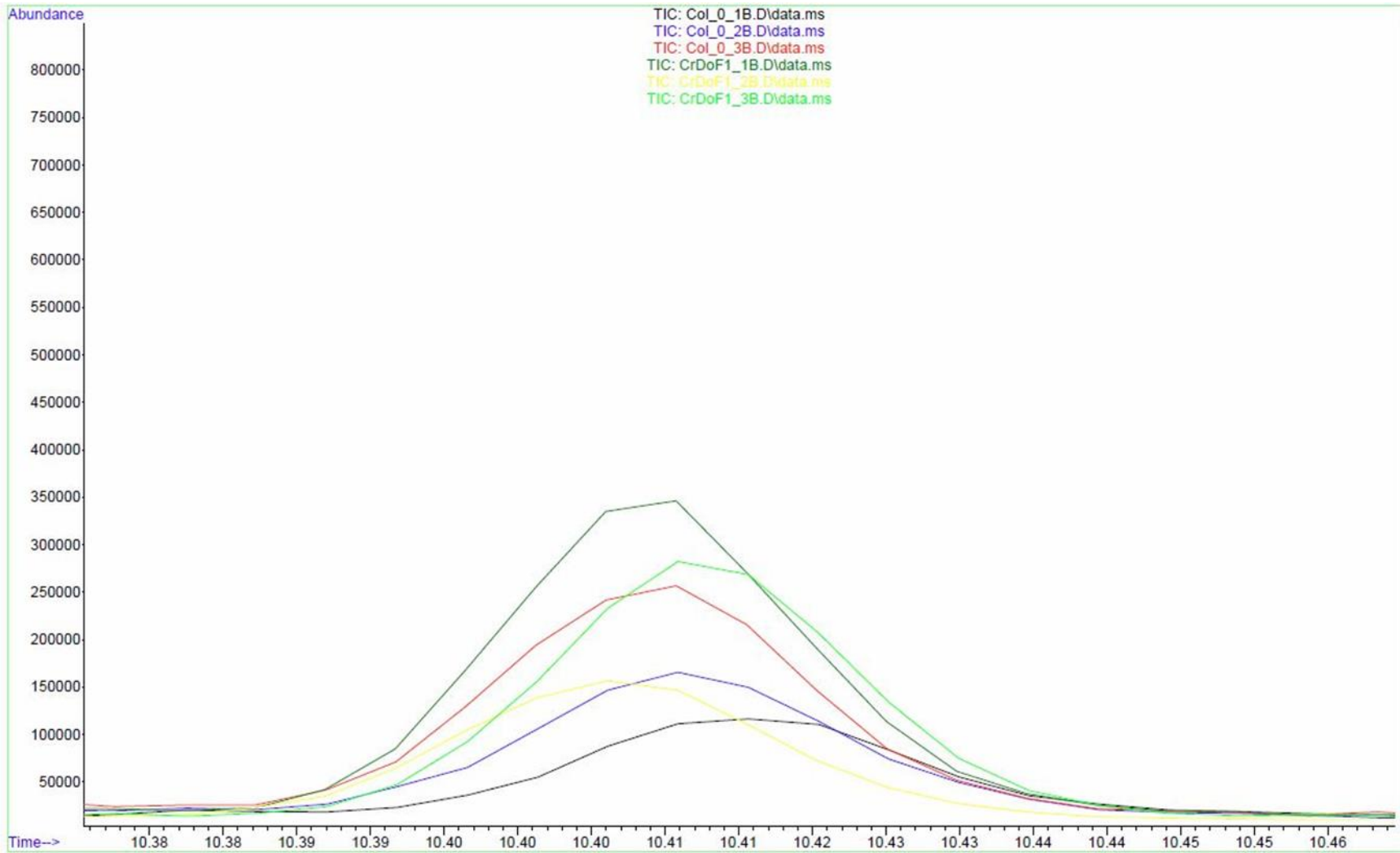


Figura 4. Cromatograma donde se compara el compuesto β -Cyclocitral entre las muestras de Col-0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

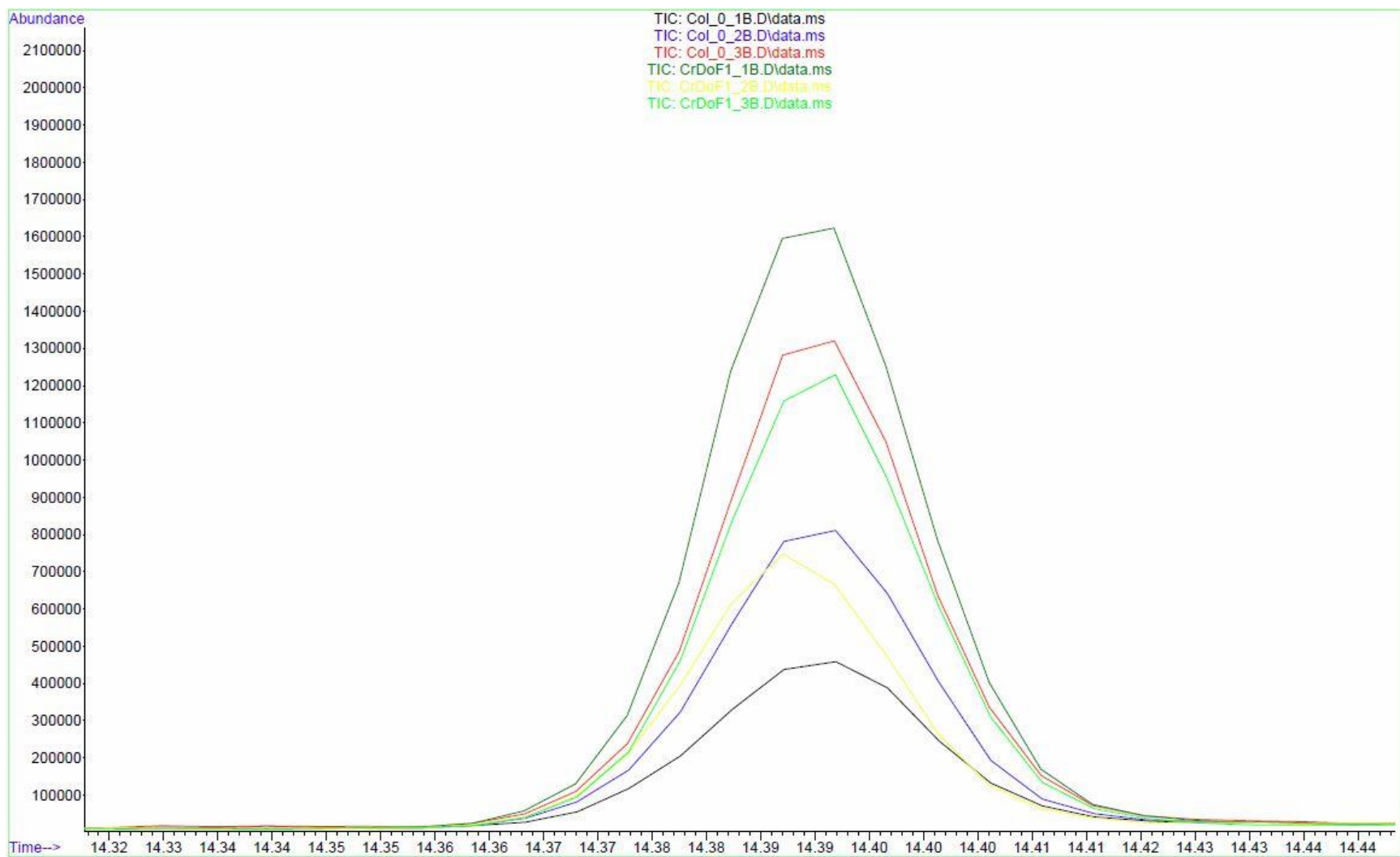


Figura 5. Cromatograma donde se compara el compuesto β -Ionona entre las muestras de Col-0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

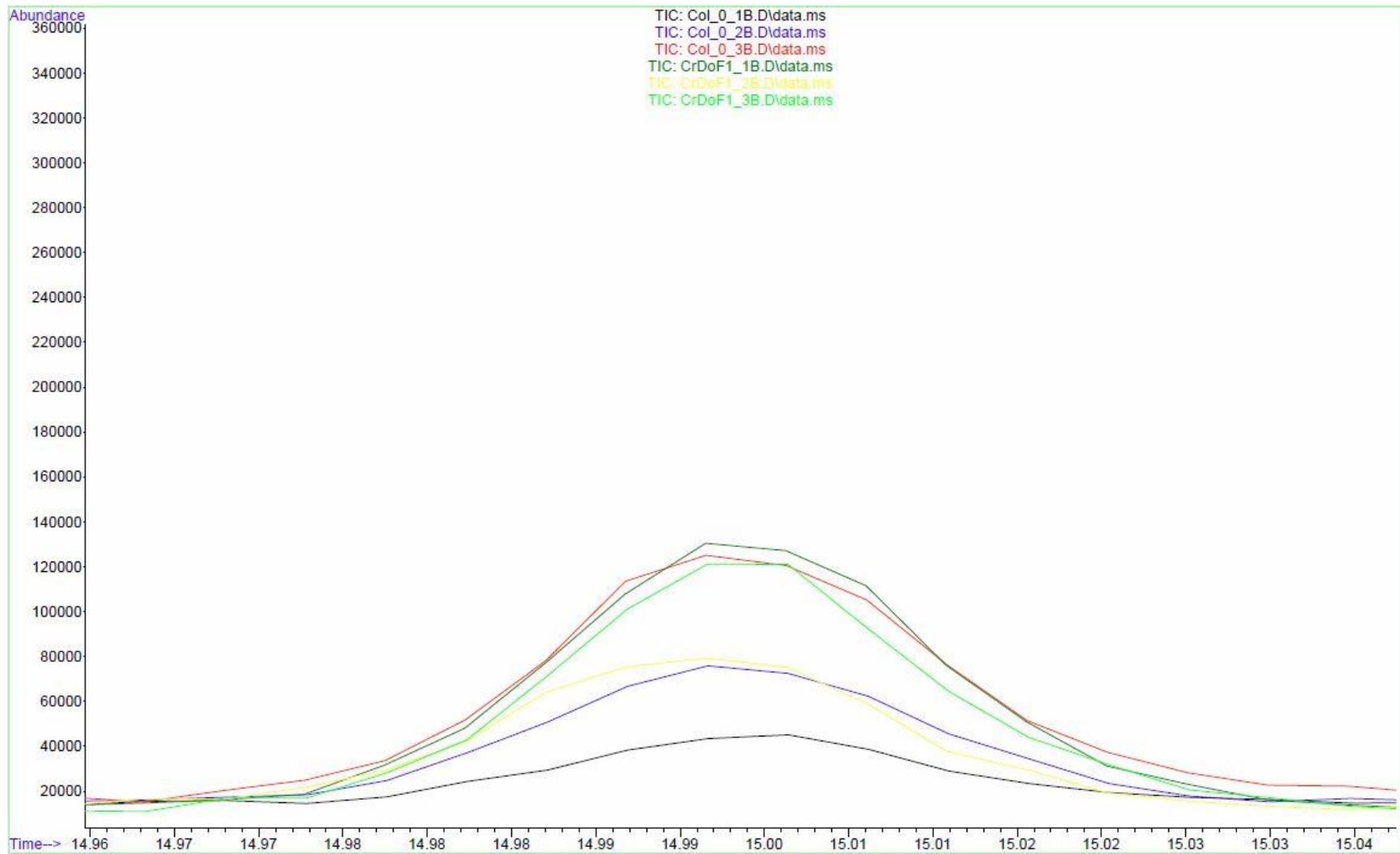


Figura 6. Cromatograma donde se compara el compuesto Dihydroactinidiolide entre las muestras de Col-0 y de CrDOF1 para el punto de muestreo B (14:00h a 20:00h).

ANEXO III

Ejemplo de perfil de volátiles: línea Col-0_1 en el punto de muestreo A (08:00h a 14:00h)

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
Data File : Col 0 1B.D
Acq On : 5 Jun 2015 16:23
Operator : MJ
Sample :
Misc :
ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.277	9.42	C:\Database\W10N11 Full.L 2-Propanone \$\$ Acetone \$\$ Methyl k etone \$\$ (CH3)2CO \$\$.beta.-KETOPR OPANE \$\$ 2-PROPANON \$\$ ACETON \$\$ A CETON (GERMAN, DUTCH, POLISH) \$\$ A CETONE (2-PROPANONE) \$\$ ACETONE (N F) \$\$ ACETONE OIL \$\$ ALLYLIC ALCOH OL \$\$ CHEVRON ACETONE \$\$ DIMETHYL KETONE Butane \$\$ A 21 \$\$ A 21 (LOWING AGE NT) \$\$ A-17 \$\$ BU-GAS \$\$ BUTANE, P URE \$\$ BUTANE,N- \$\$ BUTANI \$\$ BUTY L HYDRIDE \$\$ Diethyl \$\$ Freon 600 \$\$ HC 600 \$\$ HC 600 (HYDROCARBON) \$\$ Liquefied petroleum gas \$\$ LPG \$\$ METHYLETHYLMETHANE \$\$ n-Butane \$\$ N-C4H10 Acetic acid, trifluoro-, anhydride \$\$ (2,2,2-trifluoroacetyl) 2,2,2- trifluoroacetate \$\$ (TRIFLUOROACET IC)ANHYDRYDE \$\$ 2,2,2-trifluoroace tic acid (2,2,2-trifluoro-1-oxoeth yl) ester \$\$ 2,2,2-trifluoroacetic acid (2,2,2-trifluoroacetyl) este	734	000067-64-1	49
			Butane \$\$ A 21 \$\$ A 21 (LOWING AGE NT) \$\$ A-17 \$\$ BU-GAS \$\$ BUTANE, P URE \$\$ BUTANE,N- \$\$ BUTANI \$\$ BUTY L HYDRIDE \$\$ Diethyl \$\$ Freon 600 \$\$ HC 600 \$\$ HC 600 (HYDROCARBON) \$\$ Liquefied petroleum gas \$\$ LPG \$\$ METHYLETHYLMETHANE \$\$ n-Butane \$\$ N-C4H10 Acetic acid, trifluoro-, anhydride \$\$ (2,2,2-trifluoroacetyl) 2,2,2- trifluoroacetate \$\$ (TRIFLUOROACET IC)ANHYDRYDE \$\$ 2,2,2-trifluoroace tic acid (2,2,2-trifluoro-1-oxoeth yl) ester \$\$ 2,2,2-trifluoroacetic acid (2,2,2-trifluoroacetyl) este	827	000106-97-8	47
			Acetic acid, trifluoro-, anhydride \$\$ (2,2,2-trifluoroacetyl) 2,2,2- trifluoroacetate \$\$ (TRIFLUOROACET IC)ANHYDRYDE \$\$ 2,2,2-trifluoroace tic acid (2,2,2-trifluoro-1-oxoeth yl) ester \$\$ 2,2,2-trifluoroacetic acid (2,2,2-trifluoroacetyl) este	227568	000407-25-0	9
2	1.387	0.21	C:\Database\W10N11 Full.L Propiophenone, 2'-(trimethylsiloxy)- \$\$ Trimethylsilyl ether of o-hy droxypropiophenone \$\$ 1-(2-[(Trime thylsilyl)oxy]phenyl)-1-propanone Tetrasiloxane, decamethyl- \$\$ 1,1, 1,3,3,5,5,7,7,7-DECAMETHYLTETRASIL OXANE \$\$ Decamethyltetrasiloxane \$ \$ KF 96L1.5 \$\$ Trimethylsilyl)-{[m ethyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]o xytrimethylsilane} \$\$ tris[(Trimet hylsilyl)oxy]-methylsilane \$\$ CD37 80 \$\$ D3780 Benzene, 2-[(tert-butyl)dimethylsil yl)oxy]-1-isopropyl-4-methyl- \$\$ t ert-Butyl(2-isopropyl-5-methylphen oxy)dimethylsilane #	266795	033342-87-9	38
			Propiophenone, 2'-(trimethylsiloxy)- \$\$ Trimethylsilyl ether of o-hy droxypropiophenone \$\$ 1-(2-[(Trime thylsilyl)oxy]phenyl)-1-propanone Tetrasiloxane, decamethyl- \$\$ 1,1, 1,3,3,5,5,7,7,7-DECAMETHYLTETRASIL OXANE \$\$ Decamethyltetrasiloxane \$ \$ KF 96L1.5 \$\$ Trimethylsilyl)-{[m ethyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]o xytrimethylsilane} \$\$ tris[(Trimet hylsilyl)oxy]-methylsilane \$\$ CD37 80 \$\$ D3780 Benzene, 2-[(tert-butyl)dimethylsil yl)oxy]-1-isopropyl-4-methyl- \$\$ t ert-Butyl(2-isopropyl-5-methylphen oxy)dimethylsilane #	544673	000141-62-8	38
			Propiophenone, 2'-(trimethylsiloxy)- \$\$ Trimethylsilyl ether of o-hy droxypropiophenone \$\$ 1-(2-[(Trime thylsilyl)oxy]phenyl)-1-propanone Tetrasiloxane, decamethyl- \$\$ 1,1, 1,3,3,5,5,7,7,7-DECAMETHYLTETRASIL OXANE \$\$ Decamethyltetrasiloxane \$ \$ KF 96L1.5 \$\$ Trimethylsilyl)-{[m ethyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]o xytrimethylsilane} \$\$ tris[(Trimet hylsilyl)oxy]-methylsilane \$\$ CD37 80 \$\$ D3780 Benzene, 2-[(tert-butyl)dimethylsil yl)oxy]-1-isopropyl-4-methyl- \$\$ t ert-Butyl(2-isopropyl-5-methylphen oxy)dimethylsilane #	403055	330455-64-6	35
3	1.439	0.20	C:\Database\W10N11 Full.L 7-Chloro-4-methoxy-3-methylquinoli ne 4-Phenylbutan-2-ol, tert-butyl dime thylsilyl ether \$\$ 2-Butanol, 4-ph enyl-O-tert-butyl dimethylsilyl- \$\$ 2-tert-Butyl dimethylsilyloxy-4-ph enylbutane Hydrocinnamic acid, benzyl dimethyl silyl ester	219978	2000219-97-8	59
			7-Chloro-4-methoxy-3-methylquinoli ne 4-Phenylbutan-2-ol, tert-butyl dime thylsilyl ether \$\$ 2-Butanol, 4-ph enyl-O-tert-butyl dimethylsilyl- \$\$ 2-tert-Butyl dimethylsilyloxy-4-ph enylbutane Hydrocinnamic acid, benzyl dimethyl silyl ester	403040	2000403-04-0	56
			7-Chloro-4-methoxy-3-methylquinoli ne 4-Phenylbutan-2-ol, tert-butyl dime thylsilyl ether \$\$ 2-Butanol, 4-ph enyl-O-tert-butyl dimethylsilyl- \$\$ 2-tert-Butyl dimethylsilyloxy-4-ph enylbutane Hydrocinnamic acid, benzyl dimethyl silyl ester	510980	2000510-98-0	45
4	1.758	0.11	C:\Database\W10N11 Full.L 3-Acetyl-1-(4-chlorophenyl)-5-hydr oxymethyl-4,5-dihydro-1H-[1,2,4]tr iazin-6-one \$\$ 3-Acetyl-1-(4-chlor	455624	139455-88-2	9

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ophenyl)-5-(hydroxymethyl)-4,5-dihydro-1,2,4-triazin-6(1H)-one #			
			6-Chloro-1-(3-oxopentyl)-3,4-dihydro-(1H)-quinoline-2-thione	456037	2000456-03-7	9
			1-(6-chloro-2-sulfanylidene-3,4-dihydroquinolin-1-yl)pentan-3-one			
			Diethyl E-4-[(Z)-1,3,4,5,6,7-hexahydroazepin-2-ylidene]-2-pentenedioate	456502	2000456-50-2	7
5	1.825	0.65	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Pyrrole, 1-(phenylsulfonyl)-Pyrrole, 1-(phenylsulfonyl)-(PHENYLSULFONYL)-1H-PYRROLE (benzenesulfonyl)pyrrole (PHENYLSULFONYL)PYRROLE (BENZENESULFONYL)-1H-PYRROLE N-(BENZENESULFONYL)PYRROLE NSC 102019	219785	016851-82-4	50
			tert-Butyldimethylsilyl trifluoroethanesulfonate	399894	069739-34-0	47
			Silanediol, dimethyl-dimethylsilane	7433	001066-42-8	38
6	1.858	0.28	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclohexanecarboxamide, N-furfuryl- N-(2-Furylmethyl)cyclohexanecarboxamide #	220624	006341-32-8	43
			2,4-Hexadiene, 2-methyl-yl-2,4-hexadiene	8874	028823-41-8	43
			1,4-Hexadiene, 5-methyl-yl-1,4-hexadiene	8915	000763-88-2	43
7	1.954	0.09	C:\Database\W10N11 Full.L 4-Bromo-3-chloroaniline, 4-bromo-3-chloro-2H-BENZO[4,5]THIAZOLO[2,3-C][1,2,4]TRIAZOLE-3-THIONE	213093	021402-26-6	14
			2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3]benzothiazole-1-thione	219528	2000219-52-8	10
			Ethane, 1-(4,4,4-trifluoro-1,3-dithiopropyl)-2-(3,3,3-trifluoro-1,2-dithiopropyl)-1-[(trifluoromethyl)disulfanyl]-2-((trifluoromethyl)sulfanyl)methyl)sulfanyl)ethane	538556	2000538-55-6	10

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			#			
8	2.239	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L o-(p-Tolyl) 1-azetidinecarbothioate e \$\$ o-(4-Methylphenyl) 1-azetidinecarbothioate # Arsenous acid, tris(trimethylsilyl) ester 2-Methyl-4-cyclopentylidenemethyl-5-nitrothiazole e \$\$ 4-(cyclopentylidenemethyl)-2-methyl-5-nitro-1,3-thiazole	220014	010560-24-4	50
				634220	055429-29-3	43
				272740	2000272-74-0	37
9	2.320	0.11	C:\Database\W10N11 Full.L 1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane e \$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE e \$\$ HYDROMETHYLSILOXANE e \$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILOXY)-SILANE e \$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]-silane e \$\$ TRISILOXANE, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-, Propiophenone, 2'-(trimethylsilyloxy)- e \$\$ 1-(2-[(TRIMETHYLSILYL)OXY]PHENYL)-1-PROPANONE e \$\$ 1-(2-trimethylsilyloxyphenyl)propan-1-one e \$\$ TRIMETHYLSILYL ETHER OF O-HYDROXYPROPIOPHENONE e \$\$ TRIMETHYLSILYL ETHER OF O-HYDROXYPROPIOPHENONE e 3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane e \$\$ Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester e \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate e \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate (computer-generated name)	264734	001873-88-7	49
				266794	033342-87-9	43
				501931	003555-45-1	37
10	2.363	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L 3-amino-6-methylthieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamide e \$\$ Thieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamide, 3-amino-6-methyl- e Thieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamide, 3-amino-6-methyl- e Thietane, 3,3,4-trimethyl-2,2-diphenoxy- e \$\$ 3,3,4-TRIMETHYL-2,2-DIPHENOXYTHIETANE	219642	2000219-64-2	47
				219643	2000219-64-3	47
				517025	050468-87-6	43
11	2.606	3.65	C:\Database\W10N11 Full.L Hexanal e \$\$ 1-HEXANAL e \$\$ ALDEHYDE C-6 e \$\$ C6 ALDEHYDE e \$\$ CAPROALDEHYDE e \$\$ CAPROIC ALDEHYDE e \$\$ CAPRONALDEHYDE e \$\$ HEXALDEHYDE e \$\$ HEXAN-1-AL e \$\$ HEXANALDEHYDE e \$\$ HEXOIC ALDEHYDE e \$\$ HEXYLALDEHYDE e \$\$ KAPRONALDEHYDE e \$\$ N-C5H11CHO e \$\$ N-CAPROALDEHYDE e \$\$ UN1207 Cyclopropyl carbinol e \$\$ CYCLOPROPANEMETHANOL e \$\$ CYCLOPROPANEMETHYL A	11525	000066-25-1	97
				2165	002516-33-8	35

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			LCOHOL \$\$ CYCLOPROPYL-METHANOL \$\$ CYCLOPROPYLCARBINYL ALCOHOL \$\$ CYC LOPROPYLMETHYL ALCOHOL \$\$ HYDROXYM ETHYLCYCLOPROPANE \$\$ AI3-39215 \$\$ EINECS 219-735-5 \$\$ NSC 85925 Ethene, ethoxy- \$\$ 1-ETHOXYETHENE 2146 000109-92-2 27 \$\$ 1-ETHOXYETHYLENE \$\$ AGRISYNTH E VE \$\$ CH2=CHOC2H5 \$\$ ethenoxyethan e \$\$ ETHER, ETHYL VINYL \$\$ ETHER, ETHYL VINYL (INHIBITED) \$\$ ETHER, VINYL ETHYL \$\$ ETHOXYETHENE \$\$ ETH OXYETHYLENE \$\$ ETHYL ETHENYL ETHER \$\$ EVE			
12	2.849	8.02	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclotrisiloxane, hexamethyl- \$\$ D 264637 000541-05-9 91 imethylsiloxane cyclic trimer \$\$ H examethylcyclotrisiloxane \$\$ CH726 0 \$\$ 2,2,4,4,6,6-Hexamethyl-1,3,5, 2,4,6-trioxatrisilinane # 1H-Isoindole-1,3(2H)-dithione, 2-e 219865 035373-06-9 83 thyl- \$\$ 2-ethyl-1H-isoindole-1,3(2H)-dithione \$\$ N-ETHYL-1,3-DITHIO ISOINDOLINE Tris(tert-butyltrimethylsilyloxy)ar 839409 2000839-40-9 78 sane \$\$ Arsenous acid, tris(tert-b utyltrimethylsilyl) ester			
13	3.249	2.46	C:\Database\W10N11 Full.L 2-Hexenal, (E)- \$\$ (E)-2-Hexenal \$ 9806 006728-26-3 97 \$ n-Hex-trans-2-enal \$\$ trans-Hex- 2-enal \$\$ trans-2-Hexen-1-al \$\$ tr ans-2-Hexenal \$\$ Leaf aldehyde \$\$ 2-trans-Hexenal \$\$ (2E)-2-Hexenal \$\$ 2-(E)-Hexenal \$\$ (E)-2-Hexenal \$\$ (E)-2-Hexen-1-al \$\$ (E)-Hex-2-e n-1-al 2-Hexenal \$\$ (2E)-2-HEXENAL \$\$ (E) 9797 000505-57-7 95 -2-HEXEN-1-AL \$\$ (E)-2-hexen-al \$\$ (E)-HEX-2-ENAL \$\$ (E)-N-C3H7CH=CH CHO \$\$.beta.-propyl-acrolein \$\$ 2 -(E)-HEXENAL \$\$ 2-Hexen-1-al \$\$ 2- HEXENAL, (2E)- \$\$ 2-HEXENAL, (E)- \$\$ 2-HEXENAL, (Z)- \$\$ 2-HEXENALDEH YDE 3-Methyl-1,3-pentadien-5-ol \$\$ (2E) 9824 2000009-82-4 58)-3-methyl-1-penta-2,4-dienol \$\$ (2E)-3-METHYL-2,4-PENTADIEN-1-OL \$\$ (2E)-3-methylpenta-2,4-dien-1-ol \$\$ (E)-3-METHYL-2,4-PENTADIEN-1-OL \$\$ (E)-3-METHYL-2,4-PENTADIENOL \$ \$ (E)-3-METHYLPENTA-2,4-DIEN-1-OL			
14	3.320	0.18	C:\Database\W10N11 Full.L Tris(tert-butyltrimethylsilyloxy)ar 839409 2000839-40-9 47 sane \$\$ Arsenous acid, tris(tert-b utyltrimethylsilyl) ester 1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ 266834 017151-09-6 43			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			Trimethyl[2-(trimethylsilyl)phenyl]silane #			
			D-Glucitol, hexaacetate \$\$ 1,2,3,4	805668	007208-47-1	43
			,5,6-HEXA-O-ACETYLHEXITOL \$\$ 1,2,3			
			,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GALACTITOL			
			\$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GLUCITOL			
			\$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-MANNITOL			
			\$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-L-IDITOL			
			\$\$ D-MANNITOL, HEXACETATE			
15	3.492	0.23	C:\Database\W10N11 Full.L			
			1-HEXANOL \$\$ 1-HEXANO \$\$ 1-hexanol	13580	000111-27-3	43
			1-hydroxy-hexanen-hexanol n-hexyl			
			alcoholamylcarbinol pentylcarbinol			
			lcaproyl alcohol \$\$ 1-HEXANOL, ALUMINUM SALT			
			\$\$ 1-HEXYL ALCOHOL \$\$ 1-hydroxy-hexane			
			\$\$ ALCOHOL(C6) \$\$ ALUMINIUM TRI(HEXANOLATE)			
			\$\$ AMYLCARBINOL			
			1-Pentanol, 4-methyl- \$\$ Isohexyl alcohol	13389	000626-89-1	43
			\$\$ Isohexanol \$\$ 2-Methyl-5-pentanol			
			\$\$ 4-Methyl-1-pentanol \$\$ 4-Methylpentan-1-ol			
			\$\$ 4-Methylpentanol \$\$ Pentanol, 4-methyl-			
			Cyclopentane, methyl- \$\$ Methylcyclopentane	4631	000096-37-7	38
			\$\$ UN 2298			
16	3.987	0.24	C:\Database\W10N11 Full.L			
			Heptanal \$\$ n-Heptaldehyde \$\$ n-Heptanal	21918	000111-71-7	35
			\$\$ n-Heptylaldehyde \$\$ Enanthaldehyde			
			\$\$ Enanthaldehyde \$\$ Enanthic aldehyde			
			\$\$ Enanthole \$\$ Heptaldehyde \$\$ Heptanaldehyde			
			\$\$ Heptyl aldehyde \$\$ Oenanthaldehyde			
			\$\$ Oenanthaldehyde \$\$ Oenanthic aldehyde			
			\$\$ Oenanthol			
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl- (CAS) \$\$ 1,1,3,3,5,5-HEXAMETHYL-CYCLOHEXASILOXANE	264636	000541-05-9	35
			\$\$ Hexamethylcyclotrisiloxane \$\$ HEXAMETHYL-CYCLOTRISILOXANE			
			\$\$ Dimethylsiloxane cyclic trimer \$\$ CH7260			
			\$\$ 2,2,4,4,6,6-Hexamethyl-1,3,5,2,4,6-trioxatrisiloxane			
			(E)-6-(N,N-Diallylamino)-2-methyl-4-hexen-3-ol	227254	2000227-25-4	25
			\$\$ (4E)-6-(diallylamino)-2-methyl-4-hexen-3-ol			
17	4.030	0.07	C:\Database\W10N11 Full.L			
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl- \$\$ 2,2,4,4,6,6-HEXAMETHYL-1,3,5,2,4,6-TRIOXATRISILINANE	264641	000541-05-9	52
			\$\$ 1,1,3,3,5,5-HEXAMETHYL-CYCLOHEXASILOXANE			
			\$\$ 2,2,4,4,6,6-hexamethyl-1,3,5,2,4,6-trioxatrisilin			
			\$\$ DC 246 \$\$ Dimethylsiloxane cyclic trimer			
			\$\$ SDK 10 \$ AI3-62005			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane \$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE \$\$ HYDROMETHYLSILOXANE \$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILOXY)-SILANE \$ \$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyloxy-silane \$\$ TRISILOXANE, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-, Tris(tert-butyltrimethylsilyloxy)arsane \$\$ Arsenous acid, tris(tert-butyltrimethylsilyl) ester	264734	001873-88-7	47
18	5.130	0.03	C:\Database\W10N11 Full.L 1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane \$\$ Bis(trimethylsiloxy)methylsilane \$\$ Trisiloxane, 1,1,1,3,5,5,5-heptamethyl- \$\$ Trisiloxane, 1,1,1,3,5,5,5-heptamethyl-, 7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hexahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4-yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizine \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$ 7-Morpholinoindolizine D-Glucitol, hexaacetate \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYLHEXITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GALACTITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GLUCITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-MANNITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-L-IDITOL \$\$ D-MANNITOL, HEXAACETATE	264735	001873-88-7	47
			7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hexahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4-yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizine \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$ 7-Morpholinoindolizine	223967	2000223-96-7	47
			D-Glucitol, hexaacetate \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYLHEXITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GALACTITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GLUCITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-MANNITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-L-IDITOL \$\$ D-MANNITOL, HEXAACETATE	805668	007208-47-1	45
19	5.144	0.03	C:\Database\W10N11 Full.L 1-[(2-Nitrophenyl)amino]pyrrolidine \$\$ N-(2-nitrophenyl)-1-pyrrolidinamine \$\$ N-(2-nitrophenyl)-N-(1-pyrrolidinyl)amine Benzene, 2-[(tert-butyltrimethylsilyloxy)-1-isopropyl-4-methyl-tert-Butyl(2-isopropyl-5-methylphenoxy)dimethylsilane # 1-(3-Nitrophenyl)hexahydropyridazine	219904	2000219-90-4	43
			Benzene, 2-[(tert-butyltrimethylsilyloxy)-1-isopropyl-4-methyl-tert-Butyl(2-isopropyl-5-methylphenoxy)dimethylsilane #	403055	330455-64-6	43
			1-(3-Nitrophenyl)hexahydropyridazine	219933	2000219-93-3	43
20	5.197	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Indole-1-carboxylic acid, 2,3-dihydro-3-hydroxy-, ethyl ester, (+-)- \$ \$ 3-hydroxy-2,3-dihydroindole-1-carboxylic acid ethyl ester \$ \$ 3-hydroxyindoline-1-carboxylic acid ethyl ester \$\$ ethyl 3-hydroxy-1-indolinecarboxylate 7,7,9,9,11,11-Hexamethyl-3,6,8,10,12,15-hexaoxa-7,9,11-trisilaheptadecane 8-Chloro-5-quinolinecarboxylic acid	220361	123197-69-3	47
			7,7,9,9,11,11-Hexamethyl-3,6,8,10,12,15-hexaoxa-7,9,11-trisilaheptadecane	727661	2000727-66-1	38
			8-Chloro-5-quinolinecarboxylic acid	219752	121490-68-4	27
21	5.758	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L 1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$	266834	017151-09-6	53

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			Trimethyl[2-(trimethylsilyl)phenyl]silane #			
			1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene	266829	013183-70-5	42
			Silane, 1,4-phenylenebis(trimethyl- - \$\$ Silane, p-phenylenebis(trimet hyl- \$\$ p-Bis(trimethylsilyl)benze ne \$\$ Benzene, p-bis(trimethylsily l)- \$\$ p-Phenylenebis(trimethylsil ane)			
			BENZENE, 1,4-BIS(TRIMETHYLSILYL)- \$\$ 1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Benzene, p-bis(trimethylsilyl)- \$\$ p-Bis(trimethylsilyl)benzene \$ \$ P-PHENYLENEBIS(TRIMETHYLSILANE) \$\$ SILANE, 1,4-PHENYLENEBIS*TRIMET HYL- \$\$ SILANE, 1,4-PHENYLENEBIS@T RIMETHYL-	266827	2000266-82-7	42
22	5.930	0.17	C:\Database\W10N11 Full.L N-(2-FURYL METHYL)CYCLOHEXANECARBOX AMIDE \$\$ CYCLOHEXANECARBOXAMIDE, N -FURFURYL- \$\$ N-(2-furanylmethyl)c yclohexanecarboxamide \$\$ N-(2-furf uryl)cyclohexanecarboxamide \$\$ N-(furan-2-ylmethyl)cyclohexanecarbox amide \$\$ NSC 46206	220623	006341-32-8	59
			Iodo-3,5-hexadiene \$\$ (3E)-6-iodan ylhexa-1,3-diene \$\$ (3E)-6-iodo-1, 3-hexadiene \$\$ (3E)-6-iodohexa-1,3 -diene	221417	2000221-41-7	38
			Furan, 2-pentyl- \$\$ 1-(2'-Furyl)pe ntane \$\$ 2-AMYL FURAN \$\$ 2-N-PENTYL FURAN \$\$ 2-PENTYL FURAN \$\$ BRN 0107 854 \$\$ EINECS 223-234-7 \$\$ FEMA NO . 3317	51618	003777-69-3	38
23	6.068	0.23	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Ethyl-5-methylcyclopentene \$\$ 2- Ethyl-3-methylcyclopentene \$\$ 1-Et hyl-5-methyl-1-cyclopentene #	17627	097797-57-4	30
			1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Trimethyl[2-(trimethylsilyl)phenyl]silane #	266834	017151-09-6	27
			Cyclohexene, 3-methyl- \$\$ 3-Methyl -1-cyclohexene \$\$ 3-Methylcyclohex -1-ene \$\$ 3-Methylcyclohexene \$\$ E INECS 209-717-5 \$\$ NSC 72091	8905	000591-48-0	25
24	6.182	4.56	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclotetrasiloxane, octamethyl- \$\$ 1,1,3,3,5,5,7,7 -octamethyl-cyclo -octa-siloxane \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8- OCTAMETHYL-[1,3,5,7,2,4,6,8]TETRAO XATETRASILOCANE \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8 -OCTAMETHYL-[1,3,5,7,2,4,6,8]TETRO XATETRASILOCANE \$\$ KF 994 \$\$ OMCTS \$\$ C09810	501769	000556-67-2	91
			Benzoic acid, 4-methyl-2-trimethyl	502691	2000502-69-1	72

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			silyloxy-, trimethylsilyl ester \$\$ Trimethylsilyl 4-methyl-2-[(trime thylsilyl)oxy]benzoate #			
			7H-Dibenzo[b,g]carbazole, 7-methyl - \$\$ 7-Methyl-7H-dibenzo[b,g]carba zole #	457559	003557-49-1	72
25	6.373	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L (5S,6aR,10aS)-5-Propyldecahydrodip yrrolo[1,2-a:1',2'-c]pyrimidine \$\$ 208 Tetreponerine 2	224734	172139-30-9	38
			Naphtho[2,1-b]furan, dodecahydro-6 ,9a-dimethyl-, [3aS-(3a.alpha.,5a. alpha.,6.alpha.,9a.beta.,9b.alpha.)]- \$\$ (3aS,5aS,6R,9aS,9bS)-6,9a-d imethyldecahydronaphtho[2,1-b]fu ran \$\$ 8.alpha.,12-EPOXY-13,14,15, 16,17,19-HEXANORLABDANE	225053	082079-85-4	35
			3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethy ltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diet hyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ D iethyl bis(trimethylsilyl) orthosi licate \$\$ Diethyl bis(trimethylsil yl) orthosilicate (computer-genera ted name)	501931	003555-45-1	25
26	6.768	0.23	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Hexanol, 2-ethyl- \$\$ 1-HEXANOL, 2-ETHYL-, TITANIUM(4+) SALT \$\$ 2 E THYL HEXANOL \$\$ 2-AETHYLHEXANOL \$\$ 2-EH \$\$ 2-ethyl-1-hexanol \$\$ 2-ET HYL-HEXAN-1-OL \$\$ 2-ETHYLHEXANOL-(1) \$\$ 2-ETHYLHEXYL ALCOHOL \$\$ 2-ET HYLHEXYL ORTHOTITANATE \$\$ AEROFROT H 88	40334	000104-76-7	53
			Dichloroacetic acid, 2-octyl ester \$\$ 1-Methylheptyl dichloroacetate #	323721	096980-53-9	47
			3-Buten-2-ol, 4-[2,6,6-trimethyl-5 -(3-methyl-2-butenyl)-1-cyclohexen -1-yl]- \$\$ (3E)-4-[2,6,6-trimethyl -5-(3-methyl-2-butenyl)-1-cyclohex en-1-yl]-3-buten-2-ol \$\$ (R)-4-[5' -(3"-METHYL-2"-BUTENYL)-2',6',6'-T RIMETHYL-1'-CYCLOHEXENYL]-3-BUTEN- 2-OL	397361	092510-00-4	43
27	6.801	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L 2-Methoxy-1,3-bis(trimethylsilyl)b enzene \$\$ 2,6-bis(trimethylsilyl)p henyl methyl ether \$\$ [2-methoxy-3 -(trimethylsilyl)phenyl](trimethyl)silane	362998	092669-90-4	38
			3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethy ltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diet hyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ D iethyl bis(trimethylsilyl) orthosi licate \$\$ Diethyl bis(trimethylsil	501931	003555-45-1	38

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			yl) orthosilicate (computer-generated name)			
			1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane \$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE \$\$ HYDROMETHYLSILOXANE \$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILYLOXY)-SILANE \$	264734	001873-88-7	37
			\$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyl]oxy-silane \$\$ TRISILOXANE, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-,			
28	6.878	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Indole, 4,5,6-trimethoxy- 5,6-trimethoxy-1H-indole \$\$ 4,5,6-TRIMETHOXYINDOLE \$\$ INDOLE, 4,5,6-TRIMETHOXY- 3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate (computer-generated name)	220144	030448-04-5	35
			(3aR,8aR)-2,2-Dimethyl-6-[(1R)-(1-naphthyl)-2-nitroethyl]-4,4,8,8-tetraphenylperhydro-6-lambda.5-[1,3]dioxolo[4,5-e][1,3,2]dioxaphosphepin-6-one	501931	003555-45-1	32
			910004 000000-00-0 32			
29	7.401	0.14	C:\Database\W10N11 Full.L 7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hexahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4-yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizine \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$ 7-Morpholinoindolizine tert-Butyl(5-isopropyl-2-methylphenoxy)dimethylsilane	223967	2000223-96-7	27
			403018 2000403-01-8 22			
			1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane \$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE \$\$ HYDROMETHYLSILOXANE \$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILYLOXY)-SILANE \$	264734	001873-88-7	14
			\$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyl]oxy-silane \$\$ TRISILOXANE, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-,			
30	7.439	0.11	C:\Database\W10N11 Full.L tert-Butyl(5-isopropyl-2-methylphenoxy)dimethylsilane Corydaldine \$\$ 6,7-Dimethoxy-3,4-dihydro-1(2H)-isoquinolinone # Benz[b]-1,4-oxazepine-4(5H)-thione # 2,3-dihydro-2,8-dimethyl-2,8-Dimethyl-2,3-dihydro-1,5-benzoxazepine-4(5H)-thione #	403018	2000403-01-8	43
			220201 000493-49-2 43			
			220053 2000220-05-3 38			
31	7.535	0.07	C:\Database\W10N11 Full.L 4-Cyanobenzophenone \$\$ Benzointrile, 4-benzoyl- \$\$ 4-Cyano-benzophenone \$\$ 4-Benzoylbenzointrile # \$\$ 4	221130	001503-49-7	47

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			-Cyano-benzophenone			
			CARBAMIC ACID, N-(2,5-DIMETHYLPHENYL)-, PROPYL ESTER	220734	2000220-73-4	35
			hylphenyl)carbamic acid propyl ester			
			\$\$\$ PROPYL 2,5-DIMETHYLPHENYL CARBAMATE			
			\$\$\$ propyl N-(2,5-dimethylphenyl) carbamate			
			Acetophenone	27495	000098-86-2	27
			\$\$\$ Acetophenon			
			\$\$\$ Benzoyl methide			
			\$\$\$ Hypnon			
			\$\$\$ Hypnone			
			\$\$\$ Methyl phenyl ketone			
			\$\$\$ Phenyl methyl ketone			
			\$\$\$ 1-Phenylethanone			
			\$\$\$ Acetylbenzene			
			\$\$\$ 1-Phenyl-1-ethanone			
			\$\$\$ Ketone, methyl phenyl-			
			\$\$\$ USAF EK-496			
			\$\$\$ Dymex			
32	7.649	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L			
			Galactitol, hexaacetate, D-	805649	014330-96-2	42
			\$\$\$ 1,2,3,4,5,6-hexa-O-acetyl-D-galactitol			
			\$\$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetoxyhexyl]ester			
			\$\$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetyloxyhexyl]ester			
			\$\$\$ GALACTITOL-1,2,3,4,5,6-HEXAACETATE			
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	264636	000541-05-9	38
			\$\$\$ (CAS) 1,1,3,3,5,5-HEXAMETHYL-CYCLOHEXASILOXANE			
			\$\$\$ Hexamethylcyclotrisiloxane			
			\$\$\$ HEXAMETHYL-CYCLOTRISILOXANE			
			\$\$\$ Dimethylsiloxane cyclic trimer			
			\$\$\$ CH7260			
			\$\$\$ 2,2,4,4,6,6-Hexamethyl-1,3,5,2,4,6-trioxatrisiloxane			
			BENZENE, 1,4-BIS(TRIMETHYLSILYL)-	266827	2000266-82-7	38
			\$\$\$ 1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene			
			\$\$\$ Benzene, p-bis(trimethylsilyl)-			
			\$\$\$ p-Bis(trimethylsilyl)benzene			
			\$\$\$ P-PHENYLENEBIS(TRIMETHYLSILANE)			
			\$\$\$ SILANE, 1,4-PHENYLENEBIS*TRIMETHYL-			
			\$\$\$ SILANE, 1,4-PHENYLENEBIS*TRIMETHYL-			
33	7.739	0.15	C:\Database\W10N11 Full.L			
			Galactitol, hexaacetate, D-	805649	014330-96-2	43
			\$\$\$ 1,2,3,4,5,6-hexa-O-acetyl-D-galactitol			
			\$\$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetoxyhexyl]ester			
			\$\$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetyloxyhexyl]ester			
			\$\$\$ GALACTITOL-1,2,3,4,5,6-HEXAACETATE			
			4'-METHYL-2-PHENYLINDOLE	221291	007496-81-3	35
			\$\$\$ 2-(4-methylphenyl)-1H-indole			
			\$\$\$ 2-(4-Methylphenyl)indolizine			
			\$\$\$ 2-(p-tolyl)-1H-indole			
			\$\$\$ 2-p-Tolylindole			
			\$\$\$ Indolizine, 2-(4-methylphenyl)-			
			\$\$\$ 1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane	264734	001873-88-7	35
			\$\$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE			
			\$\$\$ HYDROMETHYLSILOXANE			
			\$\$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILOXY)-SILANE			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			\$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyl oxy)silyl]oxy-silane \$\$ TRISILOXAN E, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-,			
34	8.044	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L 4-(2',6'-Dichlorophenylmethylene)- 1,2,3,4-tetraisoquinoline-1,3-dion Ethane, 1-(4,4,4-trifluoro-1,3-dit hiobutyl)-2-(3,3,3-trifluoro-1,2-d ithiopropyl)- \$\$ 1-[(Trifluorometh yl)disulfanyl]-2-([(trifluorometh yl)sulfanyl)methyl)sulfanyl)ethane # (Z,Z)-2-Benzylidene-5-[methyl(phen yl)methylidene]-3-phenyl-1,3-thiaz olidin-4-one	567236 538556 699337	2000567-23-6 2000538-55-6 2000699-33-7	39 38 38
35	8.116	0.26	C:\Database\W10N11 Full.L Benzoic acid, methyl ester \$\$ BENZ OESAEURE, METHYLESTER \$\$ benzoesau re-methylester \$\$ Clorius \$\$ Essen ce of niobe \$\$ METHOXYCARBONYL-BEN ZENE \$\$ Methyl benzenecarboxylate \$\$ Methyl benzoate \$\$ Methyl ester of benzoic acid \$\$ methyl phenylc arboxylate 1H-Pyrrole, 1-(phenylsulfonyl)- \$\$ Pyrrole, 1-(phenylsulfonyl)- \$\$ 1 -(PHENYLSULFONYL)-1H-PYRROLE \$\$ 1- (benzenesulfonyl)pyrrole \$\$ 1-(PHE NYLSULFONYL)PYRROLE \$\$ 1-BENZENESU LFONYL-1H-PYRROLE \$\$ 1-besylpyrrol e \$\$ N-(BENZENESULFONYL)PYRROLE \$\$ NSC 102019 Benzonitrile, 4-benzoyl- \$\$ Benzon itrile, p-benzoyl- \$\$ 4-BENZOYLBEN ZONITRILE \$\$ 4-(phenylcarbonyl)ben zenecarbonitrile \$\$ 4-CYANO-BENZOP HENON \$\$ 4-CYANO-BENZOPHENONE \$\$ B ENZOPHENON, 4-CYANO- \$\$ P-BENZOYL BENZONITRILE \$\$ P-CYANOBENZOPHENON	46831 219784 221133	000093-58-3 016851-82-4 001503-49-7	50 46 38
36	8.192	0.15	C:\Database\W10N11 Full.L 3,4-dihydro-6,7-dimethoxyisoquinol ine 2-oxide \$\$ 6,7-dimethoxy-2-oxi danidyl-3,4-dihydroisoquinolin-2-i um \$\$ 6,7-dimethoxy-2-oxido-3,4-di hydroisoquinolin-2-ium \$\$ 6,7-dime thoxy-3,4-dihydroisoquinoline 2-ox ide (E)-2-bromobutyloxychalcone 1,1,3,3-Tetraallyl-1,3-disilacyclo butane	220109 674316 350572	084122-10-1 2000674-31-6 2000350-57-2	38 35 25
37	8.235	0.07	C:\Database\W10N11 Full.L (3Z)-[(Trimethylsilyl)methylidene] octahydroinden-4-one \$\$ (1E)-1-[(t rimethylsilyl)methylene]octahydro-	267664	2000267-66-4	43

CISTDU1-SPL...ORES141024.M Mon Jun 15 13:33:27 2015

Page: 11

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			4H-inden-4-one \$\$ (3E)-[(Trimethylsilyl)methylidene]octahydroinden-4-one			
			Galactitol, hexaacetate, D- \$\$ 1,2,3,4,5,6-hexa-O-acetyl-D-galactitol \$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetoxyhexyl]ester \$\$ acetic acid[(2S,3R,4S,5R)-2,3,4,5,6-pentaacetyloxyhexyl]ester \$\$ GALACTITOL-1,2,3,4,5,6-HEXAACETATE	805650	014330-96-2	42
			3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate (computer-generated name)	501931	003555-45-1	40
38	8.301	0.33	C:\Database\W10N11 Full.L Nonanal \$\$ Nonanaldehyde \$\$ 1-NONALDEHYDE \$\$ 1-NONANAL \$\$ 1-NONYL ALDEHYDE \$\$ ALDEHYDE C-9 \$\$ C-9 ALDEHYDE \$\$ N-NONALDEHYDE \$\$ N-NONAN-1-AL \$\$ N-NONANAL \$\$ N-NONYLALDEHYDE \$\$ NONALDEHYDE \$\$ NONANOIC ALDEHYDE \$\$ NONOIC ALDEHYDE \$\$ NONYL ALDEHYDE, N-1H-Pyrrole, 2,5-dihydro-1-nitroso- \$\$ 1-NITROSO-2,5-DIHYDRO-1H-PYRROLE \$\$ 1-nitroso-2,5-dihydropyrrole \$\$ 1-nitroso-3-pyrroline \$\$ 2,5-DIHYDRO-1-NITROSO-1H-PYRROLE \$\$ 3-PYRROLINE, 1-NITROSO- \$\$ 3-PYRROLINE, N-NITROSO- \$\$ N-NITROSO-3-PYRROLINE	58787	000124-19-6	62
			2-Formyl-9-[.beta.-d-ribofuranosyl]hypoxanthine	502007	125425-35-6	27
39	8.368	0.25	C:\Database\W10N11 Full.L CYCLOHEXANOL, 2,6-DIMETHYL- \$\$ 2,6-dimethyl-1-cyclohexanol \$\$ 2,6-DIMETHYL-CYCLOHEXANOL \$\$ 2,6-DIMETHYLCYCLOHEXAN-1-OL \$\$ 2,6-DIMETHYLCYCLOHEXANOL,C&T \$\$ EINECS 226-264-9 \$\$ NSC 821	36894	005337-72-4	43
			3,4-Dimethylcyclohexanol \$\$ Cyclohexanol, 3,4-dimethyl-	37267	005715-23-1	43
			(1,1-dimethylbutyl)-oxirane \$\$ 3,5-dimethyl-cyclo-hexanol \$\$ Cyclohexanol, 3,5-dimethyl- \$\$ 1,2-epoxy-3,3-dimethyl-hexane \$\$ 3,3-dimethyl-1,1,2-epoxy-hexane \$\$ 3,5-dimethyl-1-cyclohexanol \$\$ 3,5-DIMETHYLCYCLOHEXAN-1-OL \$\$ 3,5-DIMETHYLCYCLOHEXANOL,C&T	37177	005441-52-1	43
40	8.497	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L 7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hex	223967	2000223-96-7	35

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4-yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizine \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$ 7-Morpholinoindolizine (2'-Ethylphenyl)(2"-isopropylphenyl)(hydroxyethoxy)methyl \$\$ (2'-Ethylphenyl)(2''-isopropylphenyl)(hydroxyethoxy)methyl \$\$ 2-[(2'-Ethylphenyl)(2"-isopropylphenyl)methoxy]ethanol \$\$ 2-[(2-ethylphenyl)(2-isopropylphenyl)methoxy]ethanol (-)-(4bR,10bS)-N-Benzyl-4b,5,6,10b,11,12-hexahydro-2,3,8,9-tetramethoxybenzo[c]phenanthridine \$\$ (4bR,10bS)-2,3,8,9-tetramethoxy-5-(phenylmethyl)-6,10b,11,12-tetrahydro-4bH-benzo[c]phenanthridine	511820	2000511-82-0	32
41	9.197	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L N-(2-Acetylcyclopentylidene)cyclohexylamine \$\$ 1-[(2Z)-2-(Cyclohexylimino)cyclopentyl]ethanone # 3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate (computer-generated name) 1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Silane, 1,4-phenylenebis(trimethylsilyl)- \$\$ Silane, p-phenylenebis(trimethylsilyl)- \$\$ p-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Benzene, p-bis(trimethylsilyl)- \$\$ p-Phenylenebis(trimethylsilyl)ane)	221092	2000221-09-2	38
			3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate \$\$ Diethyl bis(trimethylsilyl) orthosilicate (computer-generated name) 1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Silane, 1,4-phenylenebis(trimethylsilyl)- \$\$ Silane, p-phenylenebis(trimethylsilyl)- \$\$ p-Bis(trimethylsilyl)benzene \$\$ Benzene, p-bis(trimethylsilyl)- \$\$ p-Phenylenebis(trimethylsilyl)ane)	501931	003555-45-1	37
42	9.258	0.15	C:\Database\W10N11 Full.L 4-Methoxy-2-methyl-1-(pyridinylthio)buta-1,3-diene \$\$ 2-[(1E,3E)-4-methoxy-2-methyl-but-1,3-dienyl]sulfanylpyridine \$\$ 2-[[[(1E,3E)-4-methoxy-2-methyl-but-1,3-dienyl]thio]pyridine \$\$ 2-[[[(1E,3E)-4-methoxy-2-methyl-1,3-butadienyl]sulfanyl]pyridine Cyclobarbitol \$\$ 2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-(1-cyclohexen-1-yl)-5-ethyl- \$\$ Barbituric acid, 5-(1-cyclohexen-1-yl)-5-ethyl- \$\$ Adorm \$\$ Amnosed \$\$ Cavonyl \$\$ Cyclobarbitol \$\$ Cyclobarbitone \$\$ Cyclobarbitol \$\$ Cyclohexal \$\$ Ethylhexarbitol Propanamide \$\$ Propionamide \$\$ Propionic acid amide \$\$ Propionic amide \$\$ Amid kyseliny propionove	220055	2000220-05-5	64
			Cyclobarbitol \$\$ 2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-(1-cyclohexen-1-yl)-5-ethyl- \$\$ Barbituric acid, 5-(1-cyclohexen-1-yl)-5-ethyl- \$\$ Adorm \$\$ Amnosed \$\$ Cavonyl \$\$ Cyclobarbitol \$\$ Cyclobarbitone \$\$ Cyclobarbitol \$\$ Cyclohexal \$\$ Ethylhexarbitol Propanamide \$\$ Propionamide \$\$ Propionic acid amide \$\$ Propionic amide \$\$ Amid kyseliny propionove	310764	000052-31-3	22
			Propanamide \$\$ Propionamide \$\$ Propionic acid amide \$\$ Propionic amide \$\$ Amid kyseliny propionove	2435	000079-05-0	11

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
43	9.335	1.10	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclopentasiloxane, decamethyl- 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10-DECAMETHYL- 1,3,5,7,9,2,4,6,8,10-PENTAOXAPENTA SILECANE \$\$ CYCLIC DIMETHYLSILOXAN E PENTAMER \$\$ CYCLOPENTASILOXAN, D ECAMETHYL- \$\$ D5 \$\$ Decamethylcycl opentasiloxane \$\$ Decamethylcylope ntasiloxane 6-Aza-5,7,12,14-tetrathiapentacene \$\$ di[1,4]benzodithiino[2,3-b:2,3 -e]pyridine N-(4'-Chlorophenyl)-8-fluoro-3-met hyl-isoalloxazine \$\$ 10-(4-chlorop henyl)-8-fluoranyl-3-methyl-benzo[g]pteridine-2,4-dione \$\$ 10-(4-chl orophenyl)-8-fluoro-3-methyl-benzo [g]pteridine-2,4-dione	699584	000541-02-6	91
				667145	2000667-14-5	90
				669024	2000669-02-4	78
44	9.392	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L 3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethy ltrisiloxane \$\$ Silicic acid, diet hyl bis(trimethylsilyl) ester \$\$ D iethyl bis(trimethylsilyl) orthosi licate \$\$ Diethyl bis(trimethylsil yl) orthosilicate (computer-genera ted name) 2-Pyridinamine, N-(4,5-dihydro-5-m ethyl-2-thiazolyl)-3-methyl- \$\$ 5- methyl-N-(3-methylpyridin-2-yl)-4, 5-dihydro-1,3-thiazol-2-amine 2-Isopropyl-6-phenylnicotinonitril e \$\$ 2-isopropyl-6-phenyl-pyridine -3-carbonitrile \$\$ 6-phenyl-2-prop an-2-yl-3-pyridinecarbonitrile \$\$ 6-phenyl-2-propan-2-yl-pyridine-3- carbonitrile	501931	003555-45-1	47
				219950	2000219-95-0	38
				268505	070231-36-6	32
45	9.430	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L Acetic acid, phenylmethyl ester \$\$ (ACETOXYMETHYL)BENZENE \$\$ (phenyl methyl) ethanoate \$\$.alpha.-ACETO XYTOLUENE \$\$ ACETIC ACID, BENZYL E STER \$\$ BENZYL ACETATE \$\$ benzyl a cetateacetic acid, phenylmethyl es ter \$\$ BENZYL ESTER OF ACETIC ACID 3-Ethyl-N-nitroso-2(3H)-benzothiaz ole - imine \$\$ (2Z)-3-ethyl-1,3-be nzothiazol-2(3H)-one oxohydrazone \$\$ (NZ)-N-(3-ethyl-1,3-benzothiaz ol-2-ylidene)nitrous amide 2-Ethylacridine	71637	000140-11-4	50
				219637	2000219-63-7	22
				221248	055751-83-2	22
46	9.911	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L 4-Methoxy-2-methyl-1-(pyridinylth io)buta-1,3-diene \$\$ 2-[(1E,3E)-4- methoxy-2-methyl-buta-1,3-dienyl]s ulfanylpyridine \$\$ 2-[[1E,3E)-4-m	220055	2000220-05-5	42

CISTDU1-SPL...ORES141024.M Mon Jun 15 13:33:27 2015

Page: 14

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ethoxy-2-methyl-buta-1,3-dienyl]thio]pyridine \$\$ 2-[(1E,3E)-4-methoxy-2-methyl-1,3-butadienyl]sulfanyl]pyridine			
			Isothiazolo[3,4-e]-2,1,3-benzothiazole, 4-methyl- \$\$ 4-methyl-[1,2]thiazolo[3,4-e][2,1,3]benzothiazole \$\$ 4-methylisothiazolo[3,4-e][2,1,3]benzothiazole \$\$ 8-METHYLISOTHIAZOLO[4,5-C]-2,1,3-BENZOTHIADIAZOLE	219529	074801-78-8	35
			N-Cyano-N',N',N',N'-tetramethyl-1,3,5-triazinetriamine \$\$ N-CYANO-N',N',N',N'-TETRAMETHYL-1,3,5-TRIAZINETRIAMINE \$\$ [4,6-bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl]cyanamide \$\$ [4,6-bis(dimethylamino)-s-triazin-2-yl]cyanamide	219573	074150-88-2	35
47	10.068	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L 3-(Methylthio)propyl 2,2,2-trifluoroacetate	202623	2000202-62-3	35
			Thieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamide, 3-amino-6-methyl-1,2,3,4-Butanetetrol, [S-(R*,R*)]-(CAS) \$\$ L-ERYTHRITOL \$\$ Erythritol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol, [S-(R@,R@)]- \$\$ 1-Threitol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol (computer-generated name) \$\$ 1,2,3,4-BUTANETETROL #	219643	2000219-64-3	35
			1,2,3,4-Butanetetrol, [S-(R*,R*)]-(CAS) \$\$ L-ERYTHRITOL \$\$ Erythritol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol, [S-(R@,R@)]- \$\$ 1-Threitol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol (computer-generated name) \$\$ 1,2,3,4-BUTANETETROL #	28579	002319-57-5	27
48	10.149	0.18	C:\Database\W10N11 Full.L (5S,6aR,10aS)-5-Propyldecahydrodipyrrolo[1,2-a:1',2'-c]pyrimidine \$\$ 208 Tetreponerine 2	224734	172139-30-9	38
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl- \$\$ 2,2,4,4,6,6-HEXAMETHYL-1,3,5,2,4,6-TRIOXATRISILINANE \$\$ 1,1,3,3,5,5-Hexamethyl-cyclohexasiloxane \$\$ 2,2,4,4,6,6-hexamethyl-1,3,5,2,4,6-trioxatrisilin \$\$ DC 246 \$\$ Dimethylsiloxane cyclic trimer \$\$ SDK 10 \$ \$ AI3-62005	264640	000541-05-9	38
			(R,R,R)-(+)-6-Ethyldehydropyrido[1,2-c]pyrrolo[1',2'-a]pyrimidine	224720	2000224-72-0	35
49	10.416	0.81	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 2,6,6-trimethyl- \$\$ 2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXENE-1-CARBALDEHYDE \$\$.beta.-CYCLOCITRAL \$\$ 1-FORMYL-2,6,6-trimethyl-1-cyclohexene \$\$ 2,6,6-trimethyl-1-cyclohexene-1-carboxaldehyde \$\$ AI3-37227 \$\$ EINECS 207-081-3	77467	000432-25-7	93
			3-Isopropylidene-5-methyl-hex-4-en-2-one \$\$ 5-Methyl-3-(1-methylethyl)	77274	064149-32-2	64

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			lidene)-4-hexen-2-one #			
			4-methyl-1,2-dimethoxybenzene \$\$ 1	76130	000494-99-5	60
			,2-dimethoxy-4-methyl-benzene \$\$ 3			
			,4-DIMETHOXYTOLUENE \$\$ 4-METHYLCAT			
			ECHOL DIMETHYL ETHER \$\$ 4-METHYLVE			
			RATROL \$\$ 4-METHYLVERATROLE \$\$ BEN			
			ZENE, 1,2-DIMETHOXY-4-METHYL- \$\$ H			
			OMOVERATROLE \$\$ TOLUENE, 3,4-DIMET			
			HOXY-			
50	10.573	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L			
			2-Methyl-4-cyclopentylidenemethyl-	272740	2000272-74-0	38
			5-nitrothiazole \$\$ 4-(cyclopentyl			
			denemethyl)-2-methyl-5-nitro-1,3-t			
			hiazole			
			N-Cyano-N',N'',N''',N''-tetramethyl-	219573	074150-88-2	38
			1,3,5-triazinetriamine \$\$ N-CYANO-			
			N',N',N'',N'''-TETRAMETHYL-1,3,5-TRIA			
			ZINETRIAMINE \$\$ [4,6-bis(dimethyla			
			mino)-1,3,5-triazin-2-yl]cyanamide			
			\$\$ [4,6-bis(dimethylamino)-s-tria			
			zin-2-yl]cyanamide			
			2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione,	470954	000561-86-4	35
			5-(2-bromo-2-propenyl)-5-(2-propen			
			yl)- \$\$ Barbituric acid, 5-allyl-5			
			-(2-bromoallyl)- \$\$ 5-ALLYL-5-(2-B			
			ROMO-2-PROPENYL)-2,4,6(1H,3H,5H)-P			
			YRIMIDINETRIONE \$\$ (5-ALLYL-5-BROM			
			OALLYL)BARBITURIC ACID \$\$ BRALLOBA			
			RBITAL			
51	10.678	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L			
			4-(2',6'-Dichlorophenylmethylene)-	567236	2000567-23-6	78
			1,2,3,4-tetraisoquinoline-1,3-dion			
			4' METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 2-(4-m	221291	007496-81-3	37
			ethylphenyl)-1H-indole \$\$ 2-(4-Met			
			hylphenyl)indolizine \$\$ 2-(p-tolyl			
)-1H-indole \$\$ 2-p-Tolylindole \$\$			
			Indolizine, 2-(4-methylphenyl)-			
			6 METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 1H-INDO	221294	2000221-29-4	37
			LE, 6-METHYL-2-PHENYL- \$\$ 6-METHYL			
			-2-PHENYL-1H-INDOLE \$\$ NSC 93842			
52	10.987	0.06	C:\Database\W10N11 Full.L			
			1H-Isoindole-1,3(2H)-dithione, 2-e	219865	035373-06-9	64
			thyl- \$\$ 2-ethyl-1H-isoindole-1,3(
			2H)-dithione \$\$ N-ETHYL-1,3-DITHIO			
			ISOINDOLINE			
			5-[(2'-Thienyl)methylene]-2-imino-	219638	2000219-63-8	40
			1-methylimidazolid-4-one \$\$ (5E)-2			
			-imino-1-methyl-5-(2-thienylmethyl			
			ene)-4-imidazolidinone			
			1,2,4-Benzotriazine, 3-phenyl- \$\$	220928	006299-90-7	38
			3-PHENYL-1,2,4-BENZOTRIAZINE \$\$ 3-			
			PHENYL-BENZO[1,2,4]TRIAZINE \$\$ AID			
			S-195876 \$\$ NSC 45051			
53	11.035	0.14	C:\Database\W10N11_Full.L			

CISTDU1-SPL...ORES141024.M Mon Jun 15 13:33:27 2015

Page: 16

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1-Cyclohexene-1-acetaldehyde, 2,6,6-trimethyl- \$\$ (2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)ACETALDEHYDE \$\$.beta.-APO-8-CAROTENAL \$\$.beta.-CYCLOHOMOCITRAL \$\$ 1-(2,6,6-Trimethylcyclohex-2-enyl)ethanone \$\$ 2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-ACETALDEHYDE	109497	000472-66-2	92
			Naphtho[2,1-b]furan, dodecahydro-6,9a-dimethyl-, [3aS-(3a.alpha.,5a.alpha.,6.beta.,9a.beta.,9b.alpha.)]- \$\$ (3aS,5aS,6S,9aS,9bS)-6,9a-dimethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan \$\$ 8.beta.,12-EPOXY-13,14,15,16,17,19-HEXANORLABDANE	225055	082079-84-3	30
			Naphtho[2,1-b]furan, dodecahydro-6,9a-dimethyl-, [3aS-(3a.alpha.,5a.alpha.,6.alpha.,9a.beta.,9b.alpha.)]- \$\$ (3aS,5aS,6R,9aS,9bS)-6,9a-dimethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan \$\$ 8.alpha.,12-EPOXY-13,14,15,16,17,19-HEXANORLABDANE	225053	082079-85-4	22
54	11.225	0.03	C:\Database\W10N11 Full.L Thietane, 3,3,4-trimethyl-2,2-diphenoxy- \$\$ 3,3,4-TRIMETHYL-2,2-DIPHENOXYTHIETANE	517025	050468-87-6	32
			1-Nitro-9,10-dioxo-9,10-dihydro-anthracene-2-carboxylic acid diethylamide \$\$ N,N-Diethyl-1-nitro-9,10-dioxo-9,10-dihydro-2-anthracenecarboxamide #	660047	101869-40-3	27
			Trisiloxane, 1,1,1,3,5,5,5-heptamethyl-3-(trimethylsiloxy)- \$\$ Trisiloxane, 1,1,1,3,5,5,5-heptamethyl-3-[(trimethylsilyl)oxy]- \$\$ 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-3-[(TRIMETHYLSILOXY)OXY]TRISILOXANE \$\$ METHYL TRISILOXANE	544662	017928-28-8	25
55	11.244	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L Tetrasiloxane, decamethyl- \$\$ Decamethyltetrasiloxane \$\$ [(CH3)3SiOSi(CH3)2]2O \$\$ CD3780 \$\$ D3780 \$\$ 1,1,1,3,3,3,5,5,7,7,7-Decamethyltetrasiloxane #	544675	000141-62-8	42
			2-[2-(4-Methylbenzyl)]phenyl]propene	269776	2000269-77-6	40
			(S)-(E)-(-)-4-Acetoxy-1-phenyl-2-dodecen-1-one \$\$ (1S,2E)-1-octyl-4-oxo-4-phenyl-2-butenyl acetate \$\$ acetic acid[(E,1S)-4-keto-1-octyl-4-phenyl-but-2-enyl]ester \$\$ acetic acid[(E,4S)-1-oxo-1-phenyldodec-2-en-4-yl]ester	565653	2000565-65-3	38
56	11.678	0.06	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclotrisiloxane, hexamethyl- (CAS	264636	000541-05-9	47

CISTDU1-SPL...ORES141024.M Mon Jun 15 13:33:27 2015

Page: 17

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
) \$\$ 1,1,3,3,5,5-HEXAMETHYL-CYCLOH EXASILOXANE \$\$ Hexamethylcyclotris iloxane \$\$ HEXAMETHYL-CYCLOTRISILO XANE \$\$ Dimethylsiloxane cyclic tr imer \$\$ CH7260 \$\$ 2,2,4,4,6,6-Hexa methyl-1,3,5,2,4,6-trioxatrisilina ne			
			1H-Indole, 4,5,6-trimethoxy- \$\$ 4, 5,6-trimethoxy-1H-indole \$\$ 4,5,6- TRIMETHOXYINDOLE \$\$ INDOLE, 4,5,6- TRIMETHOXY-	220144	030448-04-5	38
			(Z,Z)-2-Benzylidene-5-[methyl(phen yl)methylidene]-3-phenyl-1,3-thiaz olidin-4-one	699337	2000699-33-7	37
57	11.868	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L Propanamide, N,N-dimethyl- \$\$ Prop ionamide, N,N-dimethyl- \$\$ N,N-Dim ethylpropanamide \$\$ N,N-Dimethylpr opionamide \$\$ Dimethylamide of pro pionic acid \$\$ Propionic acid dime thylamide	12294	000758-96-3	27
			1,3-Dioxolane, 4-ethyl- \$\$ 4-Ethyl -1,3-dioxolane	12962	029921-38-8	22
			Propane, 1-isothiocyanato-3-(methy lthio)- \$\$ 3-Methylthiopropyl isot hiocyanate \$\$ 3-(Methylthio)propyl isothiocyanate \$\$ 1-Isothiocyanat o-3-(methylsulfanyl)propane # \$\$ I sothiocyanic acid, 3-(methylthio)p ropyl ester	66172	000505-79-3	22
58	12.144	0.36	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclohexasiloxane, dodecamethyl- (CAS) \$\$ Dodecamethylcyclohexasilox ane \$\$ DODECAMETHYL-CYCLOHEXASILO XANE \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12 -Dodecamethylcyclohexasiloxane \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12-DODECA METHYLCYCLOHEXASILOXANE # \$\$ EINEC S 208-762-8	816768	000540-97-6	64
			3-Formyl-N-methyl-9-[phenylethynyl]dibenzo[2,3-a : 5,6-a'] (1,4)-thi azine	633911	2000633-91-1	59
			Acetic acid, [bis[(trimethylsilyl) oxy]phosphinyl]-, trimethylsilyl e ster \$\$ Trimethylsilyl (bis[(trime thylsilyl)oxy]phosphoryl)acetate #	668507	053044-27-2	59
59	12.230	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L N-Cyano-N',N',N'',N'''-tetramethyl- 1,3,5-triazinetriamine \$\$ N-CYANO- N',N',N'',N'''-TETRAMETHYL-1,3,5-TRIA ZINETRIAMINE \$\$ [4,6-bis(dimethyla mino)-1,3,5-triazin-2-yl]cyanamide \$\$ [4,6-bis(dimethylamino)-s-tria zin-2-yl]cyanamide	219573	074150-88-2	37
			1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-pro	220176	2000220-17-6	14

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			panone oxime, methyl ether \$\$ (2E) -1-(1,3-Benzodioxol-5-yl)-2-propan one o-methyloxime #			
			Quinoline, 8-bromo- \$\$ 8-Bromoquin oline #	219610	016567-18-3	10
60	12.354	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L (4-Chlorophenyl)[(2R,6S)-2,6-dimet hylpiperidin-1-yl]methanimine	356956	2000356-95-6	43
			Silicic acid, diethyl bis(trimethy lsilyl) ester \$\$ 3,3-Diethoxy-1,1, 1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane \$\$ D iethyl bis(trimethylsilyl) orthosi licate #	501932	003555-45-1	37
			6-(2-CHLORO-PHENYL)-5-NITRO-PIPERI DIN-2-ONE \$\$ 6-(2-CHLOROPHENYL)-5- NITRO-2-PIPERIDINONE \$\$ 6-(2-chlor ophenyl)-5-nitro-2-piperidone	368440	2000368-44-0	22
61	13.282	0.06	C:\Database\W10N11 Full.L 6,7-Dimethoxy-3,4-dihydroisoquinol ine - N-Oxide \$\$ 3,4-DIHYDRO-6,7-D IMETHOXYISOQUINOLINE 2-OXIDE \$\$ 6, 7-dimethoxy-2-oxidanidyl-3,4-dihy roisoquinolin-2-ium \$\$ 6,7-dimetho xy-2-oxido-3,4-dihydroisoquinolin- 2-ium	220110	2000220-11-0	42
			N-Cyano-N',N',N'',N'''-tetramethyl- 1,3,5-triazinetriamine \$\$ N-CYANO- N',N',N'',N'''-TETRAMETHYL-1,3,5-TRIA ZINETRIAMINE \$\$ [4,6-bis(dimethyla mino)-1,3,5-triazin-2-yl]cyanamide \$\$ [4,6-bis(dimethylamino)-s-tria zin-2-yl]cyanamide	219573	074150-88-2	40
			1-[(2-Nitrophenyl)amino]pyrrolidin e \$\$ N-(2-nitrophenyl)-1-pyrrolidi namine \$\$ N-(2-nitrophenyl)-N-(1-p yrrolidinyl)amine	219904	2000219-90-4	35
62	13.582	0.04	C:\Database\W10N11 Full.L Acetamide, 2-(adamantan-1-yl)-N-(1 -adamantan-1-ylethyl)-	668352	2000668-35-2	43
			cis-3,3a,4,5,6,7-Hexahydro-7-(2-th ienyl)cyclohexa[c]isoxazole \$\$ (3a S,7S)-7-(2-thienyl)-3,3a,4,5,6,7-h exahydro-2,1-benzisoxazole	220034	2000220-03-4	32
			trans-3,3a,4,5,6,7-Hexahydro-7-(2- thienyl)cyclohexa[c]isoxazole \$\$ (3aS,7R)-7-(2-thienyl)-3,3a,4,5,6,7 -hexahydro-2,1-benzisoxazole	220033	2000220-03-3	25
63	13.644	1.83	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Isothiocyanato-4-(methylthio)but ane \$\$ 1-isothiocyanato-4-(methyls ulfanyl)butane	95722	2000095-72-2	59
			Butane, 1-isothiocyanato- \$\$ 1-ISO THIOCYANATOBUTANE \$\$ Butyl isothio cyanate \$\$ Butyl mustard oil \$\$ IS	22775	000592-82-5	25

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			OTHIOCYANIC ACID N-BUTYL ESTER \$\$ Isothiocyanic acid, butyl ester \$\$ N-BUTYL ISOTHIO CYANATE \$\$ AI3-18 424 \$\$ EINECS 209-770-4 \$\$ NSC 194 808 Glutaric acid, butyl isopropyl ester	292382	2000292-38-2	22
64	13.744	0.18	C:\Database\W10N11 Full.L Heptane, 1-(methylthio)- \$\$ Sulfide, heptyl methyl \$\$ Heptyl methyl sulfide \$\$ Methyl heptyl sulfide \$ \$ 2-Thianonane \$\$ n-Heptyl methyl sulfide \$\$ Methyl n-heptyl sulfide \$\$ 1-(Methylsulfanyl)heptane # 1,2,3,4-Tetrahydroxybutane \$\$ 1-Th retol \$\$ 2(R),3(S)-1,2,3,4-Butanet etrol \$\$ meso-Erythritol \$\$ Erythr itol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol, (R@, S@)- \$\$ Butanetetrol \$\$ Erythrit \$ \$ Erythritol, meso- \$\$ Erythrol \$\$ Phycitol \$\$ Antierythrite \$\$ Eryt hrite Butane, 1-(methylthio)- \$\$ Sulfide , butyl methyl \$\$ Butyl methyl sul fide \$\$ Butyl methyl thioether \$\$ Methyl butyl sulfide \$\$ 2-Thiahexa ne \$\$ 1-(Methylthio)butane \$\$ Buty l methyl sulphide \$\$ Methyl-n-buty l sulfide \$\$ n-Butyl methyl sulfid	65180	020291-61-6	35
			1,2,3,4-Tetrahydroxybutane \$\$ 1-Th retol \$\$ 2(R),3(S)-1,2,3,4-Butanet etrol \$\$ meso-Erythritol \$\$ Erythr itol \$\$ 1,2,3,4-Butanetetrol, (R@, S@)- \$\$ Butanetetrol \$\$ Erythrit \$ \$ Erythritol, meso- \$\$ Erythrol \$\$ Phycitol \$\$ Antierythrite \$\$ Eryt hrite Butane, 1-(methylthio)- \$\$ Sulfide , butyl methyl \$\$ Butyl methyl sul fide \$\$ Butyl methyl thioether \$\$ Methyl butyl sulfide \$\$ 2-Thiahexa ne \$\$ 1-(Methylthio)butane \$\$ Buty l methyl sulphide \$\$ Methyl-n-buty l sulfide \$\$ n-Butyl methyl sulfid	28581	000149-32-6	35
			Butane, 1-(methylthio)- \$\$ Sulfide , butyl methyl \$\$ Butyl methyl sul fide \$\$ Butyl methyl thioether \$\$ Methyl butyl sulfide \$\$ 2-Thiahexa ne \$\$ 1-(Methylthio)butane \$\$ Buty l methyl sulphide \$\$ Methyl-n-buty l sulfide \$\$ n-Butyl methyl sulfid	14514	000628-29-5	27
65	13.901	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L Alanine, N-acetyl-2-mercapto-, (.+ /-.)- \$\$ Alanine, N-acetyl-2-merca pto-, (.+.)- \$\$ N-Acetyl-2-sulfan ylalanine # 7-[3-Chloro-2-hydroxypropyl]guanin e \$\$ 2-Amino-7-(3-chloro-2-hydroxy propyl)-1,7-dihydro-6H-purin-6-one # N-Ethyl-N'-nitroguanidine \$\$ Guani dine, 1-ethyl-3-nitro- \$\$ (Z)-N-Et hyl [oxido(oxo)hydrazono]methanedia mine #	99824	055956-23-5	9
			Alanine, N-acetyl-2-mercapto-, (.+ /-.)- \$\$ Alanine, N-acetyl-2-merca pto-, (.+.)- \$\$ N-Acetyl-2-sulfan ylalanine # 7-[3-Chloro-2-hydroxypropyl]guanin e \$\$ 2-Amino-7-(3-chloro-2-hydroxy propyl)-1,7-dihydro-6H-purin-6-one # N-Ethyl-N'-nitroguanidine \$\$ Guani dine, 1-ethyl-3-nitro- \$\$ (Z)-N-Et hyl [oxido(oxo)hydrazono]methanedia mine #	333704	073100-76-2	9
			N-Ethyl-N'-nitroguanidine \$\$ Guani dine, 1-ethyl-3-nitro- \$\$ (Z)-N-Et hyl [oxido(oxo)hydrazono]methanedia mine #	41208	039197-62-1	9
66	14.078	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L 1,4-Benzodioxin-2-carboxylic acid, 2,3-dihydro-, ethyl ester \$\$ (+-) -Ethyl 2,3-Dihydrobenzo[1,4]dioxin -2-carboxylate \$\$ 1,4-BENZODIOXAN- 2-CARBOXYLIC ACID, ETHYL ESTER \$\$ 2,3-dihydro-1,4-benzodioxin-3-carb oxylic acid ethyl ester \$\$ AI3-260 22 7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hex ahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4- yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizi ne \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$	222591	004739-94-0	30
			1,4-Benzodioxin-2-carboxylic acid, 2,3-dihydro-, ethyl ester \$\$ (+-) -Ethyl 2,3-Dihydrobenzo[1,4]dioxin -2-carboxylate \$\$ 1,4-BENZODIOXAN- 2-CARBOXYLIC ACID, ETHYL ESTER \$\$ 2,3-dihydro-1,4-benzodioxin-3-carb oxylic acid ethyl ester \$\$ AI3-260 22 7-(4-morpholinyl)-1,2,3,5,8,8a-hex ahydroindolizine \$\$ 7-Morpholin-4- yl-1,2,3,5,8,8a-hexahydro-indolizi ne \$\$ 7-Morpholinoindolizidine \$\$	223967	2000223-96-7	22

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			7-Morpholinoindolizine			
			Ethane, 1-(4,4,4-trifluoro-1,3-dithiobutyl)-2-(3,3,3-trifluoro-1,2-dithiopropyl)- \$\$ 1-[(Trifluoromethyl)disulfanyl]-2-([(trifluoromethyl)sulfanyl)methyl)sulfanyl]ethane #	538556	2000538-55-6	22
67	14.116	0.37	C:\Database\W10N11 Full.L Benzene, (2-isothiocyanatoethyl)- \$\$ Isothiocyanic acid, phenethyl ester \$\$.beta.-Phenethyl isothiocyanate \$\$.beta.-Phenylethyl isothiocyanate \$\$ Phenethyl isothiocyanate \$\$ Phenethyl mustard oil \$\$ Phenethyl isothiocyanate \$\$ NSC 878 68 Phenethylisothiocyanate \$\$.beta.-Phenethyl isothiocyanate \$\$.beta.-Phenylethyl isothiocyanate \$\$ 2-isothiocyanatoethylbenzene \$\$ 2-Phenylethyl isothiocyanate \$\$ Benzene, (2-isothiocyanatoethyl)- \$\$ Isothiocyanic acid .beta.-phenylethyl ester Acetamide, N-(2-phenylethyl)- \$\$ Acetamide, N-phenethyl- \$\$ N-(2-Phenylethyl)acetamide \$\$ N-Phenethylacetamide \$\$ N-Acetylphenethylamine \$\$ Acetamide, N-(2-phenylethyl)- \$ (2-Phenethyl)acetamide \$\$ N-(2-phenethyl)-acetamide	100455	002257-09-2	68
			Phenethylisothiocyanate \$\$.beta.-Phenethyl isothiocyanate \$\$.beta.-Phenylethyl isothiocyanate \$\$ 2-isothiocyanatoethylbenzene \$\$ 2-Phenylethyl isothiocyanate \$\$ Benzene, (2-isothiocyanatoethyl)- \$\$ Isothiocyanic acid .beta.-phenylethyl ester	100457	2000100-45-7	58
			Acetamide, N-(2-phenylethyl)- \$\$ Acetamide, N-phenethyl- \$\$ N-(2-Phenylethyl)acetamide \$\$ N-Phenethylacetamide \$\$ N-Acetylphenethylamine \$\$ Acetamide, N-(2-phenylethyl)- \$ (2-Phenethyl)acetamide \$\$ N-(2-phenethyl)-acetamide	100679	000877-95-2	49
68	14.168	0.23	C:\Database\W10N11 Full.L Acetic acid, decyl ester \$\$ 1-DECANOL ACETATE \$\$ 1-DECYL ACETATE \$\$ ACETATE C-10 \$\$ ACETIC ACID, N-DECYL ESTER \$\$ DECANYL ACETATE \$\$ DECYL ACETATE \$\$ DECYL ALCOHOL, ACETATE \$\$ DECYL ESTER OF ACETIC ACID \$ DECYL ETHANOATE \$\$ N-DECYL ACETATE 1-Tridecene \$\$.alpha.-Tridecene \$ 1-C13H26 \$\$ 1-tridecene. \$ 2-CYCLOHEXYL-N1,N1,N4,N4-TETRAISOBUTYL-3-METHYL-SUCCINAMIDE \$\$.alpha.-tridecene \$\$ n-Tridec-1-ene \$\$ tridec-1-ene \$\$ TRIDECENE-1 \$\$ TRIDECYLENE \$\$ UNDECYLETHYLENE \$\$ BRN 1744 660 1-Dodecanol (CAS) \$\$ n-Dodecanol \$ CO 12 \$\$ S 1298 \$\$ Dodecanol \$\$ Pisol \$\$ Alfol 12 \$\$ Sipol L 12 \$\$ Lauryl 24 \$\$ Siponol 25 \$\$ Siponol L 2 \$\$ Siponol L 5 \$\$ Dodecanol-1 \$\$ Karukoru 20 \$\$ Alcohol C-12 \$ Lauric alcohol \$\$ Lauryl alcohol \$\$ Lorol	199692	000112-17-4	52
			1-Tridecene \$\$.alpha.-Tridecene \$ 1-C13H26 \$\$ 1-tridecene. \$ 2-CYCLOHEXYL-N1,N1,N4,N4-TETRAISOBUTYL-3-METHYL-SUCCINAMIDE \$\$.alpha.-tridecene \$\$ n-Tridec-1-ene \$\$ tridec-1-ene \$\$ TRIDECENE-1 \$\$ TRIDECYLENE \$\$ UNDECYLETHYLENE \$\$ BRN 1744 660	150707	002437-56-1	49
			1-Dodecanol (CAS) \$\$ n-Dodecanol \$ CO 12 \$\$ S 1298 \$\$ Dodecanol \$\$ Pisol \$\$ Alfol 12 \$\$ Sipol L 12 \$\$ Lauryl 24 \$\$ Siponol 25 \$\$ Siponol L 2 \$\$ Siponol L 5 \$\$ Dodecanol-1 \$\$ Karukoru 20 \$\$ Alcohol C-12 \$ Lauric alcohol \$\$ Lauryl alcohol \$\$ Lorol	160946	000112-53-8	46

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
69	14.392	2.98	C:\Database\W10N11 Full.L trans-.beta.-Ionone \$\$ 3-Buten-2-one, 4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-, (E)- \$\$ (E)-.beta.-Ionone \$\$ 4-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one \$\$ (3E)-4-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one # \$\$.beta.-E-Ionon 3-Buten-2-one, 4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)- \$\$ 4-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexenyl)-3-buten-2-one \$\$.beta.-Ionone \$\$.beta.-Cyclocitrylideneacetone \$\$ Ionone, .beta.- \$\$ 4-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one \$\$ NSC 402758 .beta.-IONONE \$\$ 1-(3'-Oxobut-2'-en-1'-yl)-2,6,6-trimethylcyclohex-1-ene	176725	000079-77-6	97
				176724	014901-07-6	97
70	14.482	0.07	C:\Database\W10N11 Full.L Pyrido[2,3-d]pyrimidine, 4-phenyl- \$\$ 4-Phenylpyrido[2,3-d]pyrimidin 2-Ethylacridine 1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane \$\$ BIS(TRIMETHYLSILOXY)METHYLSILANE \$\$ HYDROMETHYLSILOXANE \$\$ METHYLBIS(TRIMETHYLSILOXY)-SILANE \$ \$ trimethyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]-silane \$\$ TRISILOXANE, 1,1,1,3,5,5,5-HEPTAMETHYL-,	220931	028732-75-4	46
				221248	055751-83-2	43
				264734	001873-88-7	43
71	14.568	1.16	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Dodecanamine, N,N-dimethyl- \$\$ 1-DIMETHYLAMINODODECANE \$\$ ADMA 2 \$ \$ ADMA12 \$\$ AMINE 2M12D \$\$ ANTIOXIDANT DDA \$\$ ARMEEN DM 12D \$\$ BARLENE 125 \$\$ BARLENE 12S \$\$ DDA \$\$ DDA (ANTIOXIDANT) \$\$ DDA (CORROSION INHIBITOR) \$\$ DI-METHYLDODECYLAMINE \$\$ IPL 4-(3-Dimethylaminopropoxy)benzaldehyde N,N-DIMETHYL-TRIDECYLAMINE \$\$ 1-Tridecanamine, N,N-dimethyl- \$\$ N,N-Dimethyl-1-tridecanamine \$\$ N,N-Dimethyl-1-tridecanamine (computer-generated name) \$\$ N,N-DIMETHYL-1-TRIDECANAMINE # \$\$ EINECS 241-410-1 \$\$ N,N-DIMETHYL-N-TRIDECYLAMINE	239632	000112-18-5	72
				220875	026934-35-0	64
				284649	017373-29-4	64
72	14.616	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L 4-Dimethylamino-2-methyl-1-phenyl-1-butanol 1,2-Ethanediamine, N,N,N',N'-tetramethyl- \$\$ (CH3)2NCH2CH2N(CH3)2 \$\$ 1,2-BIS-(DIMETHYLAMINO)ETHANE \$\$	221048	2000221-04-8	59
				24329	000110-18-9	40

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1,2-DI- (DIMETHYLAMINO)ETHANE \$\$ 1, 2-DIAMINOETHANE, N,N,N',N'-TETRA METHYL- \$\$ 2-dimethylaminoethyl (dime thyl)amine \$\$ BIS (DIMETHYLAMINO)ET HANE			
			Benadryl \$\$ Ethanamine, 2-(dipheny lmethoxy)-N,N-dimethyl- \$\$ Ethylam ine, 2-(diphenylmethoxy)-N,N-dimet hyl- \$\$.alpha.-(2-Dimethylaminoet hoxy)diphenylmethane \$\$.beta.-(Di methylamino)ethanol diphenylmethyl ether \$\$ Alledryl \$\$ Allergina \$\$ Allergival	374205	000058-73-1	37
73	14.687	0.21	C:\Database\W10N11 Full.L 4a,1-(Epoxyethano)-7,9a-methanobe nz[a]azulene, gibb-3-ene-1,10-dica rboxylic acid deriv. \$\$ Gibb-3-ene -1,10-dicarboxylic acid, 2,4a,7-tr ihydroxy-1-methyl-8-methylene-, 1, 4a-lactone, (1.alpha.,2.beta.,4a.a lpha.,4b.beta.,10.beta.)- \$\$ Gibb erellin A3	645922	000077-06-5	47
			Hexahydropyridine, 1-methyl-4-[4,5 -dihydroxyphenyl]- \$\$ 4-(1-Methyl- 4-piperidinyl)-1,2-benzenediol #	220655	094427-47-1	35
			Indole-2-one, 2,3-dihydro-N-hydrox y-4-methoxy-3,3-dimethyl- \$\$ 1-Hyd roxy-4-methoxy-3,3-dimethyl-1,3-di hydro-2H-indol-2-one #	220349	2000220-34-9	27
74	14.897	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L 2H-3,9a-Methano-1-benzoxepin, octa hydro-2,2,5a,9-tetramethyl-, [3R-(3.alpha.,5a.alpha.,9.alpha.,9a.alp ha.)]- \$\$.beta.-AGAROFURAN, DIHYD RO- \$\$.beta.-DIHYDROAGAROFURAN \$\$ 2,6,10,10-tetramethyl-11-oxatricy clo[7.2.1.0(1,6)]dodecane	268965	005956-09-2	27
			4' METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 2-(4-m ethylphenyl)-1H-indole \$\$ 2-(4-Met hylphenyl)indolizine \$\$ 2-(p-tolyl)-1H-indole \$\$ 2-p-Tolylindole \$\$ Indolizine, 2-(4-methylphenyl)- 1,2,5-Oxadiazol-3-amine, 4-(3-meth oxyphenoxy)-	221291	007496-81-3	22
				219672	2000219-67-2	18
75	15.001	0.28	C:\Database\W10N11 Full.L 2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetr ahydro-4,4,7a-trimethyl-, (R)- \$\$ 2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetr ahydro-4,4,7a-trimethyl- \$\$ Actini diolide, dihydro- \$\$ NSC 357087 \$\$ Dihydroactinidiolide	143679	017092-92-1	70
			2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetr ahydro-4,4,7a-trimethyl- \$\$ 4,4,7A -TRIMETHYL-5,6,7,7A-TETRAHYDRO-1-B ENZOFURAN-2(4H)-ONE \$\$ (2,6,6-TRIM	143676	015356-74-8	70

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ETHYL-2-HYDROXYCYCLOHEXYLIDENE)ACE TIC ACID LACTONE \$\$ 2,2,6-TRIMETHY L-7-OXA-8-KETO-BICYCLO(4,3,0)NON-9 -ENE Dihydroactinidiolide \$\$ 4,8,8-Trim ethyl-3-oxabicyclo[4.3.0]non-1-en- 3-one	143671	2000143-67-1	62
76	15.187	0.20	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Indole, 4,5,6-trimethoxy- \$\$ 4, 5,6-trimethoxy-1H-indole \$\$ 4,5,6- TRIMETHOXYINDOLE \$\$ INDOLE, 4,5,6- TRIMETHOXY- Thieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamid e, 3-amino-6-methyl- Methyl 3-bromo-1-adamantaneacetate \$\$ Tricyclo[3.3.1.1(3,7)-]decane- 1-carboxylic acid, 3-bromo-5-methyl- l-, methyl ester \$\$ Methyl (3-brom o-1-adamantyl)acetate \$\$ Methyl (3 -bromo-1-adamantyl)acetate (comput er-generated name)	220144 219643 471554	030448-04-5 2000219-64-3 014575-01-0	43 30 22
77	15.573	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)-, 2,3-bis[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) \$\$ TRIMETHYLSILYLETHE R DERIVATIVE OF 1-MONOLINOLEIN \$\$ 1-Monolinoleoylglycerol trimethyls ilyl ether \$\$ 2,3-Bis[(trimethylsi lyl)oxy]propyl (9Z,12Z)-9,12-octad ecadienoate GLYCEROL-1,2,3-D3, TRIS-O-(TRIMETH YLSILYL)- \$\$ 2,2,8,8-TETRAMETHYL-5 -[(TRIMETHYLSILYL)OXY]-3,7-DIOXA-2 ,8-DISILANONANE \$\$ GLYCERIN-1,2,3- D3, TRIS-O-(TRIMETHYLSILYL)- Tetrasiloxane, decamethyl- \$\$ Deca methyltetrasiloxane \$\$ [(CH3)3SiOS i(CH3)2]2O \$\$ CD3780 \$\$ D3780 \$\$ 1 ,1,1,3,3,5,5,7,7-Decamethyltetra siloxane #	861650 538986 544667	054284-45-6 2000538-98-6 000141-62-8	43 35 27
78	15.763	0.47	C:\Database\W10N11 Full.L Diethyl Phthalate \$\$ 1,2-Benzenedi carboxylic acid, diethyl ester \$\$ Phthalic acid, diethyl ester \$\$ o- Benzenedicarboxylic acid, diethyl ester \$\$ Anozol \$\$ Ethyl phthalate \$\$ Neantine \$\$ Palatinol A \$\$ Pht halol \$\$ Placidol E \$\$ Solvanol \$\$ Unimoll DA Phthalic acid, 1-tert-butoxyprop-2 -yl ethyl ester 2-((Pent-4-enyloxy)carbonyl)benzoi c acid \$\$ Phthalic acid, monopent- 4-enyl ester \$\$ Pent-4-enyl hydrog en phthalate \$\$ Monopent-4-enyl ph	266260 540442 304765	000084-66-2 2000540-44-2 2000304-76-5	96 72 53

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGGA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
-----	----	-------	------------	------	------	------

thalate

79	16.673	0.13	C:\Database\W10N11 Full.L Hexadecamethylcyclooctasiloxane \$\$ Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl - (CAS) \$\$ Hexadecamethyl-cyclooct asioxane \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10, 12,12,14,14,16,16-Hexadecamethylcy clooctasiloxane \$\$ hexadecamethyl - cyclo - octa - siloxane \$\$ EINEC S 209-137-2 CYSTINE, TBS 2X Benzeneacetic acid, .alpha.,3,4-tr is[(trimethylsilyl)oxy]-, trimethy lsilyl ester \$\$ TRIMETHYLSILYL (3, 4-BIS[(TRIMETHYLSILYL)OXY]PHENYL) [(TRIMETHYLSILYL)OXY]ACETATE \$\$ 1,2 -BIS(TRIMETHYLSILYLOXY)-2-(3',4'-B IS(TRIMETHYLSILYLOXY)PHENYL)ETHANO NE	894865	000556-68-3	49
80	16.721	0.09	C:\Database\W10N11 Full.L Ethane, 1-(4,4,4-trifluoro-1,3-dit hiobutyl)-2-(3,3,3-trifluoro-1,2-d ithiopropyl)- \$\$ 1-[(Trifluorometh yl)disulfanyl]-2-([(trifluorometh yl)sulfanyl)methyl)sulfanyl)ethane # Isothiazolo[3,4-e]-2,1,3-benzothia diazole, 4-methyl- \$\$ 4-methyl-[1, 2]thiazolo[3,4-e][2,1,3]benzothiad iazole \$\$ 4-methylisothiazolo[3,4- e][2,1,3]benzothiadiazole \$\$ 8-MET HYLISOTHIAZOLO[4,5-C]-2,1,3-BENZOT HIADIAZOLE 1H-Indole, 1-methyl-2-phenyl- \$\$ 1 -METHYL-2-PHENYL-1H-INDOLE \$\$ 1-me thyl-2-phenyl-2H-1lambda(5)-indole \$\$ 1-METHYL-2-PHENYLINDOLE \$\$ 2-P HENYL-N-METHYLINDOLE \$\$ INDOLE, 1- METHYL-2-PHENYL- \$\$ N-METHYL-2-PHE NYLINDOLE \$\$ EINECS 222-618-1 \$\$ N SC 63793	538556	2000538-55-6	50
81	17.049	0.33	C:\Database\W10N11 Full.L 1-Tetradecanamine, N,N-dimethyl- \$ \$ N,N-DIMETHYL-1-TETRADECANAMINE \$ \$ 1-(DIMETHYLAMINO)TETRADECANE \$\$ 1-TETRADECANAMINE, N,N-DIMETHYLY- \$\$ ADMA 14 \$\$ ARMEEN DM 14D \$\$ ARM INE DM14D \$\$ DI-METHYL-N-TETRADECY LAMINE \$\$ DIMETHYL MYRISTAMINE \$\$ EMPIGEN AH 3(N,N-Dimethylmyristylammonio)prop anesulfonate \$\$ 1-Tetradecanaminu m, N,N-dimethyl-N-(3-sulfopropyl)- , hydroxide, inner salt Amine, dimethyl-2-phosphinoethyl-	329376	000112-75-4	72
				685996	014933-09-6	64
				14751	161944-90-7	64

CISTDU1-SPL...ORES141024.M Mon Jun 15 13:33:27 2015

Page: 25

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			\$\$ N,N-Dimethyl-2-phosphinoethanamine #			
82	17.173	0.26	C:\Database\W10N11 Full.L Tetradecanal \$\$ 1-TETRADECANAL \$\$ 1-TETRADECYL ALDEHYDE \$\$ ALDEHYDE C-14 \$\$ ALDEHYDE C-14, MYRISTIC \$\$ C-14 ALDEHYDE, MYRISTIC \$\$ MYRIST ALDEHYDE \$\$ MYRISTIC ALDEHYDE \$\$ M YRISTYLALDEHYDE \$\$ N-TETRADECANAL \$\$ TETRADECYL ALDEHYDE \$\$ AI3-3619 Tridecanal (CAS) \$\$ Tridecanaldehy de \$\$ Tridecyl aldehyde \$\$ n-Tride cylaldehyde \$\$ 1-Tridecanal \$\$ Tri decane aldehyde \$\$ EINECS 234-004- Hexadecanal \$\$ 1-HEXADECANAL \$\$ 16 -HEXADECANAL \$\$ hexadecanalpalmiti c aldehydepalmitaldehydeALDEHYDE 1 6:0 \$\$ PALMITALDEHYDE \$\$ PALMITIC ALDEHYDE \$\$ PALMITOYL ALDEHYDE \$\$ AI3-24252 \$\$ EINECS 211-111-0	237522	000124-25-4	41
83	17.492	0.23	C:\Database\W10N11 Full.L Cyclododecasiloxane, tetracosameth yl- \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12 ,14,14,16,16,18,18,20,20,22,22,24, 24-TETRACOSAMETHYLCYCLODOECASILOX ANE \$\$ tetracosamethyl-cyclo-dodec asiloxane 1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]- \$\$ 8-(2-fluorobenzyl)-1H -purin-6-amine \$\$ 8-(2-fluorobenzyl)-1H-purin-6-ylamine Heptasiloxane, hexadecamethyl- \$\$ Hexadecamethylheptasiloxane \$\$ 1,1 ,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,13- Hexadecamethylheptasiloxane #	916008	018919-94-3	43
84	17.716	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L 1-[(2-Nitrophenyl)amino]pyrrolidin e \$\$ N-(2-nitrophenyl)-1-pyrrolidi namine \$\$ N-(2-nitrophenyl)-N-(1-p yrrolidinyl)amine (Z,Z)-2-Benzylidene-5-[methyl(phen yl)methylidene]-3-phenyl-1,3-thiaz olidin-4-one Methyl N-(2-methyl-6,6-dioxo-5,7-d ihydrothieno[3,4-d]pyrimidin-4-yl) glycinate \$\$ 2-[(2-methyl-6,6-diox o-5,7-dihydrothieno[3,4-d]pyrimidi n-4-yl)amino]acetic acid methyl es ter	219904	2000219-90-4	27
85	18.025	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L Benzaldehyde, 2-nitro-, diaminomet hylidenhydrazone \$\$ N'-[(E)-(2-Ni trophenyl)methylidene]carbonohydra zonic diamide #	219564	102632-31-5	32

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1-[.alpha.-(1-Adamantyl)benzyliden e]thiosemicarbazide \$\$ (Z)-1-Adama ntyl(phenyl)methanone thiosemicarb azone #	556054	2000556-05-4	14
			1-[a-(1-Adamantyl)benzylidene]thio semicarbazide \$\$ (Z)-1-Adamantyl(p henyl)methanone thiosemicarbazone \$\$ 1-ADAMANTYL(PHENYL)METHANONE TH IOSEMICARBAZONE \$\$ 1-[(Z)-[1-adama ntyl(phenyl)methylidene]amino]thio urea	556053	2000556-05-3	14
86	18.197	0.03	C:\Database\W10N11 Full.L 2-((E)-[(E)-2-((E)-(2-HYDROXYPHE NYL)METHYLIDENE)AMINO)PROPYL]IMINO]METHYL)PHENOL \$\$.alpha.,.alpha.' -(1-Methylethylenediimino)di-ortho -cresol \$\$.alpha.,.alpha.'-Diprop ylenedinitrilodi-o-cresol \$\$ ALPHA ,ALPHA'-DIPROPYLENEDINITRILODI-O-C RESOL 1,1,3,3-Tetraallyl-1,3-disilacyclo butane	460540	000094-91-7	42
			7 METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 7-methy l-2-phenyl-1H-indole	221202	2000221-20-2	37
87	18.249	48.21	C:\Database\W10N11 Full.L Bromoacetic acid, 2-ethylhexyl est er \$\$ 2-Ethylhexyl bromoacetate # Trichloroacetic acid, 2-methylbuty l ester Trichloroacetic acid, 2-methylbuty l ester	355008 296885 296886	068144-73-0 2000296-88-5 2000296-88-6	53 47 47
88	18.325	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L Nitro-L-arginine \$\$.omega.-Nitro- L-arginine \$\$ L-Ornithine, N5-[imi no(nitroamino)methyl]- \$\$.omega.- Nitroarginine \$\$ Arginine, .omega. -nitro- \$\$ Arginine, .omega.-nitro -, L- \$\$ Arginine, N(G)-nitro-, (L)- \$\$ Arginine, N(G)-nitro-, (+)- \$\$ L-NNA Iron, tricarbonyl[(2,3,4,5-.eta.)- 2,3,4,5-tetrahydroxy-2,4-cyclopent adien-1-one)- \$\$ (TETRAHYDROXYCYCL OPENTADIENONE)TRICARBONYLIRON(0) \$ \$ 2,3,4,6-tetrahydroxy-1,1,1-tris(hydroxymethyl)-1-ferratetracyclo[2 .2.0.0(1,3).0(2,6)]hexan-5-one N(Epsilon)-methyl-L-lysine	255613 464255 93548	002149-70-4 117696-75-0 001188-07-4	27 25 17
89	18.501	0.34	C:\Database\W10N11 Full.L OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE \$\$ Cyclononasiloxane, octadecamethyl - (CAS) \$\$ Octadecamethyl-cyclonona siloxane \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10, 12,12,14,14,16,16,18,18-Octadecame	906163	000556-71-8	47

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			thylcyclononasiloxane \$\$ octadecam ethyl - cyclo - nona - siloxane Cyclododecasiloxane, tetracosamethyl- yl- \$\$ 2,2,4,4,6,6,8,8,10,10,12,12,14,14,16,16,18,18,20,20,22,22,24,24-TETRACOSAMETHYLCYCLODODECASILOXANE \$\$ tetracosamethyl-cyclo-dodecasiloxane BISTRIMETHYLSILYL N-ACETYL EICOSAS PHINGA-4,11-DIENINE \$\$ N-(3E,10E)-2-[(trimethylsilyl)oxy]-1-[(trimethylsilyl)oxy]methyl}-3,10-nonadecadienyl)acetamide	916009	018919-94-3	27
90	18.644	0.09	C:\Database\W10N11 Full.L Iron, tricarbonyl[(2,3,4,5-eta.)-2,3,4,5-tetrahydroxy-2,4-cyclopentadien-1-one]- \$\$ (TETRAHYDROXYCYCLOPENTADIENONE)TRICARBONYLIRON(0) \$ \$ 2,3,4,6-tetrahydroxy-1,1,1-tris(hydroxymethyl)-1-ferratetracyclo[2.2.0.0(1,3).0(2,6)]hexan-5-one Treflorine, 6'-hydroxy- \$ \$ 3,7,30-Trioxa-9,22,27-triazapentacyclo[20.8.2.1(6,10).1(17,21).0(2,4)]tetra triacontane, treflorine deriv. \$ \$ Trenudine Trenudine	464255	117696-75-0	32
				909527	079101-56-7	27
				912931	2000912-93-1	27
91	18.925	0.33	C:\Database\W10N11 Full.L 1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester \$ \$ benzene-1,2-dicarboxylic acid bis(2-methylpropyl) ester \$ \$ benzene-1,2-dicarboxylic acid diisobutyl ester \$ \$ bis(2-methyl-propyl) phthalate \$ \$ bis(2-methylpropyl) benzene-1,2-dicarboxylate 1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl 2-methylpropyl ester (CAS) \$ \$ N-BUTYL ISOBUTYL PHTHALATE \$ \$ Phthalic acid, butyl isobutyl ester \$ \$ 1-Butyl 2-isobutyl phthalate \$ \$ butyl iso - butyl phthalate \$ \$ butyl 2 - methyl - propyl phthalate 1,2-Benzenedicarboxylic acid, dibutyl ester \$ \$ ARALDITE 502 \$ \$ benzene-1,2-dicarboxylic acid dibutyl ester \$ \$ BENZENE-O-DICARBOXYLIC ACID, DI-N- \$ \$ BENZENE-O-DICARBOXYLIC ACID, DI-N-BUTYL ESTER \$ \$ BENZENE DICARBOXYLIC ACID, DIBUTYL ESTER \$ \$ BUFA	447322	000084-69-5	74
				447444	017851-53-5	64
				447168	000084-74-2	64
92	19.225	0.19	C:\Database\W10N11 Full.L 5,6-Dihydro-2,3,10,11-tetramethoxy isoquino[1,2-b]quinazolin-8-one \$ \$ 2,3,10,11-tetramethoxy-5,6-dihydr	696172	2000696-17-2	47

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEA\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.1 Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			o-8H-isoquino[1,2-b]quinazolin-8-one			
			1-(2',5'-Dimethylphenyl)-1-(p-tolyl)ethene	269774	2000269-77-4	27
			1,4-dimethyl-2-[1-(4-methylphenyl)ethenyl]benzene			
			1,4-dimethyl-2-[1-(4-methylphenyl)vinyl]benzene			
			1,4-dimethyl-2-[1-(p-tolyl)vinyl]benzene			
			Tetrasiloxane, decamethyl- (CAS)	544666	000141-62-8	22
			Decamethyltetrasiloxane			
			[(CH3)3SiO]2[Si(CH3)2]2O			
			CD3780 D3780			
			1,1,1,3,3,5,5,7,7,7-Decamethyltetrasiloxane			
			Trimethylsilyl-[methyl(trimethylsilyloxy)silyloxy]oxytrimethylsilane			
			EINECS 205-491-7			
93	19.473	0.18	C:\Database\W10N11 Full.L			
			3-Methyl-2-(3,7,11-trimethyldodecyl) furan	493130	166773-55-3	96
			Tricyclo[4.3.1.1(3,8)]undecan-1-ol	109407	031061-64-0	43
			1-Hydroxyhomoadamantane			
			Imidazole, 4-methyl-5-[3,3,3-trifluoropropionylpropyl]-	303662	2000303-66-2	37
			1,1,1-Tri fluoro-6-(4-methyl-1H-imidazol-5-yl)-3-hexanone			
94	19.916	0.10	C:\Database\W10N11 Full.L			
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylbutyl) ester	615914	007299-89-0	38
			benzene-1,2-dicarboxylic acid bis(2-ethylbutyl) ester			
			BIS(2-ETHYL-N-BUTYL) PHTHALATE			
			bis(2-ethylbutyl) benzene-1,2-dicarboxylate			
			bis-(2-ethyl-butyl) phthalate			
			AI3-04276			
			Phthalic acid, isobutyl undecyl ester	714633	2000714-63-3	38
			Phthalic acid, hept-2-yl isobutyl ester	576806	2000576-80-6	38
95	20.049	0.38	C:\Database\W10N11 Full.L			
			Cyclopentanone	4392	000120-92-3	35
			Adipic ketone			
			CP CYCLOPENTANON			
			Dumasin			
			Ketocyclopentane			
			Ketopentamethylene			
			PYRAN-2,4(3H)-DIONE, 3-ACETYL-6-METHYL-			
			AI3-16609			
			AIDS-017583			
			EINECS 204-435-9			
			HSDB 2822			
			NSC 4122			
			UN2245			
			4-Ethoxycarbonyl-2-methyl-2-oxazoline	88401	068683-04-5	30
			Ethyl 2-methyl-4,5-dihydro-1,3-oxazole-4-carboxylate			
			Decanoic acid, hexyl ester	377760	010448-26-7	27
			Hexyl decanoate			
96	20.125	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L			
			SILIKONFETT	918319	000000-00-0	38
			1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15	891705	019095-24-0	38

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEE\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			,15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE \$\$ Octasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9 ,11,11,13,13,15,15-hexadecamethyl- \$\$ 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,1 3,15,15-Hexadecamethyloctasiloxane SILIKONFETT	918442	000000-00-0	38
97	20.144	0.03	C:\Database\W10N11 Full.L D-Glucitol, hexaacetate \$\$ 1,2,3,4 ,5,6-HEXA-O-ACETYLHEXITOL \$\$ 1,2,3 ,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GALACTITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL-D-GLU CITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O-ACETYL -D-MANNITOL \$\$ 1,2,3,4,5,6-HEXA-O- ACETYL-L-IDITOL \$\$ D-MANNITOL, HEX ACETATE 2-[(2'-Ethylphenyl)(2"-isopropylph enyl)methoxy]ethanol \$\$ (2'-Ethylp henyl)(2"-isopropylphenyl)(hydroxy ethoxy)methyl \$\$ 2-[(2-ethylphenyl) (2-isopropylphenyl)methoxy]ethano l \$\$ 2-[4'-Hydroxy-1'-(2"-ethylphe nyl)-2'-oxabutyl]-1-isopropylbenze ne 2-Methoxy-N-methylethylamine \$\$ 2- Methoxy-N-methylethylamine \$\$ 2-Me thoxy-N-methylethylamine (computer -generated name)	805668 511819 6921	007208-47-1 2000511-81-9 038256-93-8	38 32 25
98	20.197	0.12	C:\Database\W10N11 Full.L Ethyl 13-methyl-tetradecanoate Hexadecanoic acid, ethyl ester \$\$ ETHYL CETYLATE \$\$ ETHYL HEXADECANO ATE \$\$ ETHYL PALMITATE \$\$ HEXADECANO IC ACID,ETHYL ESTER MFC18 H36 O2 \$\$ PALMITIC ACID, ETHYL ESTER \$\$ A13-06331 \$\$ EINECS 211-064-6 \$\$ F EMA NO. 2451 \$\$ NSC 8918 ETHYL NONADECANOATE \$\$ nonadecanoi c acid ethyl ester \$\$ NSC 136559	423125 467900 594185	2000423-12-5 000628-97-7 018281-04-4	35 27 25
99	20.644	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L cis-3,3a,4,5,6,7-Hexahydro-7-(2-th ienyl)cyclohexa[c]isoxazole \$\$ (3a S,7S)-7-(2-thienyl)-3,3a,4,5,6,7-h exahydro-2,1-benzisoxazole NP1ECME - isomer M \$\$ Methyl[(4'-n onyl)phenoxy]methylcarboxylate \$\$ Nonylphenol ethoxylate derivative dimer of Coleon F \$\$ (4bS,9RS,10'a S)-4,4a,10,10'a-tetrahydro-1',6-di hydroxy-1,2,4a,7',8',10'a-hexameth yl-3',7-bis(2-propenyl-spiro[3H,9H -phenanthrene-9,5'(5'H)-phenanthro {1,10-bc}furan]2',3,5,8,9'-pentone	220034 492304 903802	2000220-03-4 2000492-30-4 122346-71-8	43 35 32
100	20.773	0.06	C:\Database\W10N11 Full.L 6-nitro-3-methyl-2-methyl-iminoben	219660	2000219-66-0	38

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEE\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			zoxazole \$\$ N-((2Z)-3-methyl-6-nitro-1,3-benzoxazol-2(3H)-ylidene)metanamine \$\$ N-[(Z)-methyl]-N-((2Z)-3-methyl-6-nitro-1,3-benzoxazol-2(3H)-ylidene)amine			
			1,3-Benzenedicarboxylic acid, 5-(1,1-dimethylethyl)- \$\$ 5-tert-Butylisophthalic acid # \$\$ 5-t-Butylisophthalic acid	266212	002359-09-3	25
			Cyclohexene, 1,3,3-trimethyl-2-[1-(methylthio)-1,3-butadienyl]-, (E)- \$\$ 1,3,3-trimethyl-2-[(1Z)-1-(methylsulfanyl)-1,3-butadienyl]-1-cyclohexene \$\$ 2,6,6-TRIMETHYL-1-(1-METHYLTHIO-(E)1,3-BUTADIEN-1-YL)-1-CYCLOHEXENE	268319	121067-36-5	25
101	20.797	0.08	C:\Database\W10N11 Full.L Methyl (3S)-3-Hydroxy-3,4-dihydroquinoline-1(2H)-carboxylate	220331	2000220-33-1	38
			Cyclohexane, 1,1-dimethyl-3-methylen-2-[1-(methylthio)-1,3-butadienyl]-, (Z)-(.+.-)- \$\$ (1Z)-1-(2,2-dimethyl-6-methylenecyclohexyl)-1,3-butadienyl methyl sulfide \$\$ 1,1-dimethyl-3-methylene-2-[(1Z)-1-(methylsulfanyl)-1,3-butadienyl]cyclohexane	268317	121067-32-1	35
			Styryltrimethylgermane \$\$ trimethyl[(E)-2-phenylethenyl]germane	265961	2000265-96-1	27
102	21.359	0.36	C:\Database\W10N11 Full.L Dodecahydropyrido[1,2-b]isoquinolin-6-one \$\$ Dodecahydro-6H-pyrido[1,2-b]isoquinolin-6-one #	221039	108873-36-5	38
			Dodec-3-yn-1-ol \$\$ 3-Dodecyn-1-ol	150161	2000150-16-1	27
			3-Nonyn-1-ol \$\$ 3-NONYN-1-OL \$\$ NO	55126	031333-13-8	25
			N-3-YN-1-OL \$\$ AI3-37270 \$\$ EINECS 250-573-8			
103	21.425	0.21	C:\Database\W10N11 Full.L 4H-1,4-Benzoxazine-4-acetic acid, 2,3-dihydro-2-oxo- \$\$ (2-OXO-2,3-DIHYDRO-4H-1,4-BENZOXAZIN-4-YL)ACETIC ACID \$\$ 2-(2(3H)-OXO-4H-1,4-BENZOXAZIN-4-YL)ACETIC ACID \$\$ 2-(2-keeto-3H-1,4-benzoxazin-4-yl)acetic acid	219824	006243-07-8	27
			3,3,6,6,7-Pentamethylbicyclo[3.3.1]non-7-en-2-one	218912	2000218-91-2	22
			4,4'-Di-8-theophyllineyl-tetraphthalanilide	906789	2000906-78-9	16
104	21.616	0.29	C:\Database\W10N11 Full.L (3Z)-[(Trimethylsilyl)methylidene]octahydroinden-4-one (1E)-1-[(trimethylsilyl)methylene]octahydro-4H-inden-4-one \$\$ (3E)-[(Trimethyl	267664	2000267-66-4	35

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEE\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			silyl)methylidene]octahydroinden-4-one			
			4' METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 2-(4-methylphenyl)-1H-indole \$\$ 2-(4-Methylphenyl)indolizine \$\$ 2-(p-tolyl)-1H-indole \$\$ 2-p-Tolylindole \$\$ Indolizine, 2-(4-methylphenyl)-Acetamide, 2-(adamantan-1-yl)-N-(1-adamantan-1-ylethyl)-	221291	007496-81-3	35
105	21.682	0.30	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Isoindole-1,3(2H)-dithione, 2-ethyl- \$\$ 2-ethyl-1H-isoindole-1,3(2H)-dithione \$\$ N-ETHYL-1,3-DITHIOISOINDOLINE N-Methyl-1-adamantaneacetamide \$\$ 2-(1-Adamantyl)-N-methylacetamide 6-(4-fluorophenyl)dihydro-2H-pyran-2,4(3H)-dione	219865	035373-06-9	80
106	21.925	0.25	C:\Database\W10N11 Full.L Phenol, 2,4-dichloro-6-nitro- \$ \$ 2,4-bis(chloranyl)-6-nitro-phenol \$ \$ 2,4-DICHLOR-6-NITROFENOL \$ \$ 2,4-dichloro-6-nitro-phenol \$ \$ 2-NITRO-4,6-DICHLOROPHENOL \$ \$ AI3-14929 \$ \$ BRN 2050081 \$ \$ EINECS 210-202-2 \$ \$ NSC 38660 4' METHYL-2 PHENYLINDOLE \$\$ 2-(4-methylphenyl)-1H-indole \$\$ 2-(4-Methylphenyl)indolizine \$\$ 2-(p-tolyl)-1H-indole \$\$ 2-p-Tolylindole \$\$ Indolizine, 2-(4-methylphenyl)-3-Chloro-1,4-dimethyl-1H-quinolin-2-one \$ \$ 3-chloro-1,4-dimethyl-2(1H)-quinolinone \$ \$ 3-CHLORO-1,4-DIMETHYL-2-QUINOLONE	219399	000609-89-2	38
107	22.025	0.19	C:\Database\W10N11 Full.L 2-([2-(3,5-DIMETHYL-1H-PYRAZOL-1-YL)-2-OXOETHYL]SULFANYL)-1,3-BENZOTHAZOLE \$ \$ 1,3-BENZOTHAZOL-2-YL 2-(3,5-DIMETHYL-1H-PYRAZOL-1-YL)-2-OXOETHYL SULFIDE \$ \$ 2-(1,3-benzothiazol-2-ylsulfanyl)-1-(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)ethanone [1,2,4]Triazolo[1,5-a]pyrimidine-6-carboxylic acid, 4,7-dihydro-7-imino-, ethyl ester ethyl 7-imino-4H,7H-[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine-6-carboxylate \$ \$ [1,2,4]Triazolo[1,5-a]pyrimidine-6-carboxylic acid, 4,7-dihydro-7-imino-, ethyl ester	525053	155670-84-1	43
108	22.240	0.24	C:\Database\W10N11 Full.L SILIKONFETT SILICONE GREASE, SILICONFETT	918442	000000-00-0	53
				918315	000000-00-0	53

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\USUARIOS\MARCOS EGEE\2015\150604\
 Data File : Col 0 1B.D
 Acq On : 5 Jun 2015 16:23
 Operator : MJ
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 57 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\W10N11 Full.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\wiley7n.l Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - events2.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			SILIKONFETT	918319	000000-00-0	53
109	23.549	0.16	C:\Database\W10N11 Full.L 1H-Isoindole-1,3(2H)-dithione, 2-e thyl- \$\$ 2-ethyl-1H-isoindole-1,3(2H)-dithione \$\$ N-ETHYL-1,3-DITHIO ISOINDOLINE 4-(Hydroxymethyl)-1-(4'-methoxyphe nyl)azetidin-2-one \$\$ 1-(4-methoxy phenyl)-4-methylol-azetidin-2-one \$\$ 4-(hydroxymethyl)-1-(4-methoxy phenyl)-2-azetidinone \$\$ 4-(hydroxy methyl)-1-(4-methoxyphenyl)azetidi n-2-one 1H-Indole, 4,5,6-trimethoxy- \$\$ 4, 5,6-trimethoxy-1H-indole \$\$ 4,5,6- TRIMETHOXYINDOLE \$\$ INDOLE, 4,5,6- TRIMETHOXY-	219865 220319 220144	035373-06-9 2000220-31-9 030448-04-5	52 38 35
110	26.911	0.05	C:\Database\W10N11 Full.L 4-(2',6'-Dichlorophenylmethylene)- 1,2,3,4-tetraisoquinoline-1,3-dion SILIKONFETT SILIKONFETT	567236 918319 918442	2000567-23-6 000000-00-0 000000-00-0	50 42 42