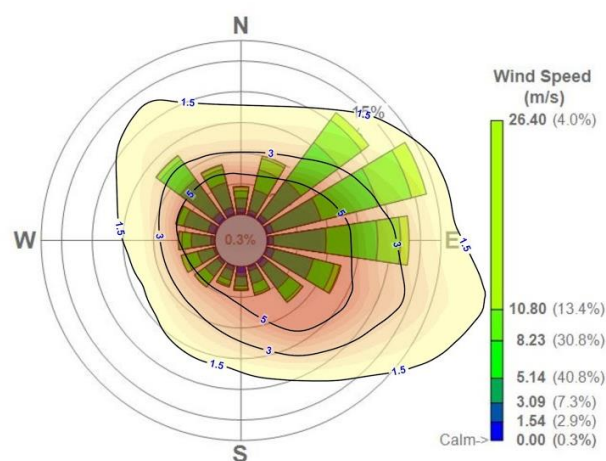




Estudio de determinación de niveles de NH₃, H₂S y COV's mediante dosímetros pasivos en dos zonas de la isla de Mallorca

Cliente:

GOIB Conselleria de terrororim energia i mobilitat - Govern Illes Balears

Informe nº: SCCA19A_Informe_00

Código de proyecto: SCCA19A





Título: Estudio de determinación de niveles de NH₃, H₂S y COV's
mediante dosímetros pasivos en dos zonas de la isla de
Mallorca

Informe nº : SCCA19A_Informe_00

código de proyecto: SCCA19A

palabras clave: EN13725, impacto, modelos dispersión

preparado a petición de : GOIB Conselleria de terrorim energia i mobilitat - Govern Illes Balears
C/ de la Plama, 4
07003, Palma de Mallorca
971177300

contacto: Sr. José Carlos Garrido

preparado por: Odournet S.L.
Parc de Recerca UAB
Edificio EUREKA - Espaci P2M2
Campus de la UAB
08193 Bellaterra (Cerdanyola del Vallès - Barcelona)
España
T: +34 93 5929048
CIF: B62461157

autores: Guerau Arisa

Firmado y aprobado por: Odournet SL por Jeroen Paymans

Estel·la Pagans, directora

Fecha: 29 de noviembre de 2019

Copyright: © 2019, Odournet sl



Tabla de contenidos

1	Ámbito de estudio	3
1.1	Antecedentes	3
1.2	Objetivos	3
1.3	Información de las zonas objeto de estudio	3
1.3.1	Zona Son Reus	3
1.3.1.1	Planta de metanización y compostaje	3
1.3.1.2	Planta de secado solar	4
1.3.1.3	Planta de selección de envases ligeros (Son Reus)	4
1.3.1.4	Depósito controlado de cenizas (Son Reus)	5
1.3.2	Zona Porto Pí	6
2	Metodología	7
2.1	Estudio de caracterización de niveles en inmisión de diferentes compuestos odoríferos (Captación pasiva)	7
2.1.1	Medición de niveles de NH ₃ mediante captación pasiva	10
2.1.2	Medición de niveles de H ₂ S mediante captación pasiva	10
2.1.3	COV's mediante captación pasiva Radiello, desorción térmica y análisis mediante TD-GC/ToFMS	11
2.1.4	Formaldehído mediante captación pasiva Radiello, y análisis mediante HPLC	12
2.1.5	Análisis de muestras mediante cromatografía de gases TD-GC/ToFMS	13
3	Resultados	14
3.1	Resultados del estudio de caracterización de niveles en inmisión de diferentes compuestos odoríferos (Captación pasiva)	14
3.1.1	Resultados relativos a H ₂ S, NH ₃ y Formaldehído	14
3.1.1.1	Niveles de H ₂ S, NH ₃ y Formaldehído en entornos de Son Reus	14
3.1.1.2	Niveles de H ₂ S, NH ₃ y Formaldehído en entornos de Porto Pí	15
3.1.2	Resultados relativos a COV's	16
3.1.2.1	Niveles de COV's en entornos de Son Reus	16
3.1.2.2	Niveles de COV's en entornos de Porto Pí	18
4	Discusión de resultados	19
4.1	Comentarios generales del enfoque del estudio	19
4.2	Zona Son Reus	19
4.2.1	Niveles de H ₂ S, NH ₃ y Formaldehído en entornos de Son Reus	19
4.2.2	Niveles de COV's en entornos de Son Reus	21
4.3	Zona Porto Pí	23
4.3.1	Niveles de H ₂ S, NH ₃ y Formaldehído en entornos de Porto Pí	23
4.3.2	Niveles de COV's en entornos de Porto Pí	23
5	Conclusiones	26



1 Ámbito de estudio

1.1 Antecedentes

Existen dos zonas en el entorno de la ciudad de Palma en que durante los últimos años se han producido problemas de olores. Concretamente los vecinos de Porto Pi han denunciado en diferentes ocasiones la actividad que lleva a cabo la empresa CLH en sus instalaciones de Porto Pi. Por otro lado también han presentado numerosas quejas los vecinos de Son Sardina y de otros núcleos cercanos a la zona de Son Reus, donde tienen lugar diversas actividades potencialmente generadoras de olor.

Tanto los vecinos de Porto Pi, como los del entorno de Son Reus, están preocupados, no sólo por las molestias de olores, sino también por si este olor se debe a compuestos que puedan tener una incidencia en la salud de las personas.

La Dirección General de Energía y Cambio Climático es el órgano competente para la vigilancia de la contaminación atmosférica en les Illes Balears (Decreto 1/2016, de 16 de febrero, de la presidenta de las Islas Baleares, por el que se modifica el Decreto 24/2015, de 7 de agosto, de la presidenta de las Islas Baleares, por el que se establecen las competencias y la estructura orgánica básica de las consejerías de la Administración de la Comunidad Autónoma de les Illes Balears (BOIB núm. 23, de 18 de febrero de 2016).

En cuanto a vigilancia de la calidad del aire son de aplicación la Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera, el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire y el Real Decreto 39/2017 de modificación del anterior.

El Laboratorio de la Atmósfera, adscrito a la Dirección General de Energía y Cambio Climático es el encargado de llevar a cabo campañas para vigilar que se cumple con los valores límite establecidos en la normativa.

Las posibles emisiones existentes tanto en la zona de Porto Pi como en la zona de Son Reus pueden estar formadas por compuestos que no están regulados en la normativa básica, de manera que el Laboratorio no dispone del equipamiento necesario para hacer seguimiento de este tipo de compuestos. Por este motivo el Laboratorio de la Atmósfera, ha solicitado los servicios de Odournet S.L. para la realización de un estudio de caracterización de los niveles de amoníaco (NH_3), sulfuro de hidrógeno (H_2S) y COV's (compuestos carbonílicos, hidrocarburos alifáticos e hidrocarburos aromáticos) en inmisión mediante captación pasiva entre los meses de junio a agosto para un total de 24 puntos.

1.2 Objetivos

Los principales objetivos del estudio, acorde con el documento de solicitud emitido por parte del Laboratorio de la Atmósfera, se pueden resumir en:

- Realizar una caracterización de los niveles de NH_3 , H_2S y COV's (ver lista anejo B) en 24 puntos distribuidos en las zonas de Porto Pi y Son Reus en Mallorca.
 - cuantificar aquellos que pueden generar olor
 - investigar la toxicidad de dichos compuestos por si algunos de ellos tuviesen que ser estudiados específicamente

1.3 Información de las zonas objeto de estudio

1.3.1 Zona Son Reus

1.3.1.1 Planta de metanización y compostaje

Según se especifica en Plan Director Sectorial de Residuos no Peligrosos de la isla de Mallorca (PDSRNPMA), el complejo presenta una planta de metanización de tres líneas, 2 de FORM y una de lodos,



con una capacidad de 96.000 t y una planta de compostaje con una capacidad de 45.000t de lodos y 17.000t de FORM. Las instalaciones presentan las siguientes etapas de proceso:

- Recepción de los residuos: pesaje y almacenaje.
- Alimentación de los residuos
- Clasificación
- Metanización Mezcla húmeda.
- Digestión anaeróbica
- Tratamiento de biogás
- Deshidratación
- Adecuación del digestato / FORM para compostaje
- Proceso de compostaje del digestato / FORM.
- Sistema de captación de olores
- Sistema de recogida y depuración de agua
- Afinamiento del compost

1.3.1.2 Planta de secado solar

Según se especifica en Plan Director Sectorial de Residuos no Peligrosos de la isla de Mallorca (PDSRNPMA), el complejo presenta una planta de secado solar con una capacidad de 30.000 t. Las instalaciones presentan las siguientes etapas de proceso:

- Recepción y almacenamiento de los residuos
- La descarga y distribución en las cámaras de secado.
- La instalación dispone de un sistema de intercambio de calor a 2 de las cámaras.
- El volteo de lodos
- Instalación de desodorización

1.3.1.3 Planta de selección de envases ligeros (Son Reus)

Según se especifica en Plan Director Sectorial de Residuos no Peligrosos de la isla de Mallorca (PDSRNPMA), el complejo presenta una planta de selección de envases ligeros. Las instalaciones presentan las siguientes etapas de proceso:

- Recepción y gestión de entradas del residuo. Recepción y obertura de bolsas.
- Adecuación del residuo a tratar.
- Preselección manual.
- Clasificación automática del residuo por medida. Preselección mecánica (criba rotativa) y separación de flujos.
- Preselección separadores balísticos.
- Selección de materiales valorizables



- Preparación y expedición de materiales

1.3.1.4 Depósito controlado de cenizas (Son Reus)

Según se especifica en Plan Director Sectorial de Residuos no Peligrosos de la isla de Mallorca (PDSRNPMA), el complejo presenta una planta de selección de envases ligeros. Las instalaciones presentan las siguientes etapas de proceso:

- Recepción del material
- Disposición del residuo en el vaso
- Impermeabilización y clausura de la superficie del depósito
- Sistema de recogida y tratamiento de gases

La Figura 2 presenta un ortofotomapa con la ubicación de las plantas de tratamiento de residuos descritas de la zona de Son Reus.

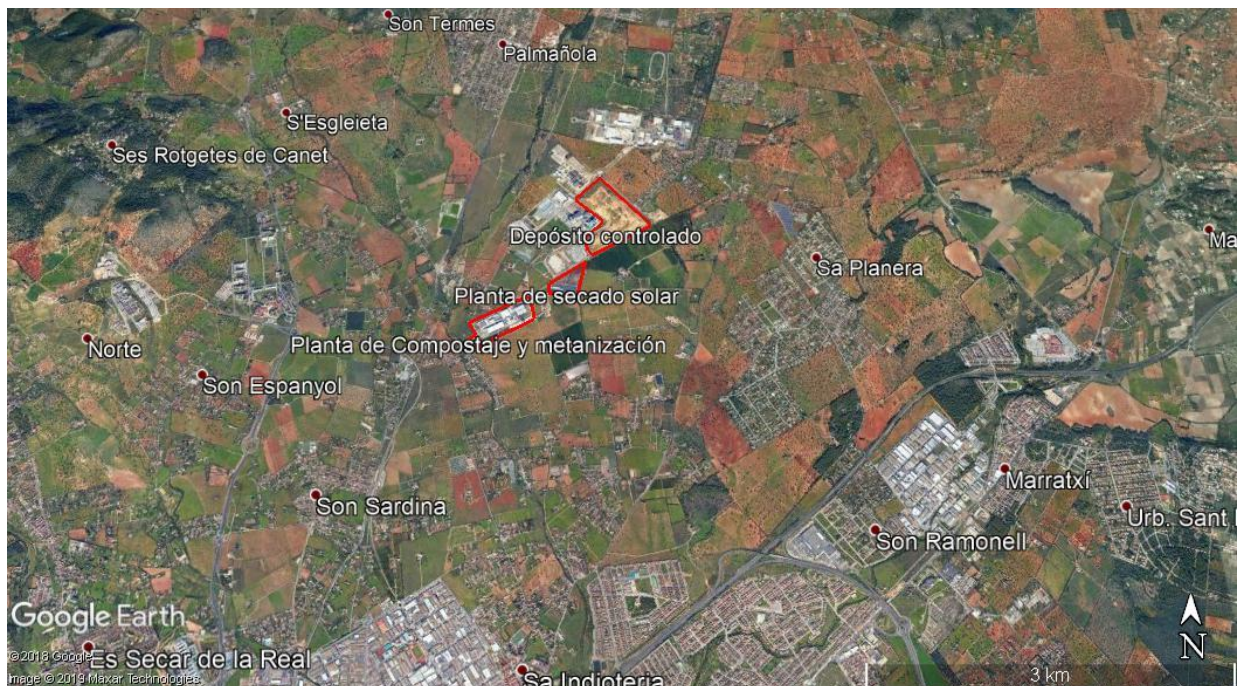


Figura 1: Localización de las plantas de tratamiento de residuos descritas de la zona de Son Reus.



1.3.2 Zona Porto Pí

En la zona de Porto Pí se localiza la Instalación de almacenamiento de Porto Pí con una capacidad nominal de planta de 12.340 m³ de Fuel 1 BIA (Fuente: www.clh.es).

La Figura 2 presenta un ortofotomapa con la ubicación de la Instalación de almacenamiento de Porto Pí



Figura 2: Localización de la Instalación de almacenamiento Fuel 1 BIA de Porto Pí



2 Metodología

2.1 Estudio de caracterización de niveles en inmisión de diferentes compuestos odoríferos (Captación pasiva)

El objetivo del estudio es el de realizar una caracterización de los niveles de inmisión de diferentes compuestos odoríferos en aire ambiente de diferentes puntos en el entorno de la zona de Son Reus y Porto Pí. Para la realización de este estudio, se utilizaron dosímetros Radiello para el muestreo pasivo de Sulfuro de hidrogeno, amonio y COVs, incluyendo Formaldehído.

Para la caracterización de los niveles de amoniaco, ácido sulfhídrico y COVs (caracterización cuantitativa de COVs mediante cromatografía de gases TD-GC/ToFMS y Formaldehído), se determinaron un total de 23 puntos en entornos de uso residencial y un punto interior de una residencia. Dichas ubicaciones y detalle de las caracterizaciones realizadas para cada uno de ellos se detallan en la Tabla 1 y Tabla 2.

Tabla 1 Relación de puntos en los que se toman muestras mediante dosímetros pasivos y parámetros caracterizados en Son Reus

Ref.	Dirección	Punto de anclaje	NH ₃	H ₂ S	COV	Formaldehído
SR-1	SR -1 Glorieta Tirme	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-2	C/ Alfabeguera, 38	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-3	P.I. Ses Veles; C/ Fonoll, 54	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-4	Disseminat Districte 2 Secció 4	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-5	Camí de Son Reus	Poste de teléfonos	1	1	1	1
SR-6	C/ Alfabeguera 20A	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-7	Camí de Sa Fita	Torre eléctrica	1	1	1	1
SR-8	Av. Garrovers (Es Garrovers)	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-9	C. Publico M ^a Antonia Salva	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-10*	Son Sardina C/ de Ribas, 52	Poste iluminación exterior	Ext.	Ext.	Ext.	Ext.
SR-11	Carrer Rosa, 283, Marratxí	Poste de teléfonos	1	1	1	1
SR-12	Camí de Na Cerdana, 21	Poste de teléfonos	1	1	1	1
SR-13	C/. de Miquel Fortaleza i Pinya, 24	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-14	Av Sòller, Palmañola (Blanco)	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
SR-15	Interior vivienda	Interior vivienda	1	1	1	1

*Nota Ext: SR-10 Muestra de la captación pasiva extraviada para la que no se han podido obtener resultados. La muestra desapareció del soporte de captación durante su proceso de exposición

Tabla 2 Relación de puntos en los que se toman muestras mediante dosímetros pasivos y parámetros caracterizados En Porto Pí

Ref.	Dirección	Punto de anclaje	NH ₃	H ₂ S	COV	Formaldehído
PPI-1	Planta CLH	Puente entre tanques	1	1	1	1
PPI-2	Planta CLH - Aparcamiento	Mástil cámara	1	1	1	1
PPI-3	Exterior planta CLH Norte	Mástil cámara	1	1	1	1
PPI-4	C/ Can Morro, 17	Poste de teléfono	1	1	1	1
PPI-5	C/Vista Alegre, 34	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
PPI-6	C/ de Vista Alegre, 14	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
PPI-7	C/Francesc de Verònica Bassa, 1	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
PPI-8	C/Son Buit - Francesc de Verònica Bassa	Poste iluminación exterior	1	1	1	1
PPI-9	C/ Joan de Saridakis, 50 (Blanco)	Poste iluminación exterior	1	1	1	1

En el Anejo E se presenta una relación de detalle de las diferentes ubicaciones de puntos y en el Anejo G y H se detallan los tiempos de exposición para cada uno de los dosímetros instalados.

El conjunto de puntos de medición, consensuados con el cliente, se distribuyeron considerando la inclusión de un punto “blanco” por cada zona. Dicho punto se considera como no potencialmente afectado por las instalaciones consideradas como potencialmente afectadoras del medio en la zona. Así para la zona de Son Reus se escogió el punto SR-14 ubicado en el núcleo de Palmañola, donde no se tiene constancia de molestias. Para la zona de Porto Pí, se considera como “blanco” el punto PPI-9, presentándose



suficientemente alejado de las instalaciones de CLH e igualmente próximo a la vía Ma-1(carretera de alta densidad de tránsito rodado).

El resto de puntos se distribuyeron en función de las zonas donde se han reportado quedas por olores, siempre tratando de distribuir los puntos con el fin de obtener una gradación en la distancia respecto de los focos potenciales.

En esta línea, en la Figura 3 se puede observar como la distribución de puntos para la zona de Son Reus incorpora los puntos SR-1, SR-2 y SR-3 como más próximos a los potenciales focos, en una segunda línea se podrían considerar los puntos SR-4, SR-5 y SR-6 y ya el resto de puntos con distancias mayores y variables respecto a los focos potenciales.

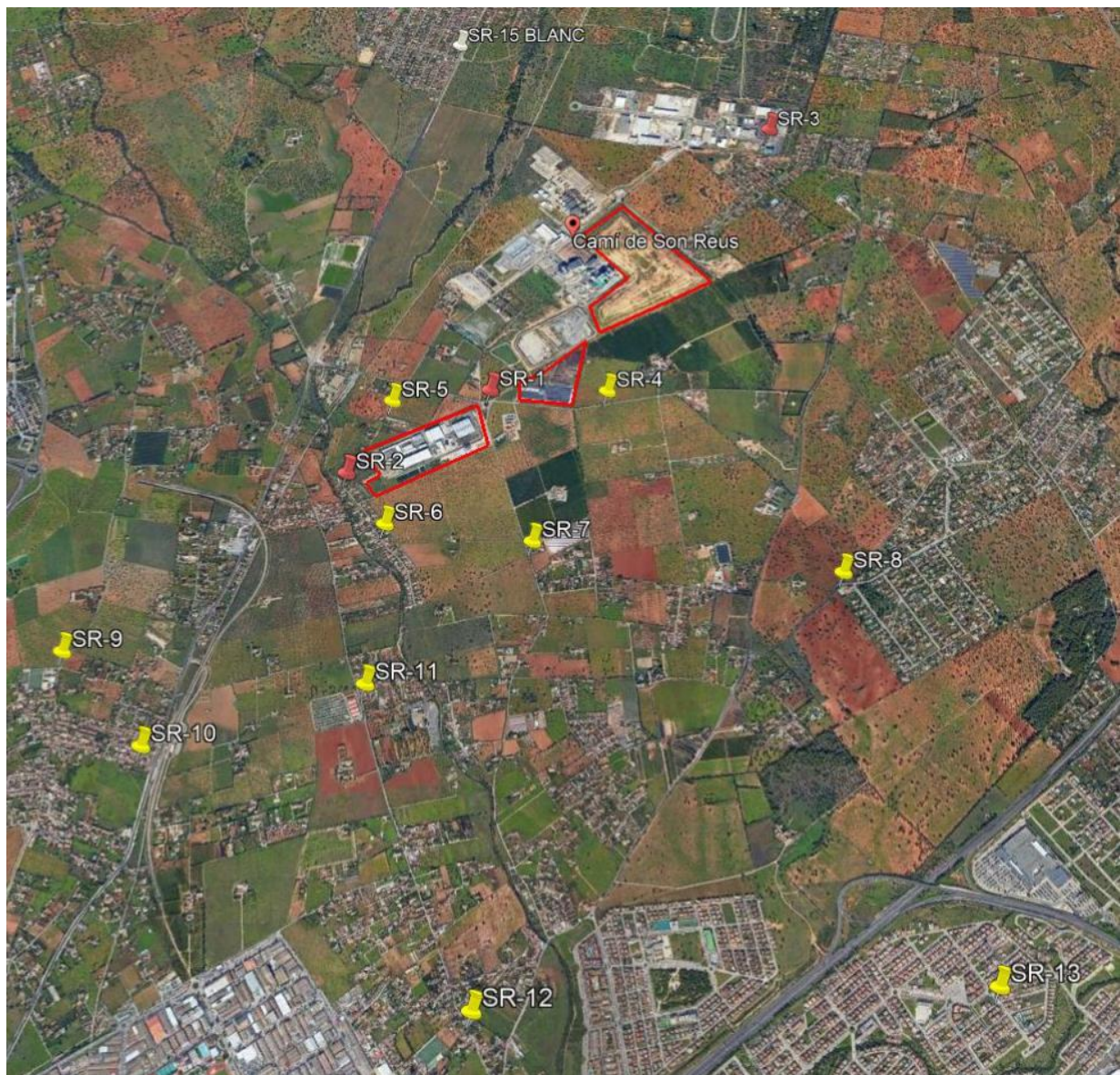


Figura 3 Ubicación de los puntos caracterizados mediante dosímetros pasivos en entornos residenciales externos en la zona de Son Reus

Para la zona de Porto Pi, en la Figura 4, se puede observar como la distribución de puntos de medición donde se incorporan los puntos PPI-1, PPI-2 y PPI-3 como más próximos a los potenciales focos (ubicados en el interior de CLH o anejos a la instalación), en una segunda línea se podrían considerar los puntos PPI-4 y PPI-5 y ya el resto de puntos con distancias mayores y variables respecto a los focos potenciales.



Figura 4 Ubicación de los puntos caracterizados mediante dosímetros pasivos en entornos residenciales externos en la zona de Son Reus

2.1.1 Medición de niveles de NH₃ mediante captación pasiva

La determinación de los niveles de amoníaco se realizó mediante la siguiente configuración de captadores:

- Cuerpo difusivo azul Núm. De producto RAD1201.
- Placa de soporte N.º de producto RAD121.
- Adaptador vertical Núm. De producto RAD122 (opcional).
- Cartucho de chemiadsorbing N.º de producto RAD168.
- Análisis mediante UV-Vis (0,5 µg/muestra).

El cartucho RAD168 está hecho de polietileno microporoso e impregnado con ácido fosfórico. El amoníaco se adsorbe como ion amonio. Las sales de amonio en el aire dispersas como partículas no atraviesan la membrana difusora del radiello.

El ion amonio se cuantifica por espectrometría visible en forma de indofenol: a pH básico tamponado el ion amónico reacciona con fenol e hipoclorito de sodio, con catálisis de pentacianonitrosilferrato (en el siguiente cianoferrato), para formar indofenol. El producto de reacción se colorea intensamente en azul y su absorbancia se mide a 635 nm.

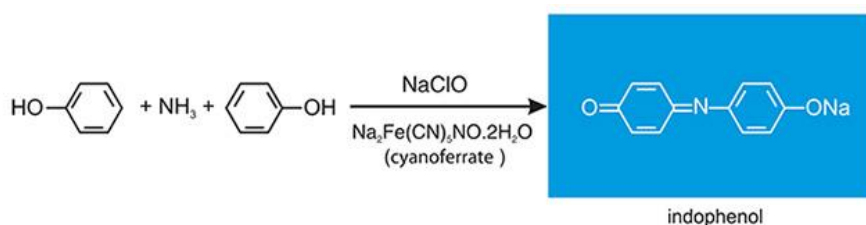


Figura 5 Principio de captación de amoníaco mediante tubos pasivos Radiello 168.

La tasa de muestreo Q a 298 K (25 ° C) y 1013 hPa es de 235 ml·min⁻¹ y se describe con un efecto de la temperatura en la frecuencia de muestreo que es despreciable (<0.1% / ° C) en el rango de 275 - 312 K (2 - 39 ° C). La tasa de muestreo es invariante con humedad en el rango de 10 - 90% y con velocidad del viento entre 0.1 y 10 m/ s.

Los cálculos para la determinación de los niveles promedio de amoníaco en el ambiente de exposición, se obtienen de la aplicación de la siguiente ecuación: $C \text{ (µg/m}^3\text{)} = 0.944 \cdot (m/235 \cdot t) \cdot 1000000$; donde m es la masa de ion amonio en µg que se encuentra en el cartucho, t es el tiempo de exposición en minutos y 0.944 es el factor numérico necesario para convertir el ion amonio en amoníaco.

$$C = 0.944 \frac{m}{235 \cdot t} 1,000,000$$

Figura 6 Ecuación para la determinación de la concentración de NH₃ en ambiente.

Fuente: <https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/radiello-air-sampler/ammonia-applications.html>

2.1.2 Medición de niveles de H₂S mediante captación pasiva

La determinación de los niveles de H₂S se realizó mediante la siguiente configuración de captadores:

- Cuerpo difusivo blanco Producto No. RAD120
- Placa de soporte N.º de producto RAD121



- Adaptador vertical Núm. De producto RAD122 (opcional)
- Cartucho de chemiadsorbing Producto No. RAD170
- Análisis mediante UV-Vis (0,5 µg/muestra).

El cartucho RAD170 está hecho de polietileno microporoso e impregnado con acetato de zinc. El sulfuro de hidrógeno es absorbido por acetato de zinc y transformado en sulfuro de zinc estable. El sulfuro se recupera por extracción con agua. En contacto con un agente oxidante como cloruro férrico en una solución fuertemente ácida, reacciona con el ion N, N-dimetil-p-fenilendiamonio para producir azul de metileno.

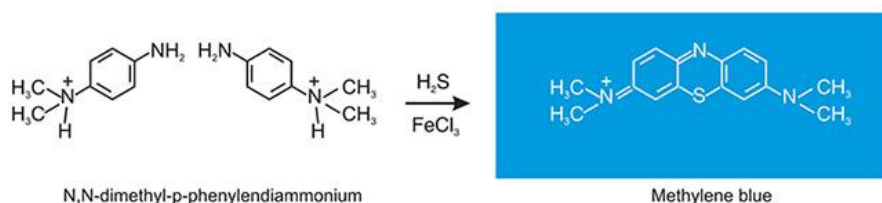


Figura 7 Principio de captación de H₂S mediante tubos pasivos Radiello 170.

La tasa de muestreo Q a 298 K (25 ° C) y 1013 hPa es de 0.096 ± 0.005 ng/ppb min. La tasa de difusión varía desde el valor 298 K en función de la temperatura (en grados Kelvin) como se expresa en la siguiente ecuación:

$$Q_K = 0.096 \left(\frac{K}{298} \right)^{3.8}$$

Figura 8 Ecuación para la determinación de Q_k.

Fuente: <https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/radiello-air-sampler/hydrogen-sulfide-applications.html>

donde Q_K es la tasa de muestreo a la temperatura K que varía de 268 a 313 K (de -5 a 40 ° C). La tasa de muestreo es invariante con humedad en el rango de 10 - 90% y con velocidad del viento entre 0.1 y 10 m/s.

Una vez se ha calculado Q_K a la temperatura de muestreo, la concentración C se obtiene de acuerdo con la ecuación siguiente, donde m es la masa de ion sulfuro en µg que se encuentra en el cartucho y t es el tiempo de exposición en minutos.

$$C = \frac{m}{Q_K \cdot t} 1,000$$

Figura 9 Ecuación para la determinación de la concentración de H₂S en ambiente.

Fuente: <https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/radiello-air-sampler/hydrogen-sulfide-applications.html>

2.1.3 COV's mediante captación pasiva Radiello, desorción térmica y análisis mediante TD-GC/ToFMS

La identificación y determinación semicuantitativa de COV mediante TD-GC/toFMS se realizó mediante la siguiente configuración de captadores:

- Principio COV (Desorción térmica)
- Cuerpo difusivo blanco Producto No. RAD120
- Placa de soporte N.º de producto RAD121



- Adaptador vertical Núm. De producto RAD122 (opcional)
- Cartucho de adsorción Producto No. RAD145
- Análisis mediante TD-GC/ToFMS

RAD145 es un cilindro de malla de acero inoxidable, con una rejilla de malla de 3x8 µm y un diámetro de 4.8 mm, con 350 ± 10 mg de carbón grafitado (Carbograph 4), con un tamaño de partícula de 35-50 malla. Los compuestos orgánicos volátiles se atrapan por adsorción y se recuperan por desorción térmica, el análisis se realiza por cromatografía de gases capilar y detección por GC/ToFMS.

Los valores de frecuencia de muestreo a 298 K (25°C) y 1013 hPa se enumeran a continuación. Todos los valores mostrados han sido medidos experimentalmente. Se han realizado pruebas de exposición hasta los niveles mostrados (en µg · m⁻³ · min) y se garantiza que las tasas de muestreo son lineales hasta los valores límite y para la concentración global de compuestos orgánicos volátiles en el aire que no exceda de 2,000 µg/m³.

La concentración promedio en todo el tiempo de exposición se calcula de acuerdo con la siguiente expresión

$$C [\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}] = \frac{m [\mu\text{g}]}{Q_K [\text{ml}\cdot\text{min}^{-1}] \cdot t [\text{min}]} \cdot 1,000,000$$

Figura 10 Ecuación para la determinación de la concentración de COV en ambiente

Fuente: <https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/radiello-air-sampler/vocs-thermally-desorbed-applications.html>

Donde Q_K es la tasa de muestreo a la temperatura K y Q₂₉₈ es el valor de referencia a 298 K. Esto produce una variación de ± 5% para una variación de 10°C (hacia arriba o hacia abajo) desde 25°C. Para la determinación de los niveles de COV, se considera un Q₂₉₈ de 30 ml/min correspondiente a Tolueno dado que no existen datos de Q₂₉₈ para la totalidad de los COV detectados. Ello conlleva que la valoración deba de considerarse semicuantitativa, dado que el valor obtenido puede presentar incertidumbres superiores a las especificadas utilizando Q₂₉₈ conocidos.

$$Q_K = Q_{298} \left(\frac{K}{298} \right)^{1.5}$$

Figura 11 Ecuación para la determinación de Q_K.

Fuente: <https://www.sigmaaldrich.com/technical-documents/articles/analytical/radiello-air-sampler/vocs-thermally-desorbed-applications.html>

2.1.4 Formaldehído mediante captación pasiva Radiello, y análisis mediante HPLC

La identificación y determinación semicuantitativa de COV mediante TD-GC/toFMS se realizó mediante la siguiente configuración de captadores:

- Cuerpo difusivo azul Producto No. RAD120-1
- Placa de soporte N.º de producto RAD121
- Adaptador vertical Núm. De producto RAD122 (opcional)
- Cartucho de adsorción Producto No. RAD165
- Análisis mediante HPLC



Los valores de frecuencia de muestreo a 298 K (25°C) y 1013 hPa se enumeran a continuación. Todos los valores mostrados han sido medidos experimentalmente. Se han realizado pruebas de exposición hasta los niveles mostrados (en $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{min}$) y se garantiza que las tasas de muestreo son lineales hasta los valores límite y para la concentración global de compuestos orgánicos volátiles en el aire que no exceda de 2,000 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

La concentración promedio en todo el tiempo de exposición se calcula de acuerdo con la siguiente expresión

$$C [\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}] = \frac{m [\mu\text{g}]}{Q_K [\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}] \cdot t [\text{min}]} \cdot 1,000,000$$

Figura 12 Ecuación para la determinación de la concentración de Formaldehído en ambiente

Fuente: Manual de Radiello

Donde Q_K es la tasa de muestreo a la temperatura K y Q_{298} es el valor de referencia a 298 K. Esto produce una variación de $\pm 5\%$ para una variación de 10°C (hacia arriba o hacia abajo) desde 25°C. Para la determinación de los niveles de Formaldehído, se considera un Q_{298} de 99 ml/min.

$$Q_K = Q_{298} \left(\frac{K}{298} \right)^{1.5}$$

Figura 13 Ecuación para la determinación de Q_K .

Fuente: Manual de Radiello

La duración óptima de la exposición varía con la concentración esperada. Para el formaldehído, los valores de concentración de 5-30 $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ generalmente se encuentran en mediciones urbanas al aire libre, mientras que se esperan 20-200 $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ en entornos de trabajo. En base a estos valores esperados el fabricante recomienda exposiciones de 7 días.

2.1.5 Análisis de muestras mediante cromatografía de gases TD-GC/ToFMS

Las muestras han sido analizadas en el laboratorio de Evaluación Molecular de Odournet S.L., en Barcelona. El laboratorio posee un equipo TD-GC/ToFMS, capacitado para analizar compuestos químicos a muy bajas concentraciones, del orden de partes por billón, de 10 a 100 veces menor que los sistemas de cromatografía convencionales.

Este nivel de detección es imprescindible si se pretende determinar las moléculas responsables de los malos olores, ya que la nariz humana ya percibe olores a muy bajas concentraciones (<ppmv). Un claro ejemplo de ello se muestra en la figura siguiente, donde se ilustran los umbrales de detección de olor de más de 230 compuestos, apreciándose para la mayoría de los compuestos umbrales del orden de partes por billón e incluso partes por trillón. Consecuentemente, pequeñas cantidades de estos compuestos en una mezcla ya son suficientes para generar olores muy relevantes.

El equipo consta de un cromatógrafo Agilent 7890A, líder en la industria del sector. Incluye avanzadas, nuevas y potentes capacidades de separación, funciones de productividad y automonitorización instrumental, mejorando así la calidad de los resultados y optimizando el tiempo de análisis.

El equipo GC está acompañado de un espectrómetro de masas que integra tecnología de tiempo de vuelo, Time-of-Flight Mass Spectrometer BenchTOF-dx (Almsco), que permite una alta definición para el análisis de compuestos en mezclas complejas y altamente contaminadas.

El instrumento está acoplado a un equipo de desorción térmica Unity2 (Markes International), que permite la recuperación cuantitativa de la muestra, eliminando la limitación de un único análisis y simplificando la validación del método y los datos.



3 Resultados

3.1 Resultados del estudio de caracterización de niveles en inmisión de diferentes compuestos odoríferos (Captación pasiva)

En base a la metodología y los datos expuestos en el apartado 2.1 Estudio de caracterización de niveles en inmisión de diferentes compuestos odoríferos (Captación pasiva), se presentan los resultados obtenidos para cada una de las ubicaciones y parámetros medidos para el periodo de exposición expuestos en Septiembre de 2019 (ver Anexo G y Anexo H).

3.1.1 Resultados relativos a H₂S, NH₃ y Formaldehído

Las incertidumbres asociadas al método se establecen a continuación:

- NH₃: +/- 10%
- H₂S: +/- 15%
- Formaldehído: +/- 10%

3.1.1.1 Niveles de H₂S, NH₃ y Formaldehído en entornos de Son Reus

Tabla 3. Niveles de H₂S, NH₃ y Formaldehído en entornos de Son Reus

Punto	H ₂ S (µg/m ³)	NH ₃ (µg/m ³)	Formaldehído(µg/m ³)
SR-1	0,442	12,290	0,192
SR-2	0,443	6,154	0,213
SR-3	0,345	2,799	0,212
SR-4	0,345	5,049	0,184
SR-5	0,256	5,786	0,192
SR-6	0,630	2,986	0,159
SR-7	0,346	2,386	0,141
SR-8	0,368	1,515	0,150
SR-9	0,279	1,398	0,146
SR-10	Ext.	Ext.	Ext.
SR-11	0,307	2,807	0,149
SR-12	<0,2299	3,009	0,167
SR-13	0,291	1,766	0,159
SR-14 (Blanco)	0,341	1,636	0,150
SR-15 (Interior V.)	<0,2299	20,324	1,231



3.1.1.2 Niveles de H₂S, NH₃ y Formaldehído en entornos de Porto Pí

Tabla 4. Niveles de H₂S, NH₃ y Formaldehído en entornos de Porto Pí

Punto	H ₂ S (µg/m ³)	NH ₃ (µg/m ³)	Formaldehído(µg/m ³)
PPI-1	<0,2297	1,313	0,141
PPI-2	<0,2298	1,393	0,150
PPI-3	<0,2299	2,603	0,239
PPI-4	0,2608	2,051	0,222
PPI-5	<0,2299	2,796	0,239
PPI-6	0,2707	2,238	0,231
PPI-7	0,3052	2,052	0,169
PPI-8	<0,2299	2,239	0,195
PPI-9 (Blanco)	<0,2299	1,493	0,177



3.1.2 Resultados relativos a COV's

La caracterización de los niveles de COV's se ha realizado mediante un análisis cuantitativo full scan de modo que se presentan los niveles de todos aquellos compuestos detectados para alguna de las muestras, habiéndose verificado la capacidad del método para identificar y cuantificar todos aquellos compuestos indicados por el cliente y que se exponen en el Anejo B. De la totalidad de COV's solicitados por el cliente únicamente el formaldehído no resulta detectable por el método utilizado y por este motivo su cuantificación se realiza mediante metodología adecuada de forma diferenciada.

3.1.2.1 Niveles de COV's en entornos de Son Reus

A continuación, en la Tabla 5 y Tabla 6, se presentan los niveles de COV's detectados para la zona de Son Reus, agrupados en familias de compuestos.

Tabla 5. Niveles de COV's en entornos de Son Reus – Presentación por familias (1)

Punto	SR 1	SR 2	SR 3	SR 4	SR 5	SR 6	SR 7	SR 8	SR 9
Familia Compuesto	(µg/m³)								
Alcohols	399,4	415,1	935,1	349,3	472,5	469,4	192,1	240,9	140,2
Aldehydes	830,0	1135,6	976,6	1197,2	1212,5	1360,6	759,9	760,1	411,3
Aliphatic Hydrocarbons	7119,0	6045,4	13135,6	6502,4	6332,4	6602,3	4112,3	3856,7	2683,2
Amines	11,6	0,8	10,3	6,5	10,3	13,1	0,3	3,5	0,3
Aromatic Alcohol	7,9	19,0	15,1	10,0	12,2	0,6	0,1	9,8	0,1
Aromatic compounds	3000,9	3385,9	3523,1	2872,9	2883,9	2985,0	2218,3	1882,8	1791,4
Cyclic Hydrocarbons	633,9	888,1	2217,9	479,0	535,6	535,3	297,5	241,3	248,0
Esters	225,7	232,1	253,2	136,0	190,7	198,6	124,8	122,1	85,5
Ethers	322,8	202,2	637,3	255,2	198,3	414,3	114,1	111,2	40,8
Furans	94,5	118,7	111,2	97,6	138,0	144,6	52,5	74,1	41,8
Halogen-containing comp.	589,7	519,9	454,2	469,6	530,3	525,0	299,8	295,7	239,4
Ketones	1633,1	1828,0	1459,3	1652,0	1828,5	1883,4	1002,5	968,5	814,4
Lactones	118,2	215,0	6,8	78,0	65,8	108,1	95,7	86,8	0,2
Mercaptans	4,2	1,9	4,4	1,6	2,8	2,4	0,6	0,9	0,0
Nitrogen-containing comp.	463,8	454,0	594,9	322,9	434,3	393,6	192,5	349,5	291,8
Organic Acids	1978,6	2129,0	1440,3	1637,2	1785,7	2185,5	1176,5	1129,1	848,8
Oxygen-containing comp.	96,1	118,4	59,2	62,0	86,0	127,1	19,5	20,4	18,6
Sulfur-containing comp.	350,5	303,1	180,8	260,3	237,5	256,5	126,0	99,7	72,3
Terpenes	1332,8	1186,3	3887,4	2062,5	1108,3	1112,2	754,2	601,7	396,3
Heterogroups	211,3	341,8	416,7	164,4	198,6	155,7	82,2	76,1	47,8



Tabla 6. Niveles de COV's en entornos de Son Reus – Presentación por familias (2)

Punto	SR 11	SR 12	SR 13	SR 14 (Blanco)	SR 15 (Vivienda)
Familia Compuesto	(µg/m³)				
Alcohols	254,8	267,0	284,0	251,1	1640,0
Aldehydes	571,7	590,6	722,0	772,2	2086,8
Aliphatic Hydrocarbons	3157,9	4955,5	4031,7	5415,4	5529,1
Amines	2,8	0,3	0,3	7,3	0,3
Aromatic Alcohol	7,2	0,1	0,1	10,5	473,3
Aromatic compounds	2088,2	2375,9	2245,6	2245,7	2128,6
Cyclic Hydrocarbons	374,1	377,5	212,2	333,4	841,2
Esters	121,3	139,6	152,2	85,5	727,2
Ethers	127,0	350,2	98,3	221,7	1106,5
Furans	54,6	39,4	69,6	62,0	267,3
Halogen-containing comp.	294,2	241,2	339,9	289,1	489,0
Ketones	894,5	828,7	810,3	1001,6	1668,0
Lactones	73,0	28,9	163,1	89,6	109,4
Mercaptans	0,5	0,8	0,3	1,0	3,3
Nitrogen-containing comp.	180,0	244,0	281,7	356,8	274,9
Organic Acids	1016,3	800,4	1186,8	1243,6	1217,2
Oxygen-containing comp.	30,5	48,4	17,5	40,8	511,9
Sulfur-containing comp.	108,9	151,9	145,8	135,5	112,4
Terpenes	704,8	506,2	395,5	493,9	2319,9
Heterogroups	97,6	122,9	149,3	77,3	361,5

En el Anejo C se exponen los resultados de la cuantificación para cada uno d ellos puntos y compuestos detectados en alguna de las muestras. Así pueden aparecer niveles de compuestos no detectados en algunas de las muestras, que igualmente se presentan en la tabla, dado que el compuesto si se encuentra con niveles detectables en alguna de las muestras restantes.



3.1.2.2 Niveles de COV's en entornos de Porto Pi

A continuación, en la Tabla 7, se presentan los niveles de COV's detectados para la zona de Porto Pi, agrupados en familias de compuestos.

Tabla 7. Niveles de COV's en entornos de Porto Pi – Presentación por familias

Punto	PPI-1	PPI-2	PPI-3	PPI-4	PPI-5	PPI-6	PPI-7	PPI-8	PPI-9 (Blanco)
Familia Compuesto	(µg/m³)								
Alcohols	413,6	614,9	593,0	775,8	564,3	560,3	570,8	507,2	565,5
Aldehydes	720,1	1002,0	830,2	1099,4	958,6	1364,2	1334,6	1462,6	1208,0
Aliphatic Hydrocarbons	11391,4	8906,5	8170,9	14973,4	8889,9	8455,3	7729,6	9297,4	7739,7
Amines	1,5	1,0	8,4	6,6	5,0	5,1	1,7	17,7	7,6
Aromatic Alcohol	0,6	0,1	0,6	0,7	21,6	21,1	0,1	20,7	45,3
Aromatic compounds	3574,5	3354,5	3362,8	4339,9	3729,3	3401,1	3271,0	3060,0	2864,9
Cyclic Hydrocarbons	2686,7	1688,3	982,0	1527,6	951,8	741,3	990,4	726,9	748,4
Esters	102,7	240,5	165,5	123,7	466,4	206,7	247,8	247,5	195,4
Ethers	304,9	449,5	265,0	684,3	559,1	296,0	363,7	252,5	209,7
Furans	69,4	97,5	72,7	106,0	114,9	121,8	116,8	150,2	135,7
Halogen-containing comp.	482,0	478,0	479,9	359,9	466,1	425,4	517,2	572,4	448,7
Ketones	1059,2	1237,8	979,3	1569,7	1489,2	1522,0	1618,1	1704,1	1769,1
Lactones	36,7	42,5	137,9	80,1	80,5	72,2	51,5	138,9	62,2
Mercaptans	5,2	0,0	3,8	5,3	3,4	0,0	3,5	4,3	5,6
Nitrogen-containing comp.	413,1	524,2	1108,1	538,5	424,1	590,1	437,7	614,3	684,4
Organic Acids	1849,5	1508,9	784,8	1336,0	1640,8	1412,4	1956,9	2075,0	1636,4
Oxygen-containing compounds	147,7	116,3	103,8	42,0	97,0	134,8	61,4	130,2	121,7
Sulfur-containing comp.	164,4	202,1	139,9	201,4	191,9	228,8	232,4	250,6	254,8
Terpenes	573,3	604,4	464,4	433,5	585,1	490,8	770,5	783,6	919,7
Heterogroups	403,4	325,6	75,7	221,6	297,4	163,4	805,7	181,4	176,3

En el Anejo D se exponen los resultados de la cuantificación para cada uno de ellos puntos y compuestos detectados en alguna de las muestras. Así pueden aparecer niveles de compuestos no detectados en algunas de las muestras, que igualmente se presentan en la tabla, dado que el compuesto si se encuentra con niveles detectables en alguna de las muestras restantes.



4 Discusión de resultados

4.1 Comentarios generales del enfoque del estudio

Acorde con los objetivos planteados, el presente estudio persigue estudiar las potenciales afectaciones en la población que puedan causar la presencia de ciertas actividades en la zona. Este estudio se enfoca en dos aspectos, un primer aspecto ligado a potenciales efectos de toxicidad derivados de la exposición a compuestos químicos y un segundo aspecto ligado a las molestias o impactos que se pueden causar debido a la presencia de olores procedentes de estas mismas actividades.

En lo que se refiere a la potencial toxicidad de los compuestos medidos, a pesar de que no se conoce o no se han publicado referencias para todos los compuestos detectados, se puede establecer que existe un amplio margen de seguridad entre los niveles detectados (orden de $\mu\text{g}/\text{m}^3$) y las referencias existentes en relación a los límites de exposición recomendados (orden de mg/m^3). Debe de considerarse que los niveles medidos corresponden a valores promedio de periodos de exposición de 7 o 15 días y en consecuencia no permiten identificar o dimensionar picos en los niveles de exposición que puedan suponer potenciales afectaciones a la salud de las personas expuestas, si bien se considera una opción muy poco probable.

En cuanto a las potenciales afectaciones por olores, el enfoque del estudio no se considera el más adecuado para determinar potenciales afectaciones a nivel de olor. Actualmente existen a nivel europeo normas estandarizadas que establecen metodologías específicas para la determinación de potenciales impactos por olores. Así la investigación de potenciales afectaciones por olores a partir de un estudio de identificación y cuantificación a nivel molecular presenta importantes deficiencias. En este sentido se considera que para el estudio directo de potenciales afectaciones por olores en las zonas de estudio la aplicación de la metodología establecida mediante la norma UNE-EN 16841-1:2017 para la determinación de olor en aire ambiente utilizando inspección en campo. Parte 1: Método en rejilla permitiría determinar potenciales impactos en la zona.

A pesar de ello, tal y como se expone más adelante, algunos de ellos niveles de H_2S detectados si podrían ser detectables como olor y en consecuencia podrían ser indicativos de la presencia de olores, si bien la falta de información respecto a la intensidad del olor y frecuencia no permiten determinar el potencial grado de afectación o impacto.

Las molestias por olor pueden desarrollarse después de un largo periodo de exposición intermitente a olores que causan una percepción negativa por el receptor afectado.

El criterio utilizado en el presente estudio ha sido desarrollado en base a estudios epidemiológicos realizados en Europa, con el fin de identificar el nivel a largo plazo de exposición que es probable que cause molestias por olores. De tal modo, los contornos de impacto representan la exposición asociada con las operaciones día a día de la planta objeto de estudio.

4.2 Zona Son Reus

4.2.1 Niveles de H_2S , NH_3 y Formaldehído en entornos de Son Reus

En relación con los niveles detectados para los tres compuestos, debe de destacarse que los niveles detectados para todos los puntos estudiados se presentan muy por debajo de los límites VLA-ED (Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria). Estos valores VLA-ED, es el valor de referencia para la Exposición Diaria (ED). De esta manera los VLA-ED representan condiciones a las cuales se cree, basándose en los conocimientos actuales, que la mayoría de los trabajadores pueden estar expuestos 8 horas diarias y 40 horas semanales durante toda su vida laboral, sin sufrir efectos adversos para su salud.



Tabla 8. Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria (VLA-ED), para NH₃, Formaldehído i H₂S

Compuesto	VLA-ED	
	(ppm)	(mg/m ³)
Formaldehído	0,3	0,37
NH ₃	20	14
H ₂ S	5	7

En lo que se refiere a los niveles de amoníaco medidos en los puntos de la zona de Son Reus se puede observar que los niveles detectados en los puntos SR-1, SR-2, SR-5 y SR-4 se presentan bastante superiores a los niveles detectados en el punto SR-14 (Blanco), con niveles de entre 7 y 5 veces superiores. Dichos niveles coinciden con ubicaciones próximas a los focos potenciales de Planta de Compostaje y metanización y planta de Secado Solar. Para el resto de puntos los niveles se presentan ya con una distribución de niveles más variables y de difícil correlación con la posición relativa respecto a los focos potencialmente emisores. Mención a parte debe de realizarse respecto a los niveles medidos en el punto SR-15, correspondiente a un punto interior de una vivienda de la zona. Para este punto el nivel de amoníaco, a pesar de mantenerse muy por debajo de los límites VLA-ED, si presenta unos niveles muy superiores al resto de puntos, con niveles de hasta 12 veces superiores al nivel detectado en el punto SR-14 (Blanco).

En líneas generales se puede observar un incremento generalizado de los niveles de NH₃ y H₂S en la zona de Son Reus respecto a los niveles medidos en la zona de Porto Pí.

En lo que se refiere a los niveles de Formaldehído, la variabilidad de los niveles para los puntos exteriores se presenta bastante reducida, con niveles que van des de los 0,140 µg/m³ (SR-7) a los 0,213 (SR-2). Para el punto SR-15, los niveles de Formaldehído detectados, al igual que con los niveles de NH₃, se presentan muy superiores al resto de puntos (puntos exteriores), alcanzando niveles de hasta 1,231 µg/m³ (Nivel hasta 8,2 veces superior al detectado en el punto SR-14 "Blanco").

En lo que se refiere a los niveles de H₂S, la variabilidad d ellos niveles se presenta muy baja y próxima al 15% de incertidumbre de medición. Al mismo tiempo para los niveles medidos no se aprecia correlación respecto a la posición de los centros de tratamiento de residuos. Los niveles más elevados se detectan para el punto SR-6 con un nivel de hasta 0,630 µg/m³, al que le corresponde aproximadamente un incremento del 85% respecto al nivel "Blanco". Para el resto de puntos las variabilidades respecto al blanco se quedan por debajo del 30%. Considerando una incertidumbre de análisis de hasta +/- el 15%, no se consideran significativas las variaciones observadas.

A pesar de que los niveles no presentan una distribución que se pueda correlacionar con su ubicación geográfica relativa a las instalaciones de tratamiento de residuos, los niveles de H₂S detectados si se consideran relevantes ya que se presentan entre 0,5 y 1 veces el nivel de detección por olor de este compuesto (fijado por algunas referencias bibliográficas entorno a las 0,4 ppb). Considerando que los resultados obtenidos resultan representativos de un periodo de 15 días, muy probablemente se hayan dado episodios puntuales con niveles de H₂S potencialmente molestos a nivel de olor.

En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para NH₃ y Formaldehído, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.

Dado que no parece existir correlación de los niveles detectados con su ubicación geográfica relativa a las instalaciones de tratamiento de residuos, se considera de forma totalmente hipotética una potencial correlación de los niveles detectados con los diferentes elementos de la red de alcantarillado.



4.2.2 Niveles de COV's en entornos de Son Reus

Un análisis global de los resultados de COV's en la zona de Son Reus permite establecer el grupo de los hidrocarburos alifáticos, los compuestos aromáticos, los ácidos orgánicos, las cetonas y los terpenos como los grupos con niveles más elevados. Al mismo tiempo se puede observar cierta tendencia a mayores concentraciones de COV's para aquellos puntos más próximos a las plantas de tratamiento de residuos. Para la mayoría de grupos se pueden observar incrementos ligeros en el promedio de puntos más próximos a los centros de tratamiento de residuos (SR-1, SR-2 y SR-3), respecto a un grupo de puntos de medición ligeramente más alejados (SR-4, SR-5 y SR-6), a un tercer grupo de puntos más alejados (SR-7 a SR-13) y respecto al punto SR-14 (Blanco). Únicamente para el grupo de compuestos clasificados como Hidrocarburos cíclicos y para las Aminas, estos incrementos entre el promedio de niveles correspondientes a los puntos más próximos y los niveles de referencia "Blanco" de SR-14, alcanzan valores que se presentan en torno a 4 veces mayores, ver Tabla 9, Figura 14 y Figura 15.

En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para los diferentes COV, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.

Tabla 9. Tabla resumen de niveles de COV's para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Son Reus.

Familia Compuestos ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	SR-1-3	SR-4-6	SR-7-13	SR-14 (Blanco)	SR 15 (Vivienda)
Aliphatic Hydrocarbons	583,2	430,4	229,8	251,1	1.640,0
Aromatic compounds	980,7	1.256,8	635,9	772,2	2.086,8
Organic Acids	8.766,7	6.479,0	3.799,6	5.415,4	5.529,1
Ketones	7,6	10,0	1,3	7,3	0,3
Terpenes	14,0	7,6	2,9	10,5	473,3
Aldehydes	3.303,3	2.913,9	2.100,4	2.245,7	2.128,6
Cyclic Hydrocarbons	1.246,6	516,6	291,8	333,4	841,2
Halogen-containing comp.	237,0	175,1	124,3	85,5	727,2
Nitrogen-containing comp.	387,4	289,3	140,3	221,7	1.106,5
Alcohols	108,1	126,7	55,3	62,0	267,3
Ethers	521,3	508,3	285,1	289,1	489,0
Sulfur-containing comp.	1.640,1	1.788,0	886,5	1.001,6	1.668,0
Heterogroups	113,3	84,0	74,6	89,6	109,4
Esters	3,5	2,3	0,5	1,0	3,3
Lactones	504,2	383,6	256,6	356,8	274,9
Furans	1.849,3	1.869,5	1.026,3	1.243,6	1.217,2
Oxygen-containing comp.	91,2	91,7	25,8	40,8	511,9
Aromatic Alcohol	278,1	251,4	117,4	135,5	112,4
Amines	2.135,5	1.427,7	559,8	493,9	2.319,9
Mercaptans	323,3	172,9	96,0	77,3	361,5

Los niveles obtenidos para la muestra SR-15, correspondiente al interior de una vivienda, muestran niveles diferenciados al resto de puntos. Este echo puede venir muy influenciado por tratarse de un aire interior y por la potencial presencia de elementos constructivos o de consumo existentes en la vivienda.



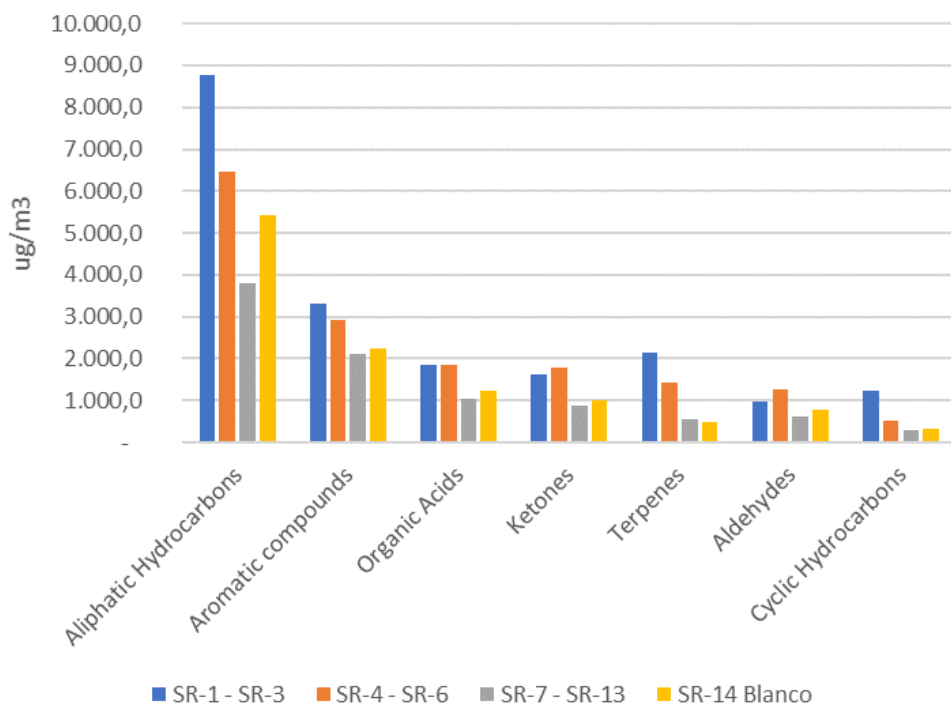


Figura 14 Representación de niveles de COV's (µg/m³) para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Son Reus (1).

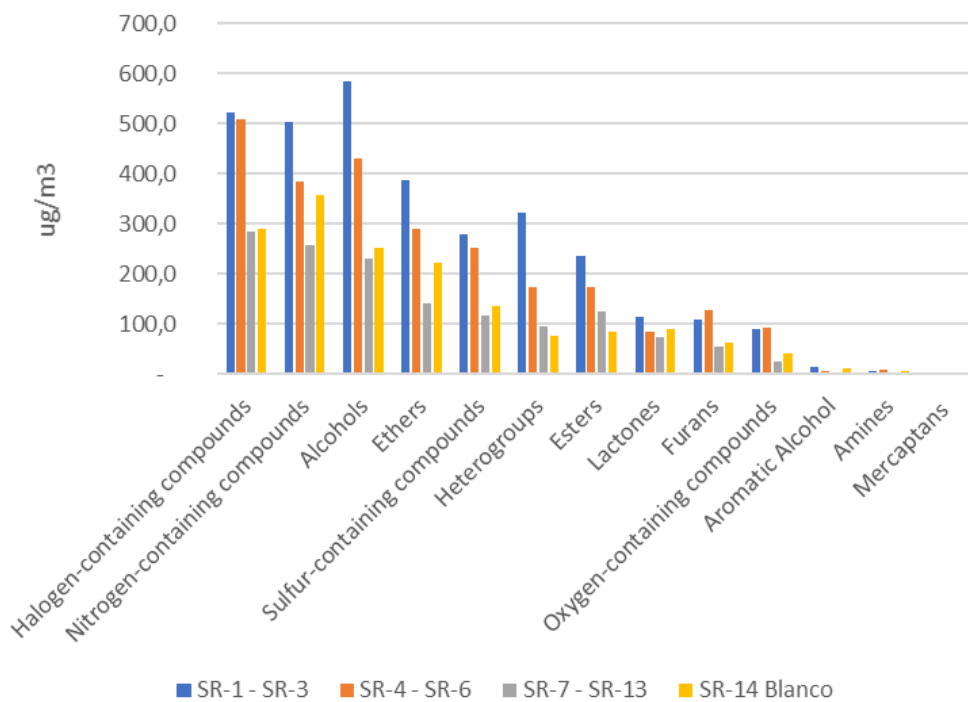


Figura 15 Representación de niveles de COV's (µg/m³) para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Son Reus (2).



4.3 Zona Porto Pí

4.3.1 Niveles de H₂S, NH₃ y Formaldehído en entornos de Porto Pí

En relación con los niveles detectados para los tres compuestos, debe de destacarse que los niveles detectados para todos los puntos estudiados, ver Tabla 4, se presentan muy por debajo de los límites VLA-ED (Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria). Estos valores VLA-ED, es el valor de referencia para la Exposición Diaria (ED). De esta manera los VLA-ED representan condiciones a las cuales se cree, basándose en los conocimientos actuales, que la mayoría de los trabajadores pueden estar expuestos 8 horas diarias y 40 horas semanales durante toda su vida laboral, sin sufrir efectos adversos para su salud, ver Tabla 8. Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria (VLA-ED), para NH₃, Formaldehído i H₂S.

En lo que se refiere a los niveles de Formaldehído, estos se presentan equivalentes a los obtenidos por la zona de Son Reus y no se parecía correlación de los niveles medidos con la distancia de los puntos respecto a las instalaciones de CLH.

En lo que hace referencia a los niveles de H₂S y NH₃, los niveles obtenidos en la zona de Porto Pí, en global se presentan inferiores a los obtenidos para la zona de Son Reus y tampoco puede establecerse correlación con la presencia de CLH en la zona.

En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para NH₃, H₂S y formaldehído, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.

4.3.2 Niveles de COV's en entornos de Porto Pí

Un análisis global de los resultados de COV's en la zona de Son Reus permite establecer el grupo de los ácidos orgánicos, los aldehídos, los compuestos azufrados, los furanos, los compuestos aromáticos y los hidrocarburos cíclicos como los grupos con niveles más elevados. En lo que se refiere a la distribución geográfica de los niveles de compuestos se aprecia bastante uniformidad en toda la zona, probablemente debido a que la zona de distribución de puntos en Porto Pí resulta más reducida que la de la zona de Son Reus, ver Tabla 10, Figura 16 y Figura 17.

En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para los diferentes COV, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.

Tabla 10. Tabla resumen de niveles de COV's para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Porto Pí.

Familia Compuestos (µg/m ³)	PPI-1-3	PPI-4-8	PPI9
Organic Acids	9489,6	9869,1	7739,7
Amines	547,4	612,7	919,7
Aldehydes	3430,6	3560,3	2864,9
Cyclic Hydrocarbons	1785,6	987,6	748,4
Furans	1381,1	1684,2	1636,4
Sulfur-containing compounds	1092,1	1580,6	1769,1
Aromatic compounds	850,8	1243,9	1208,0
Aliphatic Hydrocarbons	664,5	595,7	565,5
Nitrogen-containing compounds	339,8	431,1	209,7



Lactones	681,8	520,9	684,4
Ethers	480,0	468,2	448,7
Mercaptans	268,2	333,9	176,3
Aromatic Alcohol	168,8	221,0	254,8
Halogen-containing compounds	169,6	258,4	195,4
Heterogroups	72,4	84,6	62,2
Alcohols	79,9	122,0	135,7
Oxygen-containing compounds	122,6	93,1	121,7
Terpenes	0,4	12,9	45,3
Ketones	3,6	7,2	7,6
Esters	3,0	3,3	5,6

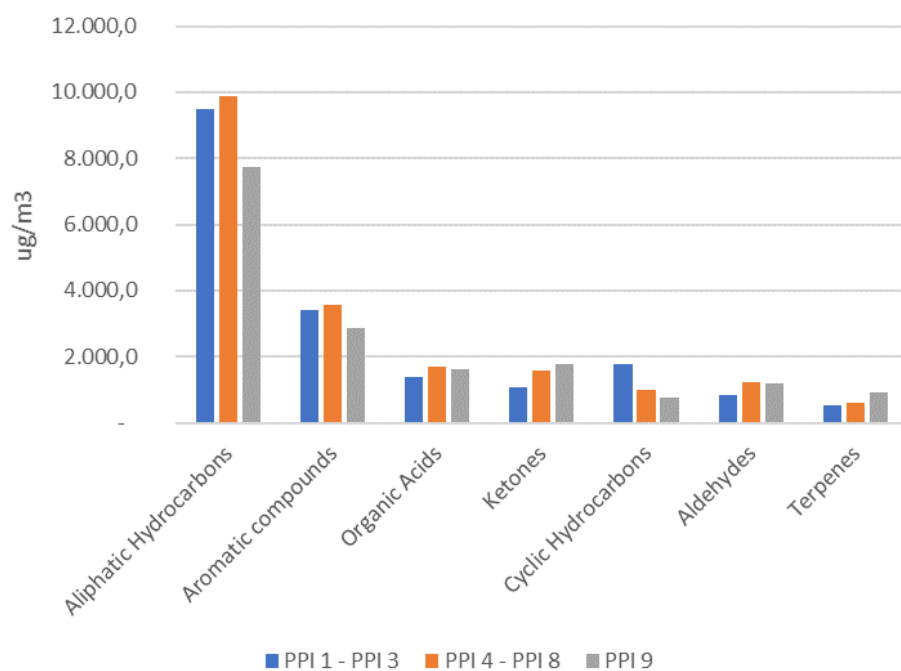


Figura 16 Representación de niveles de COV's (µg/m³ para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Porto Pi (1).



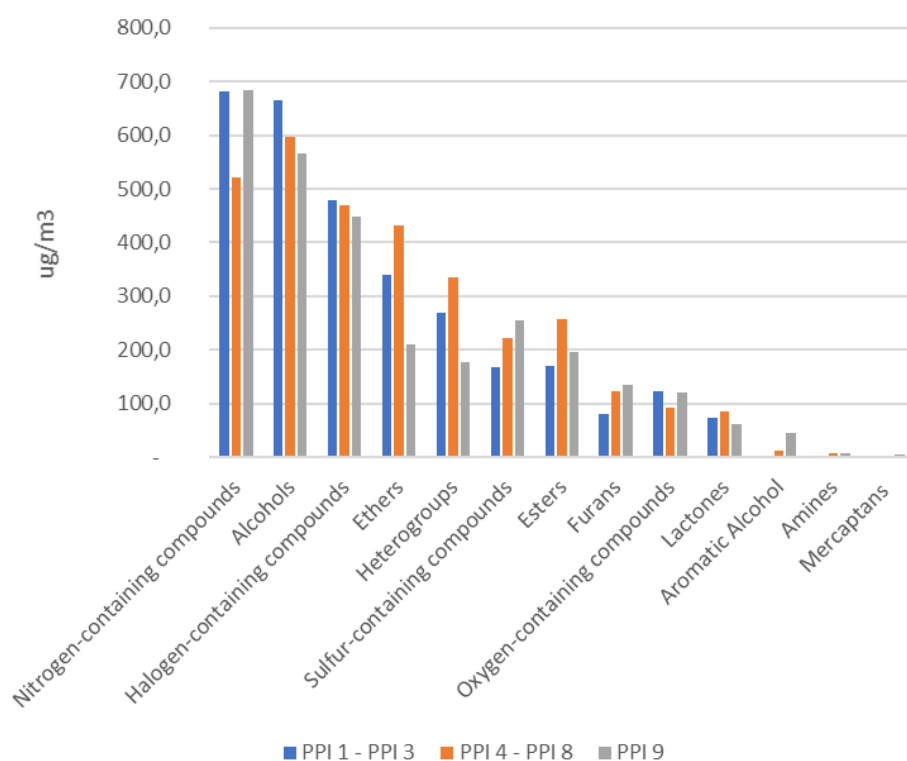


Figura 17 Representación de niveles de COV's (µg/m³ para grupos de compuestos y grupos de muestras de la zona de Porto Pi (2).



5 Conclusiones

El estudio realizado conduce a las siguientes conclusiones:

1. Con relación a la determinación de potenciales efectos nocivos para la salud debidos a la exposición a los compuestos medidos se considera que:
 - a. En relación con los niveles detectados para el conjunto de puntos de medición , los niveles de NH_3 , H_2S y Formaldehído, se presentan muy por debajo de los límites VLA-ED (Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria). Estos valores VLA-ED, es el valor de referencia para la Exposición Diaria (ED). De esta manera los VLA-ED representan condiciones a las cuales se cree, basándose en los conocimientos actuales, que la mayoría de los trabajadores pueden estar expuestos 8 horas diarias y 40 horas semanales durante toda su vida laboral, sin sufrir efectos adversos para su salud.
 - b. En relación con los niveles detectados para el conjunto de puntos de medición, a pesar de que no se dispone de referencias de límites de toxicidad para la totalidad de los compuestos detectados, los niveles de los diferentes COV's medidos se presentan muy por debajo de los límites VLA-ED (Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria) disponibles y nada parece indicar que los niveles de exposición puedan conllevar efectos nocivos para la salud.
2. En lo que se refiere a la presencia de potenciales impactos por olores en las zonas de estudio se considera que:
 - a. El enfoque del estudio no se considera el más adecuado para determinar potenciales afectaciones a nivel de olor.
 - b. Actualmente existen a nivel europeo normas estandarizadas que establecen metodologías específicas para la determinación de potenciales impactos por olores. Así la investigación de potenciales afectaciones por olores a partir de un estudio de identificación y cuantificación a nivel molecular presenta importantes deficiencias.
 - c. Se considera que para el estudio directo de potenciales afectaciones por olores en las zonas de estudio la aplicación de la metodología establecida mediante la norma UNE-EN 16841-1:2017 para la determinación de olor en aire ambiente utilizando inspección en campo. Parte 1: Método en rejilla permitiría determinar potenciales impactos en la zona.
3. En relación a los niveles de compuestos detectados y la potencial correlación con los focos potenciales inicialmente detectados se establece que:
 - a. Para la zona de Son Reus se observa que los niveles de amoniaco detectados en los puntos SR-1, SR-2, SR-5 y SR-4, puntos más próximos a los focos potenciales inicialmente identificados, se presentan bastante superiores a los niveles detectados en el punto SR-14 (Blanco).
 - b. Para el resto de puntos en la Zona de Son Reus, los niveles de amoniaco se presentan ya con una distribución de niveles más variables y de difícil correlación con la posición relativa respecto a los focos potencialmente emisores.
 - c. Los niveles medidos en el punto SR-15, correspondiente a un punto interior de una vivienda de la zona. Para este punto el nivel de amoniaco, a pesar de mantenerse muy por debajo de los límites VLA-ED, si presenta unos niveles muy superiores al resto de puntos, con niveles de hasta 12 veces superiores al nivel detectado en el punto SR-14 (Blanco).
 - d. Para los niveles de H_2S medidos tanto en la zona de Son Reus como en la Zona de Porto Pi no se aprecia correlación respecto a la posición de los centros de tratamiento de residuos o de la planta de almacenamiento de hidrocarburos.



- e. En líneas generales se puede observar un incremento generalizado de los niveles de NH_3 y H_2S en la zona de Son Reus respecto a los niveles medidos en la zona de Porto Pí.
- f. En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para NH_3 y Formaldehído, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.
- g. En lo que se refiere a los niveles promedio a lo largo de los periodos de exposición observados para los diferentes COV, estos no permiten determinar o discriminar si de forma individual y en picos de exposición pueden llegar a ser detectables a nivel de olor.



Anexo A Certificados de análisis

En formato digital se adjuntan los boletines de análisis correspondientes a NH_3 , H_2S y Formaldehído y resultados de los niveles de COV detectados para cada uno de los puntos medidos.





Anexo B Listado de compuestos solicitados

- | | |
|----------------------------|-------------------------|
| • NH ₃ | • salicilaldehído |
| • H ₂ S | • alcohol bencílico |
| • formaldehído | • m-propiltolueno |
| • isopreno | • o-propiltolueno |
| • metilvinilcetona | • p-propiltolueno |
| • metilsulfuran | • acetofenona |
| • 2-hexenal | • nonanal |
| • hexilalcohol | • ácido benzoico |
| • a-pineno | • acetaldehído |
| • b-pineno | • propanal |
| • valerolactona | • butanal |
| • m-cimeno | • pentanal |
| • o-cimeno | • hexanal |
| • limoneno | • heptanal |
| • sabinaketona | • octanal |
| • hexano | • nonanal |
| • heptano | • isobutanal |
| • octano | • acetona |
| • nonano | • 2-butanona |
| • decano | • 2-pentanona |
| • undecano | • ciclohexanona |
| • dodecano | • 5-hidroxi-2-pentanona |
| • n-propilacetato | • benzaldehído |
| • butilacetato | • o-tolualdehído |
| • 1-metoxi-2-propilacetato | • 2-hidroxibenzaldehído |
| • benceno | • ácido pinónico |
| • tolueno | • glioxal |
| • m,p-xileno | • 2,5-hexanodiana |
| • estireno | • metacroleína |
| • metoxibenceno | |
| • propilbenceno | |
| • benzaldehído | |
| • 4-etiltolueno | |
| • 1,3,5-trimetilbenceno | |
| • 1,2,4-trimetilbenceno | |
| • benzonitrilo | |
| • fenol | |
| • indano | |



Anexo C Resultados de cuantificación de COV's para puntos de medición en la zona de Son Reus

Compound	CAS No.	SR 1	SR 2	SR 3	SR 4	µg/m³										SR 14	SR 15
						SR 5	SR 6	SR 7	SR 8	SR 9	SR 11	SR 12	SR 13				
Alcohols																	
Methyl Alcohol (*)	67-56-1	66,7	67,1	75,4	53,7	101,2	77,3	26,5	30,8	1,2	23,5	21,2	28,5	29,2	26,4		
Ethanol	64-17-5	95,3	73,2	185,7	66,1	94,1	76,2	36,2	39,7	1,7	55,2	51,8	45,5	55,8	90,0		
Isopropyl Alcohol	67-63-0	15,6	16,3	16,8	12,2	13,1	13,8	5,8	5,8	5,2	7,2	7,4	8,9	8,0	65,4		
2-Propanol, 2-methyl-	75-65-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	3,5	1,0	0,0	5,6	0,0	0,0	0,0		
1-Propanol	71-23-8	5,9	7,4	11,3	4,8	11,2	6,5	2,5	9,1	4,9	2,2	2,3	2,3	7,2	8,7		
Propylene Glycol	57-55-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
1-Propanol, 2-methyl-	78-83-1	3,5	4,0	0,0	0,0	0,0	4,9	1,6	3,3	0,0	3,4	4,0	8,4	3,4	142,3		
1-Butanol	71-36-3	41,2	24,3	90,1	30,3	36,0	37,4	17,1	23,8	12,6	23,1	32,8	18,3	25,7	326,0		
2-Butanol	78-92-2	0,0	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
2-Pentanol	6032-29-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
4-Methyl-1,6-heptadien-4-ol	25201-40-5	0,0	0,0	126,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
Propargyl alcohol	107-19-7	9,1	15,4	117,3	0,0	18,9	0,0	1,1	9,1	0,0	0,0	0,0	0,0	9,7	0,0		
Cyclobutanol, 2-ethyl-	35301-43-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	28,5	43,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
2-Undecen-4-ol	22381-86-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0		
3-Butyn-2-ol	2028-63-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
1-Hexanol	111-27-3	161,7	204,6	301,6	176,2	191,4	246,3	97,6	109,9	82,9	96,2	138,4	166,9	108,9	138,8		
3-Octyn-2-ol	41746-22-9	0,0	0,0	2,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0		
7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene-	543-39-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0		
3-Butyn-2-ol, 2-methyl-	115-19-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0		
4-Allyl-1,6-heptadiene-4-ol	10202-75-2	0,0	2,4	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	1,6	0,0	1,3	0,0	1,7	0,0		



1-Heptanol	111-70-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	59,2
2,3,4-Trimethyl-1-pentanol	6570-88-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propen-1-ol	107-18-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexanol, 2-ethyl-	104-76-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	586,2
2,3,4-Trimethyl-5-hexen-3-ol	28638-29-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Buten-2-ol	598-32-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Buten-1-ol, (Z)-	4088-60-2	0,0	0,0	0,0	5,6	6,3	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexyn-3-ol	105-31-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclobutanediol, 2,2,4,4-tetramethyl-	3010-96-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,6	0,0	0,0
1-Nonanol	143-08-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	42,8
Levomenthol	2216-51-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	153,7

Aldehydes

Acetaldehyde (*)	75-07-0	121,5	146,2	188,2	131,0	142,9	147,1	102,7	104,6	7,2	88,5	91,0	100,1	102,4	216,7
2-Propenal	107-02-8	12,8	21,1	0,0	11,5	14,0	14,6	5,9	7,4	0,4	8,8	9,0	14,2	6,8	27,3
Propanal	123-38-6	47,4	63,7	79,2	67,2	68,2	69,6	38,8	41,0	1,8	33,3	31,7	37,6	36,4	127,6
Propanal, 2-methyl-	78-84-2	13,4	0,0	0,0	0,0	14,3	18,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8	0,0
Methacrolein	78-85-3	9,5	12,8	10,0	9,1	9,5	3,5	4,8	8,3	9,2	6,3	5,0	1,9	6,5	16,7
Butanal	123-72-8	111,4	122,4	105,7	130,8	145,3	156,9	82,2	88,9	68,7	79,3	83,7	80,5	96,6	144,7
Pentanal	110-62-3	96,5	105,3	0,0	151,2	150,7	139,6	76,4	78,8	45,1	58,2	43,6	69,8	71,3	241,3
Hexanal, 3-methyl-	19269-28-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butenal, 2-methyl-	1115-11-3	12,9	18,6	11,0	15,8	21,8	16,1	8,8	0,0	0,0	0,0	0,0	12,4	9,0	19,0
Hexanal	66-25-1	0,0	60,9	158,2	87,1	128,3	116,1	59,2	61,9	0,0	0,0	0,0	34,2	64,3	184,7
2-Butenal, (Z)-	15798-64-8	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pent-2-ynal	55136-52-2	0,0	0,0	5,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptanal	111-71-7	84,9	73,5	68,7	111,9	91,5	102,6	62,6	64,1	41,8	36,5	35,8	44,1	53,7	167,7
2-Heptenal, 2-methyl-	30567-26-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexanal, 2-ethyl-	123-05-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	209,7
2-Butenal, (E)-	123-73-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde	100-52-7	219,6	332,8	223,4	260,2	233,2	302,2	157,3	172,2	136,6	181,1	176,0	211,5	170,8	475,7



Benzeneacetaldehyde, a-methyl-	93-53-8	14,5	0,0	0,0	18,7	0,0	8,6	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	5,6	0,0
Octanal	124-13-0	56,2	86,1	54,2	112,7	105,5	133,3	76,9	76,0	52,7	44,0	58,2	63,2	69,3	150,1
Cyclopentanecarboxaldehyde	872-53-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 2-methyl-	529-20-4	29,4	22,0	13,3	16,9	19,9	18,9	14,7	10,3	9,9	9,1	11,0	8,2	11,8	10,4
Nonanal	124-19-6	0,0	70,1	59,5	66,8	67,4	112,5	69,4	46,3	34,0	26,4	45,5	44,0	58,9	95,0

Aliphatic Hydrocarbons

Propene	115-07-1	68,1	96,3	66,4	77,6	87,1	81,6	50,7	45,9	45,3	44,6	51,7	58,0	64,7	45,3
Ethane	74-84-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allene	463-49-0	0,1	0,3	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,1	0,0	0,0	0,1	0,1	0,1	0,0
Isobutane	75-28-5	6,7	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,9	0,2	3,9	4,1	2,5	2,5	3,4
1-Propene, 2-methyl-	115-11-7	194,0	223,1	345,8	185,3	181,1	187,1	118,9	111,6	8,0	98,7	129,9	119,4	97,2	127,2
1,3-Butadiene	106-99-0	8,3	9,3	5,9	2,8	5,7	3,9	2,8	2,7	0,2	2,0	2,3	2,9	3,1	2,9
2-Butene	107-01-7	23,8	20,9	17,9	19,2	21,9	20,1	11,3	9,4	0,6	7,3	9,2	9,3	11,2	6,2
1-Butene, 3-methyl-	563-45-1	4,5	4,8	4,3	3,6	4,0	3,9	2,1	1,9	0,0	2,1	2,1	2,2	2,0	2,0
Butane, 2-methyl-	78-78-4	421,7	212,9	481,7	204,9	353,6	199,1	139,6	121,0	5,7	211,2	210,8	126,8	146,2	292,2
1,4-Pentadiene	591-93-5	0,4	0,8	0,7	0,6	0,9	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0
Pentane	109-66-0	338,5	226,1	451,5	214,0	305,6	175,4	139,1	124,2	4,7	166,4	152,2	123,0	125,2	158,7
2-Methyl-1-butene	563-46-2	32,2	53,7	73,9	50,7	32,9	28,0	15,8	34,2	1,0	0,0	16,3	20,4	24,8	0,0
2-Pentene, (Z)-	627-20-3	45,0	50,1	98,4	39,3	47,7	46,2	24,6	23,5	1,1	26,4	29,6	23,1	31,1	24,8
2-Pentene, (E)-	646-04-8	55,8	48,8	210,7	40,9	37,2	47,4	22,7	18,7	1,0	32,2	36,0	20,6	29,8	30,3
Butane, 2,2-dimethyl-	75-83-2	38,9	67,2	308,3	35,2	43,2	59,7	28,6	17,9	1,4	56,7	84,3	31,3	54,9	73,5
1,3-Pentadiene, (E)-	2004-70-8	6,7	11,0	6,9	4,7	10,1	13,1	5,4	0,0	0,7	4,9	5,5	6,2	6,5	2,7
Pentane, 3-methylene-	760-21-4	4,2	5,1	11,7	4,3	5,0	5,0	2,0	2,0	1,8	2,0	2,2	2,4	2,5	0,0
Butane, 2,3-dimethyl-	79-29-8	0,0	0,0	193,7	0,0	0,0	0,0	0,0	16,0	6,8	33,1	46,5	14,7	0,0	0,0
Pentane, 2-methyl-	107-83-5	175,0	222,2	579,0	142,1	149,1	217,1	117,8	127,1	73,5	200,8	246,1	125,2	161,2	379,5
2-Pentene, 4-methyl-	4461-48-7	11,1	13,9	29,3	3,9	11,3	12,5	0,0	8,7	2,7	8,5	0,0	6,7	5,1	13,1
Pentane, 3-methyl-	96-14-0	122,8	138,5	465,6	104,5	116,2	133,1	69,8	74,4	49,6	120,7	156,7	74,2	99,2	246,9
1,5-Hexadiene	592-42-7	0,0	1,1	9,8	1,5	2,5	1,5	0,5	0,6	0,4	0,3	0,2	1,2	0,0	0,0
1-Hexene	592-41-6	161,7	204,6	301,6	176,2	191,4	246,3	97,6	109,9	82,9	105,4	104,1	166,9	108,9	0,0



n-Hexane	110-54-3	121,4	136,8	444,2	109,2	119,5	127,8	70,2	67,8	51,9	96,3	109,9	68,1	79,9	264,2
1-Pentene, 3-methyl-	760-20-3	41,2	29,8	87,3	39,5	43,3	46,4	14,4	0,0	10,4	7,0	6,7	17,4	0,0	36,3
2-Hexene	592-43-8	47,9	54,4	284,2	39,3	49,0	52,0	25,2	23,3	21,2	30,0	33,2	32,5	32,2	46,2
Cyclopropane, 1,1,2-trimethyl-	4127-45-1	7,2	8,8	160,2	3,1	4,2	8,2	3,2	5,6	0,0	11,5	10,9	3,7	4,8	23,8
1-Pentene, 4,4-dimethyl-	762-62-9	26,0	0,0	122,4	1,0	12,0	1,1	0,6	11,7	0,0	0,0	20,3	0,4	0,0	16,5
3-Hexene, (E)-	13269-52-8	28,0	30,0	52,6	24,0	29,1	27,2	14,6	13,0	13,3	14,6	18,2	15,7	18,1	15,8
(Z),(Z)-2,4-Hexadiene	6108-61-8	7,0	7,2	35,3	6,1	7,3	8,7	3,5	3,3	3,1	3,5	3,1	3,3	4,6	2,6
1-Butyne, 3-methyl-	598-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pentene, 3-methyl-, (E)-	616-12-6	22,6	20,1	131,9	14,2	0,0	19,8	11,3	8,3	10,4	15,9	19,7	8,2	16,0	17,0
Pentane, 2,2-dimethyl-	590-35-2	5,4	7,6	0,0	2,4	6,8	7,4	2,2	3,3	3,7	3,0	10,1	3,1	3,3	0,0
3-Hexyne	928-49-4	0,0	2,9	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2-Butadiene	590-19-2	9,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butene, 3,3-dimethyl-	558-37-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Hexadiene	592-45-0	1,5	0,0	6,1	1,3	1,6	0,0	0,6	0,5	0,7	0,4	0,2	0,7	0,4	0,5
1,3-Pentadiene, 2-methyl-, (E)-	926-54-5	6,9	7,5	10,1	5,7	5,7	5,5	3,1	3,4	2,2	7,2	0,9	3,1	2,2	4,7
Pentane, 3,3-dimethyl-	562-49-2	0,0	5,4	45,9	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0	3,3	0,0	7,0	5,6	3,3	0,0
1-Pentene, 3,3-dimethyl-	3404-73-7	0,0	3,9	1,7	1,1	1,4	2,3	0,0	0,0	0,6	0,5	0,8	0,8	0,9	1,8
Hexane, 2-methyl-	591-76-4	108,0	117,9	537,4	71,1	91,4	104,9	53,4	54,7	47,2	91,6	112,4	56,4	71,1	170,5
Pentane, 2,3-dimethyl-	565-59-3	24,0	22,3	429,5	22,2	27,3	30,8	21,2	14,4	0,0	19,9	0,0	10,6	0,0	76,5
Hexane, 3-methyl-	589-34-4	129,4	138,6	470,4	87,7	106,6	127,2	68,4	65,9	10,0	105,8	134,7	64,0	86,1	170,7
1,4-Hexadiene, 4-methyl-	1116-90-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Hexadiyne	628-16-0	0,0	0,0	51,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentane, 2,2,4-trimethyl-	540-84-1	140,5	149,0	408,9	107,4	133,5	135,3	85,2	115,6	119,1	170,9	172,6	95,4	167,0	212,8
1-Pentene, 2,4-dimethyl-	2213-32-3	0,0	16,6	0,0	0,0	14,1	22,5	0,0	9,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Heptene	592-76-7	149,4	178,3	3,0	204,4	176,2	185,4	98,6	138,3	103,7	86,8	0,0	144,6	98,6	3,3
Heptane	142-82-5	120,7	128,7	470,4	87,2	101,1	119,1	71,5	65,9	50,2	87,1	107,1	64,6	77,3	170,7
3-Heptene	592-78-9	12,6	69,7	26,1	49,6	0,0	4,9	39,7	0,0	7,5	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0
2-Heptene	592-77-8	5,7	23,5	27,7	0,0	0,0	4,7	2,7	1,2	3,7	3,5	4,2	2,1	3,8	0,0
2-Heptene, (E)-	14686-13-6	41,0	42,6	62,8	35,9	42,3	35,7	20,8	19,5	27,4	21,7	21,8	18,5	22,0	16,7
3-Heptene, (E)-	14686-14-7	0,0	14,7	0,0	0,0	0,0	0,0	2,9	2,4	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



(Z)-3-Heptene	2097503	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentene, 2,4,4-trimethyl-	107-39-1	11,8	11,5	16,3	10,8	11,6	12,1	4,8	5,1	0,0	6,0	5,3	5,4	8,0	0,0
2-Butene, (E)-	624-64-6	73,0	68,2	64,9	63,7	0,0	69,2	32,5	37,9	22,1	27,0	0,0	32,9	33,5	158,9
1-Hexyne, 5-methyl-	2203-80-7	2,9	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,5-dimethyl-	592-13-2	0,0	16,9	69,7	9,2	10,2	0,0	6,0	6,9	0,0	18,5	15,4	7,0	9,8	0,0
Hexane, 2,4-dimethyl-	589-43-5	16,0	1,0	170,0	0,0	0,0	0,0	8,3	0,0	10,2	16,5	24,4	9,9	14,7	49,8
1,4-Heptadiene	5675-22-9	5,7	3,8	0,0	4,1	3,9	4,2	1,9	0,0	1,7	1,2	1,6	0,0	2,0	0,0
Hexane, 3,3-dimethyl-	563-16-6	0,0	0,0	3,1	0,0	0,4	0,0	0,0	1,1	0,1	1,0	0,0	0,0	0,0	37,2
2-Pentyne, 4,4-dimethyl-	999-78-0	0,0	0,0	0,0	1,2	1,3	0,0	0,7	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Heptyne	1119-65-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentane, 2,3,4-trimethyl-	565-75-3	54,5	75,7	271,6	37,7	48,2	60,8	28,9	31,1	21,3	52,8	69,2	35,0	53,6	105,2
3-Hexyne, 2-methyl-	36566-80-0	44,8	56,7	145,3	43,9	39,9	41,7	25,8	38,0	27,1	49,7	67,0	30,4	52,9	76,0
Heptane, 2-methyl-	592-27-8	34,0	35,5	284,0	19,6	23,4	28,3	16,0	18,1	13,6	27,4	39,1	16,9	22,3	80,2
Heptane, 4-methyl-	589-53-7	18,4	10,0	82,8	6,7	8,7	9,7	5,1	6,4	3,7	9,8	10,3	3,9	5,3	2,7
Heptane, 3-methyl-	589-81-1	30,3	29,9	283,8	20,2	26,2	26,4	16,7	14,3	22,4	32,7	48,3	19,1	22,7	36,9
Hexane, 3-ethyl-	619-99-8	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	3,2	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Hexadiene, 2,3-dimethyl-	18669-52-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,4
1,5-Heptadien-3-yne	3511-27-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	195,7	0,0	0,0	0,0
Octane	111-65-9	93,6	77,2	288,0	82,5	53,5	67,7	44,2	28,6	38,6	47,3	48,2	47,8	36,4	74,0
Heptane, 3-methylene-	1632-16-2	0,0	0,0	24,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Octene, (E)-	14850-23-8	41,9	38,1	25,0	42,9	35,9	28,3	16,8	15,0	22,8	15,4	12,9	13,7	24,1	0,0
2-Hexene, 3,5-dimethyl-	3404-79-3	1,3	31,2	0,0	0,0	8,4	0,0	1,7	0,5	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	172,2
2-Octene	111-67-1	0,0	23,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,4	0,0	15,8	0,0
Heptane, 2,4-dimethyl-	2213-23-2	0,0	0,0	75,6	0,0	52,7	0,0	0,0	15,1	33,2	17,3	14,5	7,5	20,5	111,0
1-Octen-3-yne	17679-92-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Hexene, 3,5,5-trimethyl-	26456-76-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Heptadiene	1541-23-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
3,5-Dimethyl-3-heptene	59643-68-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Octadiene	1002-33-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,3-dimethyl-	584-94-1	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



3-Ethyl-2-hexene	620-00-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,4-Dimethyl-1-heptene	19549-87-2	60,0	33,9	0,0	37,5	46,7	37,8	22,8	22,6	15,1	20,0	19,2	17,8	15,4	0,0
1,4-Heptadiene, 3-methyl-	1603-01-6	0,0	0,0	0,0	1,8	1,5	0,0	0,9	0,6	0,9	0,0	0,0	1,1	0,9	0,0
2,3-Dimethyl-1-hexene	16746-86-4	18,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,6	0,0
3-Heptyne, 5-methyl-	61228-09-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 3-ethyl-2-methyl-	16789-46-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,3,5-trimethyl-	1069-53-0	0,0	0,0	0,0	0,0	31,4	0,0	15,8	0,0	0,0	0,0	22,6	0,0	0,0	0,0
Pentane, 3,3-diethyl-	1067-20-5	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 4-methyl-	2216-34-4	114,0	0,0	127,5	51,2	85,0	42,1	38,1	0,0	23,9	40,6	37,7	31,0	17,2	104,5
Undecane, 6-methyl-	17302-33-9	43,7	31,3	159,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,5	12,3	20,8	0,0	11,7	0,0
1,3-Butadiene, 2-methyl-	78-79-5	6,7	11,0	6,9	4,7	10,1	13,1	2,7	0,4	0,9	12,0	14,0	6,2	6,5	81,6
3-Heptene, 4-ethyl-	33933-74-3	0,0	45,5	0,0	0,0	0,0	0,0	44,0	52,1	41,0	39,0	32,4	0,0	0,0	0,0
1-Nonene	124-11-8	236,6	0,0	264,6	266,7	288,3	259,8	159,1	186,0	156,4	0,0	99,7	180,8	158,8	0,0
Nonane	111-84-2	42,4	45,6	108,6	11,9	0,0	0,0	32,6	0,0	0,0	21,5	17,0	25,1	28,4	54,1
2,3-Dimethyl-2-heptene	3074-64-4	10,4	7,8	0,0	5,3	0,0	5,6	2,4	4,6	0,0	4,3	0,0	3,6	0,0	0,0
(Z)-4-Methyl-2-hexene	3683-19-0	0,0	4,7	0,0	0,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0
Pentane, 2,2,4,4-tetramethyl-	1070-87-7	10,7	9,3	4,7	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	1,3	7,8
4-Nonene	2198-23-4	0,0	1,1	1,3	3,6	9,7	0,0	2,9	0,0	6,4	0,0	0,0	0,0	3,6	0,0
Hexane, 2,4,4-trimethyl-	16747-30-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,7-Octadiene, 2,7-dimethyl-	59840-10-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	71,1
R(-)-3,7-Dimethyl-1,6-octadiene	10281-56-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	161,4
1-Octene, 2,6-dimethyl-	6874-29-9	0,0	0,0	4,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 3-ethyl-	5881-17-4	0,0	2,4	0,0	0,0	0,0	2,4	19,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0
Nonane, 4-methyl-	17301-94-9	5,2	7,9	42,4	0,0	8,5	6,0	3,5	1,9	2,3	0,0	6,2	5,1	0,0	0,0
Nonane, 2-methyl-	871-83-0	0,0	0,0	30,1	0,0	0,0	1,0	0,7	0,0	1,5	0,0	4,8	0,8	0,0	0,0
Octane, 2,6-dimethyl-	2051-30-1	20,7	31,0	63,5	18,6	23,2	22,4	9,7	10,7	9,5	10,5	10,8	9,8	9,8	8,4
1-Decene	872-05-9	139,2	142,0	99,7	187,6	215,5	154,2	105,4	108,6	100,3	55,7	64,5	82,4	96,6	0,0
Decane	124-18-5	278,0	297,0	303,5	319,7	330,2	295,1	219,3	179,0	183,3	133,9	188,2	153,2	178,7	119,2
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	13475-82-6	69,9	0,0	70,4	83,2	46,4	61,0	41,1	28,4	22,2	0,0	29,8	24,2	36,8	100,5
2-Butene, 2-methyl-	513-35-9	0,0	0,0	0,0	0,0	3,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



4-Octene, 2,6-dimethyl-, [S-(Z)]-	62960-77-4	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	1,4	0,0	0,0	0,0
Octane, 3,3-dimethyl-	4110-44-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 3,3,4,4-tetramethyl-	5171-84-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexene, 4-methyl-	3769-23-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
Heptane, 4-ethyl-	2216-32-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 4,7-dimethyl-	17301-32-5	25,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decane, 2,6,7-trimethyl-	62108-25-2	0,0	0,0	37,1	27,1	0,0	0,0	15,3	9,2	9,3	11,0	13,8	8,0	8,5	24,5
2-Decene, 2,4-dimethyl-	74421-03-7	4,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,7	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 6-ethyl-2-methyl-	62016-19-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,4	0,0	8,0	0,0	0,0	11,6	0,0
Octane, 2,3-dimethyl-	7146-60-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Undecene	821-95-4	108,8	121,4	126,4	177,1	163,5	139,0	87,2	76,3	68,7	30,6	66,6	67,3	91,8	0,0
Undecane	1120-21-4	357,9	241,2	338,9	360,5	303,7	226,3	160,6	109,8	120,5	71,8	196,7	154,6	189,5	99,7
Octane, 2-methyl-	3221-61-2	35,2	0,0	0,0	0,0	20,7	0,0	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0	0,0	21,1
Benzene, 1-propynyl-	673-32-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4,4-Dipropylheptane	17312-72-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,1	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 3-methyl-	1002-43-3	172,8	66,7	188,9	275,9	148,1	211,4	133,9	89,5	75,2	14,5	182,0	94,4	132,1	100,8
Heptane, 4-(1-methylethyl)-	52896-87-4	2,9	0,0	0,0	4,2	2,2	1,6	2,2	0,7	0,0	0,0	1,3	0,5	0,0	0,0
1-Dodecene	112-41-4	116,3	65,9	128,5	212,5	181,5	140,0	93,3	62,0	0,0	0,0	60,6	35,8	100,7	0,0
Dodecane	112-40-3	523,0	351,8	493,9	594,4	595,4	515,9	413,6	360,7	398,7	143,4	385,2	289,0	436,8	307,9
6-Dodecene, (E)-	7206-17-9	0,0	0,0	0,0	0,0	19,4	0,0	0,0	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexene, 3-methyl-	3404-61-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 2-methyl-	7045-71-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	26,8	15,7	0,0	0,0
1-Pentene, 3-ethyl-2-methyl-	19780-66-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 4,4-dimethyl-	17312-68-4	10,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Dodecene, (Z)-	7239-23-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	49,9	0,0	0,0
Decane, 3-ethyl-3-methyl-	17312-66-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,6	0,0	0,0	0,9	20,7	1,2	19,0	0,0
Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8	2,9	6,3	2,3	4,4	0,0	0,7	1,4	0,0	0,7	0,0	2,2	0,0	0,0	1,5
1-Tridecene	2437-56-1	7,7	5,5	6,4	7,9	10,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,4	5,8
Tridecane	629-50-5	226,9	132,2	89,3	161,8	130,8	116,2	100,9	50,8	61,5	28,3	151,9	93,0	152,3	129,5
2-Heptene, 2,6-dimethyl-	5557-98-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Nonane, 4-methylene-	33717-91-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decane, 3,6-dimethyl-	17312-53-7	47,5	17,4	0,0	0,0	0,0	35,4	19,8	11,0	15,4	0,0	27,8	0,0	26,7	0,0
Undecane, 2,4-dimethyl-	17312-80-0	0,0	0,0	0,0	33,6	0,0	0,0	12,1	0,0	0,0	0,0	13,7	0,0	14,0	0,0
Tridecane, 3-methyl-	6418-41-3	194,0	109,8	160,8	273,5	160,5	183,3	127,5	76,9	74,2	18,1	153,0	89,5	225,2	118,5
1-Tetradecene	1120-36-1	32,6	26,5	28,8	52,3	35,4	38,9	19,4	11,7	11,1	0,0	24,5	0,0	40,0	15,4
Tetradecane	629-59-4	325,1	265,3	201,6	305,6	225,7	325,0	190,5	169,9	112,2	65,0	209,2	226,1	370,0	202,0
2,4-Heptadiene, (E,E)-	2384-94-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tridecane, 2-methyl-	1560-96-9	0,0	0,0	0,0	24,8	0,0	15,5	10,3	0,0	0,0	1,4	13,6	0,0	19,3	0,0
2,4-Dimethyl 1,4-pentadiene	4161-65-3	0,0	0,0	0,0	12,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 3-methyl-	2216-33-3	4,6	0,0	0,0	5,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Octadiyne	764-74-9	7,0	6,6	1,6	0,0	0,0	6,6	4,3	5,1	0,0	0,0	0,0	8,3	1,1	0,0
Octane, 2,7-dimethyl-	1072-16-8	0,0	9,1	14,2	0,0	12,4	0,0	10,2	5,1	0,0	0,0	15,7	0,0	0,0	0,0
Octadecane	593-45-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decane, 2,5,9-trimethyl-	62108-22-9	0,0	8,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7
Pentadecane	629-62-9	196,6	159,4	308,9	121,6	113,9	47,8	8,3	189,3	96,7	25,2	25,0	63,8	213,1	44,6
Pentadecane, 3-methyl-	2882-96-4	204,8	178,6	199,1	157,2	66,9	434,9	121,5	163,7	30,2	68,1	82,9	243,4	479,7	69,9
Hexadecane	544-76-3	252,5	289,4	174,9	127,1	133,4	343,6	155,1	152,1	32,1	84,5	62,3	256,1	309,9	94,0

Amines

Dimethylamine	124-40-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Aminocrotonitrile	1118-61-2	10,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butyn-2-amine, 2-methyl-	2978-58-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propen-1-amine, 2-methyl-	2878-14-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentyn-3-amine, 3-methyl-	18369-96-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutylamine	2516-34-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2-Ethanediamine, N,N-diethyl-N'-methyl-	104-79-0	0,0	0,0	10,0	6,2	8,4	0,0	0,0	3,2	0,0	2,5	0,0	0,0	2,5	0,0
Methanamine, N-butylidene-	6898-69-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-(1,1-Dimethyl-2-propynyl)-N,N-dimethylamine	19788-24-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,0
N-Benzyl-2-phenethylamine	3647-71-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propanamine	75-31-0	0,0	0,6	0,0	0,0	1,6	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0



Aziridine, 1-propyl-	5536-98-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Aziridine, 2-methyl-	75-55-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hydroxylamine, O-(phenylmethyl)-	622-33-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Azabicyclo[3.1.0]hexane	285-76-7	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Aromatic Alcohol

Phenol, 3-methyl-	108-39-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol, 3,5-dimethyl-	108-68-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol, 2-ethyl-	90-00-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol	108-95-2	7,7	18,9	15,0	9,9	12,1	0,4	0,0	7,9	0,0	6,0	0,0	0,0	9,3	202,1
Benzyl alcohol	100-51-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	251,8
p-Cresol	106-44-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,3
Phenol, 3,4-dimethyl-	95-65-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0

Aromatic compounds

Benzene	71-43-2	100,6	105,6	171,4	84,4	92,1	103,5	85,3	98,9	110,7	86,9	127,4	71,6	85,2	85,7
Toluene	108-88-3	390,3	423,8	598,5	428,3	341,3	442,2	341,2	356,9	343,0	382,3	314,1	409,3	353,4	426,5
Ethylbenzene	100-41-4	260,6	307,4	521,3	292,7	275,2	281,8	338,4	185,6	198,4	213,9	227,6	410,3	377,8	201,6
p,m-Xylene	106-42-3/108-38-3	416,1	441,1	0,0	377,5	354,1	470,4	330,7	265,4	313,9	463,2	479,7	434,5	457,3	323,5
o-Xylene	95-47-6	222,0	184,3	0,0	173,0	176,6	199,9	171,5	148,9	124,9	128,6	120,2	131,1	125,2	142,9
Styrene	100-42-5	309,9	180,3	220,8	174,7	188,9	192,6	177,2	194,0	78,1	78,7	102,5	77,5	78,6	181,5
Benzene, (1-methylethyl)-	98-82-8	69,3	55,7	83,1	60,7	57,5	52,1	0,0	0,0	26,5	30,4	28,2	36,9	25,7	9,3
Benzene, 1-propenyl-	637-50-3	18,0	11,7	0,0	12,2	12,2	12,7	6,4	6,1	4,2	5,8	5,9	6,6	5,3	0,0
Benzene, propyl-	103-65-1	108,5	94,5	141,4	85,1	100,2	94,7	48,7	51,1	44,5	53,9	60,0	54,1	50,1	52,3
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	622-96-8	142,4	165,1	242,9	110,5	123,4	145,5	78,5	86,3	77,7	96,7	119,2	100,0	98,7	156,3
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	95-63-6	90,8	110,0	207,3	120,6	160,5	88,6	60,7	51,8	47,0	65,8	72,8	58,4	57,4	48,4
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	69,3	85,4	150,6	58,4	70,7	75,1	37,7	40,1	34,9	48,0	62,9	43,2	42,5	52,8
a-Methylstyrene	98-83-9	59,5	37,6	42,6	37,9	41,2	37,3	20,1	19,1	13,8	20,0	16,9	23,8	18,9	36,1
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	225,7	248,6	334,9	204,5	235,4	235,8	179,4	156,5	146,5	173,8	212,0	158,8	181,5	157,7



Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	622-97-9	3,0	11,4	0,8	0,0	4,5	6,6	0,0	0,9	1,2	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0
Benzene, (2-methylpropyl)-	538-93-2	68,2	101,3	154,1	59,2	79,4	88,9	39,0	35,4	37,4	39,1	58,4	40,6	39,4	38,8
Benzene, (1-methylpropyl)-	135-98-8	25,3	25,8	0,0	40,7	25,4	10,2	8,7	3,3	3,1	13,4	8,0	4,4	0,0	5,3
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	61141-97-7	26,1	8,3	15,2	23,0	19,4	17,6	14,3	10,9	5,8	2,0	0,0	0,0	11,8	2,9
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	12,3	16,7	31,1	9,4	12,9	11,2	6,0	4,6	4,9	5,0	8,1	5,6	6,3	6,1
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4	61,3	138,6	161,7	51,5	74,6	93,8	54,1	30,0	33,7	39,6	49,0	29,5	50,8	0,0
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	934-74-7	37,7	48,8	87,0	38,3	47,8	0,0	28,2	22,7	17,0	28,0	33,4	0,0	22,3	23,2
Benzene, butyl-	104-51-8	0,0	11,5	0,0	0,0	5,2	0,0	0,0	2,3	5,1	3,9	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,2-diethyl-	135-01-3	2,3	0,0	6,5	0,0	0,0	0,0	1,0	0,7	0,0	1,1	1,3	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	766-97-2	4,8	11,5	0,0	0,0	5,6	7,2	2,0	2,5	0,0	2,0	0,0	2,0	2,7	0,0
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	12,8	14,6	27,5	11,7	12,4	8,7	7,1	5,0	5,2	3,7	7,0	3,8	5,2	4,0
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	1758-88-9	19,4	28,6	43,1	15,6	16,8	16,6	12,0	6,4	8,0	7,9	12,8	9,2	9,4	0,0
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	768-49-0	7,8	11,7	3,2	28,9	14,9	3,6	0,0	0,0	0,0	2,7	0,0	2,9	0,0	1,0
2,4-Dimethylstyrene	2234-20-0	39,4	71,0	70,3	27,3	44,6	42,0	32,2	16,8	15,7	20,1	36,2	22,4	25,3	13,6
Benzene, (1,1-dimethylpropyl)-	2049-95-8	4,4	3,9	12,8	2,4	5,6	2,0	1,9	1,2	1,6	1,1	2,1	1,2	1,6	6,2
Naphthalene, decahydro-, cis-	493-01-6	0,0	8,7	0,0	0,0	0,0	0,0	3,1	0,0	2,6	0,0	5,7	2,6	0,0	0,0
Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	874-41-9	8,1	9,7	15,9	0,0	10,9	0,0	4,8	0,0	0,0	1,4	2,3	4,0	0,0	0,0
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	527-53-7	0,0	0,0	0,0	42,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	488-23-3	0,0	87,5	0,0	60,2	66,3	71,6	46,8	30,8	30,1	22,0	47,0	34,2	36,5	35,0
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	535-77-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	1595-16-0	0,0	6,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methyl-4-butyl	1595-05-7	0,0	8,4	0,0	0,0	0,0	3,3	0,0	0,0	1,6	1,4	4,3	0,0	1,4	0,0
Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	27831-13-6	28,9	37,5	33,6	18,3	24,0	24,6	7,7	5,6	7,1	7,0	20,3	12,1	8,6	0,0
Benzene, (1,2-dimethylpropyl)-	4481-30-5	0,0	0,0	4,8	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	1,6	0,0	0,0	1,5
Naphthalene, 1,2-dihydro-	447-53-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-ethyl-2,4,5-trimethyl-	17851-27-3	6,7	10,8	7,1	5,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,9	0,0	2,6	0,0
Estragole	140-67-0	0,0	13,0	0,0	22,6	13,9	8,4	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,4-dipropyl-	4815-57-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene	91-20-3	61,8	146,6	64,3	71,9	91,3	97,1	36,8	26,9	25,2	21,3	56,6	31,0	33,9	26,5
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-methyl-	3877-19-8	0,0	8,0	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	1,0	4,0	1,9	0,0	30,9



Benzene, cyclopentyl-	700-88-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3
Benzene, hexyl-	1077-16-3	6,7	6,3	5,3	9,0	9,1	5,3	3,7	2,6	2,5	1,0	3,3	0,0	4,0	0,0
Benzene, 1,1'-(1,1,10,10-tetramethyl-1,10-decanediyl)bis[3,4-dimethyl-	63934-83-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1,3-dimethylbutyl)-	19219-84-2	3,1	2,5	2,5	5,4	3,9	0,8	1,6	0,2	0,9	0,5	1,7	2,1	0,5	3,8
Benzene, pentamethyl-	700-12-9	4,3	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8	1,4	0,7	1,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0
Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-4-ethenyl-	1746-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0
Anethole	104-46-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	34,1
Naphthalene, 2-methyl-	91-57-6	35,3	44,7	17,7	23,3	0,0	0,0	0,0	0,0	4,5	7,4	25,2	0,0	0,0	15,3
Benzene, (1-methyldodecyl)-	4534-53-6	0,0	0,0	0,0	5,3	7,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5,7-dimethyl-	21693-54-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6
Biphenyl	92-52-4	34,8	35,9	36,2	71,1	51,1	29,0	25,6	11,8	10,8	7,0	28,5	16,5	21,3	0,0
Diphenylmethane	101-81-5	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Phenyl-5-methylheptane	103240-92-2	1,2	0,8	0,9	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,4	0,0	0,5
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	581-42-0	2,1	4,2	0,0	0,0	3,5	1,2	1,0	0,6	0,0	0,0	2,8	1,4	1,4	0,0

Cyclic Hydrocarbons

Cyclopropane, ethyl-	1191-96-4	52,5	70,8	58,0	51,8	60,4	64,5	34,1	29,7	1,4	29,5	33,3	38,5	35,0	27,8
Cyclopropane, ethylidene-	18631-83-9	24,0	26,4	16,9	19,9	17,2	30,5	8,8	9,4	0,8	12,0	14,0	8,5	13,5	81,6
Spiropentane	157-40-4	7,4	117,9	0,0	5,8	5,9	7,0	2,7	2,8	0,0	0,7	3,7	0,0	3,4	0,0
Cyclopropylacetylene	6746-94-7	4,2	8,0	4,8	3,7	16,4	4,8	2,5	2,7	1,4	4,1	3,3	2,7	3,2	16,9
Cyclopentene	142-29-0	3,1	3,6	3,0	1,9	0,0	2,3	0,9	0,9	0,7	1,1	1,3	1,1	1,0	0,0
Cyclopentane	287-92-3	24,6	9,4	37,1	11,3	16,7	7,5	5,5	0,0	0,0	5,0	6,7	3,6	5,6	6,1
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	96-39-9	1,0	0,7	0,8	0,7	0,7	0,7	0,0	0,3	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0
3-(2-Propenyl)cyclopentene	14564-97-7	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, 1-propenyl-	4663-21-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, methyl-	96-37-7	30,7	26,7	175,5	23,0	29,6	27,5	15,6	13,5	25,4	24,1	41,8	14,6	20,9	59,1
Cyclopentane, methylene-	1528-30-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,2
1-cyclobutylcyclobutene	58372-37-5	8,4	5,5	5,4	0,0	6,0	6,2	1,5	1,1	1,3	0,0	1,9	1,1	1,2	3,4
Cyclopentene, 3-methyl-	1120-62-3	6,2	9,8	97,1	3,3	5,2	9,7	2,8	4,0	2,8	9,3	10,9	3,6	7,3	17,0



Cyclopropene, 3-methyl-3-vinyl-	71153-30-5	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	1,0	0,0
1,3-Cyclopentadiene, 5-methyl-	96-38-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentene, 1,5-dimethyl-	16491-15-9	0,5	0,9	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,3	0,3	0,0	0,0	0,2	0,0	1,2
Cyclopentene, 1-methyl-	693-89-0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,1-dimethyl-	1638-26-2	0,0	0,0	20,6	0,0	0,0	2,5	1,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	1,1	0,0
Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis-	2532-58-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	3,1
Cyclohexene	110-83-8	29,6	10,1	76,6	28,6	0,0	9,7	0,0	4,4	64,4	24,7	18,4	5,4	0,0	0,0
1,2-Dimethyl cyclopropene	14309-32-1	0,0	0,0	45,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0	0,0
Cyclopentene, 4,4-dimethyl-	19037-72-0	4,2	2,7	82,6	0,0	3,8	2,7	0,0	2,3	0,0	2,4	3,0	1,0	5,5	8,0
Bicyclo[2.1.0]pentane, 1,4-dimethyl-	17065-18-8	0,0	7,6	0,0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,5	5,1	0,0	0,0	0,0
cis-1-Methyl-2-(2'-propenyl)cyclopropane	76588-97-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,4	0,7	0,0	0,2	0,0	0,0
Cyclohexane, methyl-	108-87-2	71,5	68,6	407,6	58,2	52,6	58,3	31,5	22,5	22,6	36,0	49,8	22,9	27,7	122,1
Cyclopentadiene, 2,5,5-trimethyl-	7086-15-9	1,4	1,1	0,0	2,3	0,5	0,3	0,2	0,2	0,0	0,3	0,2	0,3	0,2	0,8
Cyclopentane, ethyl-	1640-89-7	12,8	16,5	118,8	9,2	7,3	14,3	3,9	8,3	0,0	15,2	0,0	5,1	8,2	22,7
1,3-Cyclopentadiene, 5,5-dimethyl-	4125-18-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-	2815-58-9	4,3	3,8	0,0	2,2	0,1	3,7	1,8	1,6	1,4	3,0	4,0	1,6	2,4	5,2
Cyclohexane, methylene-	1192-37-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 4-methyl-	591-47-9	0,0	3,5	12,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0
Cyclopentene, 3-ethyl-	694-35-9	3,4	4,4	13,2	0,0	9,6	0,0	3,7	0,0	4,6	2,5	3,0	3,3	3,6	0,0
Cyclobutene, 2-propenylidene-	52097-85-5	2,6	0,0	4,5	2,0	1,9	2,1	0,0	0,8	0,8	0,0	0,5	0,6	0,0	0,0
Cyclohexene, 1-methyl-	591-49-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 3-methyl-	591-48-0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	638-04-0	16,2	20,1	192,8	9,9	9,1	8,1	6,8	5,9	6,7	9,0	13,2	9,0	7,6	6,0
3,3,5,5-Tetramethylcyclopentene	38667-10-6	0,0	3,2	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 2-ethylidene-1,1-dimethyl-	56324-66-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
cis-1-Butyl-2-methylcyclopropane	38851-69-3	0,0	37,2	0,0	41,6	70,1	42,2	23,7	28,3	0,0	17,8	16,5	17,9	12,4	49,2
Cyclohexane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	4923-77-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, ethyl-	1678-91-7	0,0	0,0	101,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	3073-66-3	0,0	0,0	88,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-isopropyl-1-methyl-	16580-26-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Cyclohexane, ethylidene-	1003-64-1	0,0	0,0	0,0	0,0	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-	1839-63-0	0,0	0,0	34,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-, (1a,3a,5b)-	1795-26-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
trans-1-Methyl-2-(2'-propenyl)cyclopropane	76588-95-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butane, 2-cyclopropyl-	1406223	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclohexadiene, 5,6-dimethyl-	5715-27-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0	0,5
Pentalene, octahydro-, cis-	1755-05-1	0,0	0,0	13,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-	694-72-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, 1-methyl-2-pentyl-	41977-37-1	0,0	163,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	101,9	0,0	0,0	0,0	17,7
Cyclohexane, propyl-	1678-92-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Ethyl-3-methylcyclohexane (c,t)	3728-55-0	0,0	0,0	30,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 1-propyl-	2539-75-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, (1-methylethyl)-	696-29-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-2-methyl-	3868-64-2	3,0	0,0	25,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	1,6	1,8	0,0	1,2	0,0
Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7,7-trimethyl-	508-32-7	48,9	36,3	54,3	74,3	33,4	36,8	12,6	16,1	10,6	22,9	9,6	0,0	9,6	94,2
Cyclopentane, (2-methylpropyl)-	3788-32-7	0,0	0,0	115,3	0,0	0,0	11,9	10,0	6,6	7,1	0,0	12,7	9,4	8,6	4,5
Cyclobutane, ethyl-	4806-61-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-1-methyl-	32273-77-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, octahydro-, trans-	3296-50-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-ethyl-1,3-dimethyl-, cis-	62238-31-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, (2-methylbutylidene)-	53366-54-4	0,0	3,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0
Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-	5256-65-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	188,1
Cyclopropane, ethenylmethylene-	19995-92-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4
Trans-1,4-diethylcyclohexane	13990-93-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentene, 1,3-dimethyl-2-(1-methylethyl)-	61142-32-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,5	0,0	5,7	0,0	6,1	6,5	0,0	60,6
1H-Indene, octahydro-, cis-	4551-51-3	0,0	5,1	29,1	0,0	0,0	5,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutane, 1-ethyl-3-methylene-	56335-70-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2,7,7-trimethyl-	514-14-7	13,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,3,3-trimethyl-	488-97-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butene, 4-cyclopropyl-	7736-35-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



1,3,5-Cycloheptatriene	544-25-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-, trans-	1124-26-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,8
Bicyclo[3.2.0]hepta-2,6-diene	2422-86-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, butyl-	1678-93-9	9,6	0,0	27,6	10,5	12,9	9,7	6,0	4,1	5,0	3,4	4,8	0,0	5,9	0,0
Cyclopropane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	19781-68-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, hexyl-	4292-75-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-, trans-	493-02-7	0,0	15,4	65,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(E)-2-Butenylcyclopropane	76588-98-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, pentyl-	4292-92-6	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, (2-methylpropyl)-	1678-98-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-	91-17-8	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Spiro[4.5]decane	176-63-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3,8-p-Menthatriene	18368-95-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-2-methyl-	2958-76-1	0,0	0,2	8,2	0,0	0,0	0,0	3,2	2,3	1,5	1,5	6,2	4,6	1,8	4,6
Cyclohexane, 1,1,3,5-tetramethyl-, cis-	50876-32-9	0,0	7,2	17,2	0,0	0,0	0,0	0,0	4,1	0,0	1,6	7,2	0,0	3,2	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	874-35-1	19,4	42,1	63,9	18,0	19,6	36,6	0,0	7,1	7,6	9,8	35,8	0,0	17,6	12,9
Isopropylcyclobutane	872-56-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,3	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	119-64-2	0,0	38,4	27,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,7	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropene	2781-85-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, pentyl-	3741-00-2	92,2	50,8	81,6	0,0	86,8	107,0	63,0	30,0	39,6	9,6	0,0	0,0	48,3	0,0
Cyclohexane, 2-propenyl-	2114-42-3	65,3	15,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,6	0,0	0,0	0,0
Azulene	275-51-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,1'-Bicyclopentyl	1636-39-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, 1-butyl-2-(2-methylpropyl)-	41977-35-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-ethyl-1-methyl-	4926-90-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,1'-Bicyclohexyl	92-51-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	930-89-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-	4994-16-5	0,0	0,0	1,2	0,0	9,3	7,5	0,0	2,3	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,1'-methylenebis-	3178-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



1,1'-Bicyclohexyl, 2-methyl-, cis-	50991-08-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,1,3-trimethyl-	4516-69-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0
Cycloheptane, methyl-	4126-78-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	29788-41-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4-dimethyl-	4175-54-6	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4-Methenoazulene, decahydro-1,5,5,8a-tetramethyl-, [1S-(1a,2a,3aβ,4a,8aβ,9R*)]-	1137-12-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane	110-82-7	0,0	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-2,4a-Methanonaphthalene, 1,3,4,5,6,7-hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-, (2S)-	1135-66-6	10,1	8,3	0,0	2,3	10,9	8,5	4,2	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,6
Cyclopentane, nonyl-	2882-98-6	54,8	36,5	51,4	89,7	38,8	0,0	38,9	21,2	18,8	3,9	43,7	21,5	60,1	0,0
Cyclohexane, octyl-	1795-15-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8	7,5	0,0
Cyclopentane, butyl-	2040-95-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,2,3-trimethyl-, (1a,2a,3a)-	2613-69-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acenaphthene	83-32-9	0,0	2,8	1,9	2,5	1,6	0,0	0,4	0,5	0,0	0,0	2,2	0,0	1,3	1,4

Esters

Methyl formate	107-31-3	0,0	1,2	1,8	0,0	1,0	1,1	0,0	0,2	0,0	0,0	0,1	0,4	0,1	0,0
Acetic acid, methyl ester	79-20-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0
Ethyl Acetate	141-78-6	49,7	56,0	86,6	45,0	60,7	69,8	35,6	23,6	23,6	32,1	33,8	22,7	22,0	189,8
Acetic anhydride	108-24-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoic acid, 2-methyl-, methyl ester	547-63-7	1,1	0,0	0,0	0,0	1,0	1,2	0,5	0,6	0,0	0,7	0,5	0,0	0,5	0,0
Vinyl crotonate	14861-06-4	20,9	0,0	11,8	0,0	0,0	17,2	10,7	9,9	5,1	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0
Methyl methacrylate	80-62-6	0,0	0,0	0,0	0,0	18,6	0,0	0,0	8,8	4,8	0,0	12,2	0,0	0,7	1,2
n-Propyl acetate	109-60-4	3,0	9,8	0,0	1,9	7,7	2,6	1,3	0,6	1,0	0,7	0,6	0,6	0,7	5,3
Carbonic acid, dimethyl ester	616-38-6	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,8	0,0	0,8	0,6	0,7	0,8	1,5
Propane, 2-isocyanato-	1795-48-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexanoic acid, methyl ester	106-70-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methacrylic acid, ethyl ester	97-63-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allyl acetate	591-87-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,1	31,3	0,0	23,6	18,5	19,6	0,0	0,0
Butanoic acid, ethyl ester	105-54-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Acetic acid, butyl ester	123-86-4	94,9	77,0	126,7	75,4	72,2	76,7	46,7	39,2	40,8	51,6	61,0	74,9	32,1	348,6
2-Ethoxyethyl acetate	111-15-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0
Crotonic anhydride	623-68-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,2	0,0	0,0
Butanoic acid, 2-methyl-, ethyl ester	7452-79-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	40,3
Formic acid, 1-methylethyl ester	625-55-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,3
1-Butanol, 3-methyl-, acetate	123-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,4
1-Butanol, 2-methyl-, acetate	624-41-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,3
2-Propenoic acid, butyl ester	141-32-2	0,0	0,0	14,8	5,9	16,4	8,6	0,0	0,0	4,0	0,0	0,0	0,0	3,9	6,4
1,4-Diacetoxy-trans-2-butene	1576-98-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid ethenyl ester	108-05-4	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, 2-methylpropyl ester	539-90-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,6
Butanoic acid, anhydride	106-31-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methyl 2-butynoate	23326-27-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethenyl ester	4245-37-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, hexyl ester	142-92-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,4
Valeric anhydride	2082-59-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pivalic acid vinyl ester	3377-92-2	22,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
di-tert-Butyl dicarbonate	24424-99-5	0,0	3,1	3,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, 2-ethylhexyl ester	103-09-3	19,8	0,0	0,0	0,0	12,4	0,0	0,0	0,0	0,0	6,9	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,3,6,6-tetramethyl-	6713-72-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,5,5-Trimethylhexyl acetate	58430-94-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,4
Acetic acid, phenylmethyl ester	140-11-4	11,3	14,9	2,8	7,1	0,0	14,9	6,5	5,8	4,3	2,0	1,5	8,2	7,7	22,1
Diethyl Phthalate	84-66-2	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	21,6	8,6	0,0
Cyclopentanecarboxylic acid, ethenyl ester	16523-06-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0
Formic acid, 2-methylpropyl ester	542-55-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Triacetin	102-76-1	0,0	0,0	4,7	0,0	0,0	5,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Butadien-1-ol, acetate	1515-76-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propynoic acid, methyl ester	922-67-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methylbenzyl p-toluate	67157-61-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, methyl ester	623-42-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Dibutyl phthalate	84-74-2	0,0	66,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,8	0,0
-------------------	---------	-----	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Ethers

Ethylene oxide	75-21-8	0,4	0,0	2,5	0,0	0,1	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,3	2,0
Trimethylene oxide	503-30-0	47,4	63,7	79,2	67,2	68,2	69,6	38,8	41,0	1,8	33,3	31,7	37,6	36,4	127,6
Oxirane, ethyl-	106-88-7	0,3	0,0	0,6	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propene, 3-methoxy-	627-40-7	4,4	0,0	12,8	3,9	4,7	4,2	1,9	2,2	0,0	1,5	2,1	1,4	1,8	15,3
Propane, 2-ethoxy-2-methyl-	637-92-3	0,0	0,0	252,7	13,8	30,5	41,1	0,0	0,0	0,0	49,9	54,3	0,0	0,0	145,8
1-Propene, 3-(ethenyloxy)-	3917-15-5	0,0	0,0	8,6	0,0	1,4	0,0	0,0	1,4	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	11,1
Butane, 1-methoxy-	628-28-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,2-dimethoxy-	110-71-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,5
Heptane, 1,1'-oxybis-	629-64-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0
Butane, 2-methoxy-3-methyl-	62016-49-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propanol, 1-methoxy-	107-98-2	3,0	2,1	34,9	1,9	5,1	2,9	1,3	1,8	0,0	2,4	2,0	2,7	1,2	138,5
1,4-Dioxane	123-91-1	1,8	1,2	7,1	2,0	1,8	2,1	0,9	0,7	0,8	0,8	1,1	0,9	0,9	3,9
1-Propanol, 2-methoxy-	1589-47-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	35,8
Ethene, ethoxy-	109-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butyne, 3-methyl-3-propoxy-	53907-64-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,2'-Bi-1,3-dioxolane	6705-89-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentane, 1-propoxy-	18641-82-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethene, methoxy-	107-25-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanol, 2-butoxy-	111-76-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	424,7
Benzene, 1-methoxy-4-methyl-	104-93-8	2,6	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butyne, 3-methyl-3-(1-methylethoxy)-	53907-63-4	0,0	3,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Benzodioxole	274-09-9	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	1,6	1,0	0,7	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propanol, 1-butoxy-	5131-66-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	132,0
Tetramethyl orthocarbonate	1850-14-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Methyl-1-ethoxycyclobutane	59416-06-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0
Dimethyl ether	115-10-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,7
Propane, 2-ethoxy-	625-54-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Oxetane, 3,3-dimethyl-	6921-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, [1-[[1-(1-methylethyl)-3-butenyl]oxy]ethyl]-, [S-(R*,R*)]-	98088-51-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,7	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propene, 3-(1,1-dimethylethoxy)-	1471-04-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0	5,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butoxyethyl acetate	112-07-2	233,7	95,5	222,9	89,0	71,4	269,8	50,7	46,8	32,5	36,8	239,3	46,0	168,3	23,4
Ethene, tetramethoxy-	1069-12-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (propoxymethyl)-	937-61-1	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxetane, 3-(1-methylethyl)-	10317-17-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isobutylene epoxide	558-30-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethoxyacetylene	927-80-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,9	1,8	0,0	0,9	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentyne, 3-ethyl-3-methoxy-	53941-20-1	0,0	0,0	0,0	15,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxirane, 2-methyl-3-(1-methylethyl)-	1192-31-0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methoxy-4-methyl-2-(1-methylethyl)-	31574-44-4	10,3	0,0	0,0	40,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ether, hexyl pentyl	32357-83-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-(Methylenedioxy)toluene	7145-99-5	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4,5-Tetroxane, 3,3,6,6-tetraphenyl-	16204-36-7	0,0	0,9	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0
Diphenyl ether	101-84-8	18,3	26,1	11,6	20,2	11,8	12,3	7,1	4,2	0,0	0,0	16,2	8,8	7,7	20,5
1,3-Benzodioxole, 5-(2,2-dimethylethyl)-	28140-80-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Furans

Furan, 2-methyl-	534-22-5	22,6	32,6	33,8	22,8	28,4	24,2	10,9	11,4	7,7	11,4	8,4	15,9	13,0	36,6
Furan, 3-methyl-	930-27-8	5,0	8,7	0,0	6,5	8,8	8,2	4,6	3,9	0,0	4,8	4,7	4,0	4,0	10,4
Tetrahydrofuran	109-99-9	0,0	0,0	4,4	0,0	7,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,3'-Bifuran, 2,2',3',5-tetrahydro-	98869-93-3	0,0	0,0	0,0	0,0	5,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2-ethyl-	3208-16-0	16,7	17,2	17,5	15,0	17,0	15,8	7,2	7,6	6,8	6,2	6,0	7,2	10,0	57,5
Furan, 2,5-dimethyl-	625-86-5	14,0	15,3	0,0	12,8	13,7	16,0	6,6	6,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,6
2,4-Dimethylfuran	3710-43-8	0,0	0,0	24,3	0,0	0,0	14,8	0,0	20,6	6,2	7,6	0,0	4,7	0,0	25,5
Furan, 2-propyl-	4229-91-8	8,7	8,5	6,6	8,5	9,8	10,5	3,7	4,3	3,4	3,2	2,8	4,0	4,3	11,1
Furan, 2,3,5-trimethyl-	10504-04-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2,3-dihydro-	1191-99-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0



3,3'-Bifuran, 2,2',3,3'-tetrahydro-	98869-94-4	0,0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2-(2-propenyl)-	75135-41-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8	0,0	0,0
Furan, 2-methoxy-	25414-22-6	0,0	5,0	0,0	0,0	4,7	6,2	2,3	2,2	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0
2-n-Butyl furan	4466-24-4	9,1	9,0	7,9	10,3	10,3	10,9	5,0	5,5	7,9	4,3	3,9	9,9	10,0	26,9
2,5-Furandione, 3,4-dimethyl-	766-39-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Maleic anhydride	108-31-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,8	0,0	0,0
Furan, 2-pentyl-	3777-69-3	18,2	18,9	12,9	21,3	21,4	21,4	11,8	11,3	7,5	9,3	8,9	10,4	9,6	83,4
Furan, 2-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	6141-68-0	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,7	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzofuran	271-89-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	2,6	10,9	0,0
Furan	110-00-9	0,0	0,0	0,0	0,0	10,9	7,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanone, 1-(2-furanyl)-	4208-57-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Halogen-containing compounds

Heptane, hexadecafluoro-	335-57-9	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	1,1	0,5	0,4	0,0	0,2	0,0	0,3	0,4	0,4
Dichlorodifluoromethane	75-71-8	0,0	0,0	1,0	0,5	0,0	0,5	0,2	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0
Methane, bromo-	74-83-9	0,4	0,3	0,4	0,2	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6
Ethyl Chloride	75-00-3	0,4	0,3	0,3	0,2	0,4	0,2	0,2	0,0	0,0	0,0	0,1	0,2	0,1	0,2
Trichloromonofluoromethane	75-69-4	5,5	6,6	9,4	7,3	5,9	6,6	2,4	3,1	0,0	3,3	3,5	3,4	3,6	2,2
1,1-Dichloro-1-fluoroethane	1717-00-6	0,0	0,5	0,0	0,5	0,4	0,4	0,0	0,2	0,0	0,2	0,0	0,0	0,2	0,2
Ethylamine, 2-((p-bromo-a-methyl-a-phenylbenzyl)oxy)-N,N-dimethyl-	3565-72-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-	76-13-1	15,0	19,0	16,2	19,7	17,0	20,1	7,3	7,7	0,0	7,4	7,7	7,4	7,9	0,0
Methane, iodo-	74-88-4	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,5	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0
Methylene chloride	75-09-2	0,0	6,3	0,0	10,3	0,0	5,1	2,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,7	0,0
1,3,5-Trifluorobenzene	372-38-3	0,0	0,0	0,0	0,2	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0
Ethene, fluoro-	75-02-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Trichloromethane	67-66-3	0,0	13,3	9,7	5,2	5,0	0,0	3,3	0,0	2,9	5,4	7,4	6,2	4,1	160,5
Ethane, 1,1,1-trichloro-	71-55-6	0,9	0,9	0,0	1,3	0,7	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6
Carbon Tetrachloride	56-23-5	36,2	43,7	23,1	39,0	32,6	47,7	22,4	23,5	0,0	23,5	23,5	25,2	25,6	17,5
Acrolein, 2-chloro-	683-51-2	0,0	1,1	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Trichloroethylene	79-01-6	1,0	1,0	0,0	1,1	1,5	1,0	0,4	0,5	0,6	0,5	0,3	0,2	0,7	8,3
Methane, bromodichloro-	75-27-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8
Cyclopentane, bromo-	137-43-9	0,0	36,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cycloheptane, bromo-	2404-35-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetrachloroethylene	127-18-4	511,4	365,1	378,4	364,0	432,1	407,9	244,7	247,8	221,1	247,6	194,0	279,6	224,4	197,9
exo-2-Bromonorbornane	2534-77-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, dibromochloro-	124-48-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	25,4
Bromochloronitromethane	135531-25-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoyl chloride, 3-chloro-	625-36-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 1-chloro-	544-10-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6
Benzene, chloro-	108-90-7	8,8	15,1	7,9	6,1	9,1	11,1	2,8	3,5	3,3	2,8	0,0	3,4	2,7	0,0
Propane, 2-bromo-2-methyl-	507-19-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, tribromo-	75-25-2	7,9	9,7	0,6	10,6	6,9	8,3	4,1	3,8	0,0	2,3	3,5	6,0	3,6	48,4
Ethanone, 1-(3-fluorophenyl)-	455-36-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4
Propane, 2-chloro-2-nitro-	594-71-8	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cycloheptatrienylium, iodide	1316-80-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2,2-difluoro-	420-45-1	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,4-dichloro-	106-46-7	1,5	0,0	0,0	0,0	15,0	12,1	7,9	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	4,6	11,8
Ethane, 1,1-difluoro-	75-37-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,1,1-trifluoro-	420-46-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
tert-Butyl iodide	558-17-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,3,5-trichloro-	108-70-3	0,0	0,0	0,0	1,2	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dodecane, 1-iodo-	4292-19-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Chloroethyl benzoate	939-55-9	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Chlorine	7782-50-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetradecane, 1-iodo-	19218-94-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Iodo-2-methylundecane	73105-67-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,6	0,0	0,0	7,2	0,0	0,0

Ketones

Acetone	67-64-1	123,1	160,1	130,6	115,0	136,6	172,7	104,8	96,5	39,8	124,6	128,3	140,0	135,4	197,6
---------	---------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	------	------	-------	-------	-------	-------	-------



Acetyl valeryl	96-04-8	6,0	7,4	46,4	3,9	0,0	6,1	3,1	3,3	0,0	5,4	6,9	3,7	4,4	0,0
Methyl vinyl ketone	78-94-4	43,6	49,1	46,0	46,2	42,5	48,4	20,9	23,5	21,2	23,0	21,0	30,3	24,6	57,4
2,3-Butanedione	431-03-8	28,7	27,9	0,0	23,6	30,5	30,2	13,3	15,1	0,0	12,7	12,2	17,5	14,3	70,4
2-Butanone	78-93-3	88,5	92,5	109,9	98,5	99,7	102,7	70,4	68,3	60,0	53,6	52,1	62,7	69,8	62,1
3-Penten-2-one	625-33-2	0,5	0,5	0,4	0,0	0,5	0,6	0,1	0,0	3,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2
Cyclobutanone, 2,3-dimethyl-, cis-	28113-36-2	0,0	0,0	6,5	0,9	0,0	6,6	0,0	0,3	0,0	0,5	0,0	0,0	1,6	0,0
3-Hexen-2-one	763-93-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hexen-3-one	2497-21-4	1,9	3,1	0,0	3,6	6,7	8,7	0,0	0,0	1,0	2,6	0,0	1,3	1,0	0,0
Ethanone, 1-(2-methyl-2-cyclopenten-1-yl)-	1767-84-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Buten-2-one, 3-methyl-	814-78-8	17,2	17,2	0,0	0,0	26,5	5,5	0,0	8,8	8,6	0,0	19,4	0,0	14,8	13,2
1-Penten-3-one	1629-58-9	9,4	9,8	8,3	8,2	10,3	9,8	4,6	4,1	3,4	3,3	2,7	4,3	4,4	8,6
2-Pentanone	107-87-9	73,2	75,6	131,6	72,9	79,2	79,5	40,1	38,0	42,5	33,3	34,3	41,2	41,9	138,8
3-Pentanone	96-22-0	103,7	101,8	61,0	87,6	89,9	96,1	60,2	57,7	50,0	34,0	34,3	50,1	55,5	9,3
2-Butanone, 3,3-dimethyl-	75-97-8	3,5	3,6	0,0	4,5	3,7	4,7	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	24,8
2-Nonen-4-one	32064-72-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexanone, 3-methyl-	591-24-2	11,2	0,0	11,2	11,6	10,1	12,5	7,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methyl Isobutyl Ketone	108-10-1	58,6	87,9	132,7	53,5	51,6	91,3	35,6	39,0	31,7	61,8	56,9	28,7	44,7	82,2
Cyclobutanone, 2,2,3-trimethyl-	1449-49-6	18,8	14,7	10,3	3,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,0	3,9	0,0	8,1
2-Pentanone, 3-methyl-	565-61-7	0,0	0,0	1,4	28,0	11,5	27,3	0,0	9,2	6,8	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone, 2,3,3-trimethyl-	28290-01-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hexen-3-one, 4-methyl-	52883-78-0	0,0	0,0	0,0	4,6	29,1	0,0	15,1	15,1	0,0	13,5	9,2	0,0	19,9	70,8
2-Pentanone, 4,4-dimethyl-	590-50-1	7,9	8,1	5,1	7,2	0,0	0,0	9,3	0,0	8,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Hexanone	589-38-8	78,8	71,9	55,3	87,3	107,7	95,0	47,3	50,1	41,8	30,2	25,0	31,2	45,9	5,4
4-Hepten-3-one, 5-methyl-	1447-26-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Hexanone	591-78-6	171,9	234,5	181,9	199,2	275,4	273,0	142,7	129,4	140,5	112,0	95,7	84,7	142,3	0,0
2-Hepten-4-one, 2-methyl-	22319-24-0	20,6	21,2	6,8	16,5	20,9	22,8	10,2	10,3	14,8	10,2	5,7	10,8	7,4	9,3
4-Octen-3-one	14129-48-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
trans-3,4-Dimethylcyclopentanone	19550-73-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thujone	546-80-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Bicyclo[3.1.0]hexan-3-one, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	1125-12-8	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Cyclopenten-1-one, 3,5,5-trimethyl-	24156-95-4	0,0	0,0	1,1	0,0	4,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,5
Ethanone, 1-(2-methyl-1-cyclopenten-1-yl)-	3168-90-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone, 2,2,3,4-tetramethyl-, cis-	87481-00-3	0,0	0,0	0,0	3,1	3,8	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Hexanedione	4437-51-8	2,4	3,4	2,5	2,3	2,9	2,8	1,0	1,0	0,0	1,0	0,0	0,0	1,0	0,0
2-Butanone, 3-methyl-	563-80-4	2,0	2,6	0,0	4,4	0,0	4,8	1,2	1,1	1,2	1,2	0,0	1,3	1,3	0,0
1-Propanone, 1-cyclopropyl-	6704-19-4	5,2	4,4	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5	2,2	0,0	1,5	0,0	1,5	0,0	0,0
2-Hexanone, 5-methyl-	110-12-3	8,9	0,0	0,0	8,1	0,0	11,5	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentanone, 3-methyl-	1757-42-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0	2,8	0,0	0,0	1,0	7,6
4-Heptanone	123-19-3	3,2	0,0	0,0	7,7	9,4	0,0	3,8	3,5	1,3	2,4	2,7	3,3	3,9	3,6
2-Cyclopenten-1-one, 3,4,5-trimethyl-	55683-21-1	10,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,9	3,3	4,5	0,0	0,0
3-Heptanone	106-35-4	53,4	52,3	39,2	63,7	69,0	66,1	37,5	40,7	28,5	25,1	20,0	26,7	29,7	77,4
2-Heptanone	110-43-0	69,4	74,9	63,3	70,9	74,9	77,7	32,5	34,2	29,7	27,8	23,2	21,8	32,9	116,6
4,5,6,6a-Tetrahydro-2(1H)-pentalenone	72200-41-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Octanone	106-68-3	17,7	26,4	21,7	18,7	4,5	29,4	20,2	15,0	18,9	9,3	7,3	6,7	4,6	8,8
2-Heptanone, 3-methyl-	2371-19-9	16,0	24,4	0,0	22,0	25,6	26,1	13,4	12,4	8,4	7,6	8,1	0,0	10,5	0,0
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	123-42-2	0,0	11,1	0,0	10,4	11,9	12,1	0,0	0,0	0,0	4,7	3,3	0,0	0,0	0,0
4,6-Octadiyn-3-one, 2-methyl-	29743-33-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Cyclopenten-1-one, 2,3,5-trimethyl-4-methylene-	29765-85-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hepten-3-one, 5-ethyl-4-methyl-	22319-28-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0
2-Cyclohexen-1-one	930-68-7	0,0	0,0	5,5	0,0	0,0	4,7	2,5	0,0	0,0	0,0	0,0	3,1	0,0	4,5
1-Propanone, 1-(1-cyclohexen-1-yl)-	1655-03-4	8,9	11,8	2,7	3,3	4,6	2,7	1,3	2,2	0,6	0,0	5,2	0,0	1,9	0,0
3-Hepten-2-one	1119-44-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentanone, 1-(4-methylphenyl)-	1671-77-8	4,2	3,7	0,0	2,3	2,4	2,6	1,3	1,1	2,1	1,2	1,5	1,6	2,4	0,0
5-Hepten-2-one, 6-methyl-	110-93-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	116,2
2-Octanone	111-13-7	95,4	108,8	70,5	100,4	110,5	108,4	68,0	64,6	54,4	48,8	42,0	32,5	57,8	38,2
2-Pentyn-4-one	7299-55-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentanone, 2,2,4-trimethyl-	28056-54-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Penten-1-one, 2-methyl-	29336-29-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2-Ethylidenecyclohexanone	1122-24-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5
2-Cyclohexen-1-one, 3,5-dimethyl-	1123-09-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3
1,5-Heptadien-4-one, 3,3,6-trimethyl-	546-49-6	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(R)-(+)-3-Methylcyclopentanone	6672-30-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone, 3-ethyl-	56335-73-0	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Penten-3-one, 2-methyl-	25044-01-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,7	0,0
Ethanone, 1-cyclopropyl-	765-43-5	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Nonanone	821-55-6	0,0	24,3	0,0	0,0	0,0	0,0	14,2	0,0	13,5	9,4	16,5	8,1	0,0	13,0
Ethanone, 1-(4-ethylphenyl)-	937-30-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetophenone	98-86-2	277,2	240,4	203,0	222,3	243,4	230,6	142,8	149,1	103,0	154,5	126,8	162,9	153,3	130,9
1-Hexanone, 5-methyl-1-phenyl-	25552-17-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,3,3-trimethyl-	1195-79-5	89,5	167,1	0,0	104,1	105,0	91,7	0,0	31,5	36,8	49,1	0,0	0,0	0,0	59,7
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	83-33-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
6-Methyl-3,5-heptadiene-2-one	1604-28-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,5
3-Penten-2-one, (E)-	3102-33-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Octen-4-one	4643-27-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Penten-2-one	13891-87-7	4,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Decanone	928-80-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	4,2	0,0	3,8	0,0	0,0	2,2	4,3	0,0
2-Decanone	693-54-9	45,6	46,9	38,9	67,7	72,9	50,7	34,0	21,6	21,2	12,5	28,8	0,0	26,4	0,0
Cyclohexanone, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-, (2R-cis)-	1196-31-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	73,0
1-Propanone, 1-phenyl-	93-55-0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(4-methylphenyl)-	122-00-9	10,3	10,4	7,4	11,2	9,2	6,6	4,0	2,1	1,8	1,6	5,1	2,7	3,6	5,8
4-Hepten-2-one, (E)-	36678-43-0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone	1191-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	0,0
(-)-Carvone	6485-40-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	204,0
2-Undecanone	112-12-9	17,8	0,0	22,5	0,0	0,0	18,1	10,9	0,0	0,0	0,0	0,0	11,2	0,0	13,7
2-Dodecanone	6175-49-1	20,0	23,0	32,3	51,8	31,6	26,4	18,5	12,3	8,3	3,8	18,6	8,9	23,8	0,0

Lactones



2(5H)-Furanone, 5-methyl-	591-11-7	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0
2(5H)-Furanone, 3-methyl-	22122-36-7	0,0	0,0	5,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propiolactone	57-57-8	10,2	15,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-Pyran-2-one	504-31-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2(5H)-Furanone, 5,5-dimethyl-	20019-64-1	8,7	17,7	1,3	25,7	0,0	0,0	10,9	6,1	0,0	3,9	6,9	9,9	5,9	0,0
2(3H)-Furanone, dihydro-5-methyl-	108-29-2	40,8	67,3	0,0	47,8	65,6	55,1	32,9	28,8	0,0	26,8	21,8	36,9	28,9	76,5
2(3H)-Furanone, 5-ethyldihydro-	695-06-7	58,3	62,5	0,0	0,0	0,0	52,7	25,5	25,3	0,0	26,0	0,0	38,3	28,3	32,7
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-	542-28-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	36,0	0,0	0,0
2,5-Furandione, 3-(1,1-dimethylethyl)-	18261-07-9	0,0	52,3	0,0	0,0	0,0	0,0	26,2	26,4	0,0	16,2	0,0	40,8	26,4	0,0
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-methyl-	823-22-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1(3H)-Isobenzofuranone, 3,3-dimethyl-	1689-09-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2(5H)-Furanone	497-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Mercaptans

Methanethiol	74-93-1	4,2	1,9	4,4	1,6	2,8	2,4	0,6	0,9	0,0	0,5	0,8	0,3	1,0	3,3
--------------	---------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Nitrogen-containing compounds

Propane, 2-nitro-	79-46-9	34,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	82,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetonitrile	75-05-8	35,6	39,5	32,3	31,3	32,8	33,1	14,6	13,9	10,1	13,6	13,3	16,0	18,7	5,7
Ethane, diazo-	1117-96-0	0,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hydrazine, 1,1-dimethyl-	57-14-7	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-methyl-2-nitro-	594-70-7	0,0	0,0	300,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, nitro-	75-52-5	10,8	12,8	19,9	7,9	0,0	9,4	3,9	5,1	1,7	0,0	2,5	3,4	2,4	0,3
Propanenitrile	107-12-0	11,9	11,6	0,0	11,2	11,8	10,4	4,6	4,2	4,7	4,1	4,0	5,0	5,9	0,0
1,2-Dimethyldiaziridine	6794-95-2	7,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	3,4	0,0	1,1	0,0	0,0	1,4	0,0
Butanedinitrile	110-61-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Methyl-1H-1,2,4-triazole	6086-21-1	22,2	0,0	13,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Methylpyridazine	1632-76-4	7,1	5,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	3,8	7,7
Pyrrolidine, 3-methyl-	34375-89-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butenamide	28446-58-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,5



Butanenitrile, 2-methyl-	18936-17-9	0,0	5,6	0,9	6,2	4,3	2,1	2,0	2,0	0,0	2,4	1,4	1,8	1,8	99,8
Pyridine	110-86-1	27,8	25,2	28,1	14,2	16,2	22,5	7,2	7,5	8,2	9,4	7,5	6,0	11,6	51,2
1H-Pyrrole, 2-ethyl-	1551-06-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Aminopyrimidine	591-54-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentanenitrile	110-59-8	36,2	51,9	33,1	48,0	55,7	48,6	22,7	27,5	20,5	22,2	17,8	28,0	33,7	8,1
Propane, 1-isocyanato-	110-78-1	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,4-Diamino-1,3,5-triazine	504-08-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,2	0,0	0,0	0,0	0,0
2(1H)-Pyrimidinone, 4-amino-	71-30-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isobutyronitrile	78-82-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N,N'-Ethylenebis-acrylamide	2956-58-3	0,0	0,0	7,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-1,2,3-Triazole	288-36-8	4,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 2-methyl-	109-06-8	12,7	10,4	6,2	3,4	5,1	6,5	0,0	1,6	1,3	1,9	1,6	2,0	2,2	22,3
Formamide, N,N-dimethyl-	68-12-2	26,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0	30,2
1,2,4-Triazine	290-38-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, nitroso-	865-40-7	4,4	0,0	0,0	4,9	7,0	3,3	1,7	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3
1H-Tetrazole, 1-methyl-	16681-77-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diethylcyanamide	617-83-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hydroxyurea	127-07-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0
1H-Tetrazole	288-94-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanenitrile, 3-(propylamino)-	7249-87-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,8	0,0
5-Amino-1-ethylpyrazole	3528-58-3	0,0	0,0	8,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazole, 1,5-dimethyl-	694-31-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazol, 1-methyl-2-amino-	6646-51-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4,5-Tetrazine	290-96-0	1,8	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,8	0,9	0,0	0,9	0,7	0,9	0,9	5,8
Pyridine, 3-methyl-	108-99-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,9
1H-Pyrazole, 3-methyl-	1453-58-3	0,0	6,1	0,0	5,6	4,9	6,4	2,6	3,4	2,4	3,7	2,7	2,2	2,7	0,0
Pyrrolidine	123-75-1	0,0	0,0	8,9	0,0	2,3	3,3	4,8	0,0	5,9	0,0	4,6	0,0	4,4	0,0
Hexanenitrile	628-73-9	47,4	54,7	32,3	46,4	62,6	55,5	29,3	32,6	33,0	25,6	24,8	31,6	38,1	0,4
1-Azabicyclo[2.2.2]octane, 4-methyl-	45651-41-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 1-nitro-	108-03-2	3,7	0,0	0,0	0,0	3,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0



4H-1,2,4-Triazol-4-amine	584-13-4	0,0	2,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isoxazole, 5-methyl-	5765-44-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, nitro-	2562-38-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Pyridinediamine	54-96-6	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Pyrimidinamine, 6-methyl-	3435-28-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propene, 3-azido-	821-13-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetrazolo[1,5-a]pyrazine	13349-87-6	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazole, 1,4-dimethyl-	6338-45-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-Methyl-4-pyridinamine	1121-58-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 1,2,5,6-tetrahydro-1,2-dimethyl-	15031-95-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Cyanoimidazole	57090-88-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyanamide, dibutyl-	2050-54-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8
1H-Imidazole, 1-methyl-	616-47-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptanonitrile	629-08-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	59,2	78,2	0,0	65,7	79,2	97,6	0,0
Butanenitrile, 4-(dimethylamino)-	13989-82-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzonitrile	100-47-0	44,0	57,2	38,7	33,3	34,5	45,4	19,8	17,9	21,5	20,4	19,6	20,6	20,2	6,7
1,6-Diazabicyclo[4.1.0]heptane	59204-83-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Tetrazole-1,5-diamine	2165-21-1	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetonitrile, (dimethylamino)-	926-64-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Cyanocyclohexene	100-45-8	0,0	0,0	7,1	0,0	16,9	47,4	9,5	12,0	6,5	10,3	0,0	10,5	0,0	0,0
1H-Imidazole, 4,5-dihydro-2-methyl-	534-26-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0
Acetamide, N,N'-ethylenebis(N-nitro-	922-89-4	0,0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4-Triazolo[4,3-a]pyridine, 3-methyl-	1004-65-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1-nitropropyl)-	5279-14-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, azido-	622-37-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,0	0,0	11,8	0,0
Octanenitrile	124-12-9	87,5	123,4	45,5	91,3	141,5	88,6	57,6	64,4	64,5	54,3	56,7	63,8	85,7	0,0
5-Dimethylamino-2-methyl-3-pentyn-2-ol	25400-83-3	0,0	0,0	0,0	6,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Aminocycanoacetamide	6719-21-7	1,8	2,7	0,0	0,0	0,7	0,6	0,0	0,0	0,4	0,0	0,4	1,0	0,0	0,8
Benzene, nitro-	98-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazol-4-amine, 3,5-dimethyl-	5272-86-6	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Methanamine, N-(phenylmethylene)-	622-29-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Imidazo[1,2-a]pyrimidine	274-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(1H)Pyrrole-3-carbonitrile, 2-methyl-	26187-27-9	0,0	0,0	6,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diazene, dimethyl-	503-28-6	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazole, 4-(2-propenyl)-	50995-98-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nitrosoadamantane	22734-10-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-Tetrazole, 2-methyl-	16681-78-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diethylamine, 1,1'-dimethyl-N-nitro-	4164-30-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0
2-Azetidinone, 3,3-dimethyl-	7486-91-1	0,0	0,0	0,0	0,0	7,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Tetrazole, 5-methyl-	4076-36-2	0,0	3,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Diazabicyclo[3.1.0]hexane	13090-31-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Formic acid hydrazide	624-84-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0
Tetracyanopyrrole	5231-17-4	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-methyl-1-nitro-	625-74-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7
1H-Pyrazole-1-carboximidamide, 3,5-dimethyl-	22906-75-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,7	1,9	1,2	0,3	0,5	0,0	0,6	0,0	0,0
Pyridine, 2,3,4,5-tetrahydro-	505-18-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyrazine, isopropenyl-	34413-32-6	0,0	0,8	0,6	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0
Formaldehyde, dimethylhydrazone	2035-89-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0
Pyrimidine, 5-formamido-	56621-84-2	0,0	0,0	0,0	5,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Quinoline	91-22-5	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	1,9	2,0	0,0	0,0	0,0	0,8	2,7	0,0	0,0
1H-Purine-6-carbonitrile	2036-13-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Decanenitrile	1975-78-6	28,8	30,9	0,0	0,0	23,9	0,0	0,0	7,5	4,4	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-S-Triazolo[1,5-a]pyridin-4-ium, 2-hydroxy-1-methyl-, hydroxide, inner salt	13980-64-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pyrrolidinone	616-45-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,9
Butanenitrile, 3-methyl-	625-28-5	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Azetidinone, 3,3,4,4-tetramethyl-	13423-22-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Indole	120-72-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1-nitroethyl)-	7214-61-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	1,2	0,0
2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	7223-38-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Organic Acids

Butanoic acid	107-92-6	331,6	301,3	176,2	222,1	316,2	338,7	169,9	160,7	130,9	115,5	98,6	188,3	200,0	142,4
Pentanoic acid	109-52-4	129,1	121,3	80,8	48,1	88,8	127,4	41,4	62,5	94,3	71,3	17,6	71,4	56,0	63,1
Butanoic acid, 2-methyl-	116-53-0	8,9	9,5	3,4	0,0	0,0	10,4	2,6	2,2	0,8	0,0	0,0	3,2	2,4	0,0
1-Pentyne, 3-methoxy-3-methyl-	22802-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,4	0,0
Heptanoic acid, 2-ethyl-	3274-29-1	0,0	4,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butynoic acid	590-93-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, 4-hydroxy-	591-81-1	0,0	0,0	0,0	15,2	0,0	0,0	31,0	9,1	8,0	10,1	0,0	16,6	0,0	13,5
Phenylpropionic acid	637-44-5	1,8	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,7	0,8	0,0	0,0	0,0
Formic acid	64-18-6	260,1	449,1	462,0	377,1	215,3	479,2	92,0	151,5	187,6	178,3	118,1	185,3	231,6	135,3
Acetic acid	64-19-7	731,3	705,5	313,8	639,3	672,7	740,3	597,7	526,1	341,9	441,0	399,7	443,2	484,2	687,8
Propanoic acid	79-09-4	404,0	370,1	311,4	272,9	416,2	371,7	196,8	172,0	38,3	147,9	122,9	196,9	209,1	130,8
Propanoic acid, 2-methyl-	79-31-2	111,8	136,2	78,6	50,1	76,5	103,3	36,6	43,9	47,1	51,3	34,4	61,0	48,8	44,2
1,2-Benzenedicarboxylic acid	88-99-3	0,0	32,0	12,8	12,4	0,0	14,6	8,4	0,0	0,0	0,0	7,9	20,8	10,1	0,0

Oxygen-containing compounds

2-Butanone, 3-methoxy-3-methyl-	36687-98-6	25,0	45,0	0,0	15,3	20,2	32,2	13,4	15,5	1,3	28,0	41,4	16,7	27,5	46,4
1,3-Dioxolane-2-methanol	5694-68-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Methyl-5H-furan-2-one	6124-79-4	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoic acid, 2-methoxy-, methyl ester	17639-76-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4,5-Tetroxane, 3,3,6,6-tetramethyl-	1073-91-2	0,0	0,0	8,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentanone, 1-(2-furanyl)-	3194-17-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2
Ethanone, 1-(2-furanyl)-	1192-62-7	2,9	8,3	2,6	3,6	3,7	3,5	1,5	1,3	1,1	0,0	3,2	0,0	1,3	16,1
Methacrylic anhydride	760-93-0	0,0	0,0	0,0	0,7	5,9	4,8	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	2,7	0,0
2H-Pyran-2-carboxaldehyde, 5,6-dihydro-	53897-26-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methyl glyoxal	78-98-8	0,0	3,2	0,0	0,0	8,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furfural	98-01-1	0,0	19,5	33,6	8,6	11,1	14,5	2,3	1,3	5,7	1,9	2,9	0,0	0,9	200,9
2H-Pyran-2,6(3H)-dione, dihydro-4,4-dimethyl-	4160-82-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7
Acetic acid, ethoxy-	627-03-2	18,2	8,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2-Pentanone, 5-hydroxy-	1071-73-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Acetyl-2,5-dimethyl furan	10599-70-9	10,2	11,9	0,0	8,1	10,5	13,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,9	8,4
3,3-Tetramethyleneglutaric anhydride	5662-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,2	0,0
2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-	620-02-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	2,7
1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)-	106-62-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8
Acetic acid, methoxy-, ethyl ester	3938-96-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	29,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isomaltol	3420-59-5	2,7	0,0	1,2	6,7	3,4	2,5	1,9	1,9	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0
3-Oxabicyclo[3.2.0]heptane-2,4-dione, cis-	118554-23-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Dimethyldihydrofuran-2,5-dione	7475-92-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzeneacetic acid, 4-methyl-a-oxo-	7163-50-0	29,4	22,0	13,3	16,9	19,9	18,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3',5'-Dihydroxyacetophenone	51863-60-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzoylformic acid	611-73-4	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanol, 2-phenoxy-	122-99-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	206,0
1,2-Ethanediol, monobenzoate	94-33-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 4-methoxy-	123-11-5	3,9	0,0	0,0	0,0	2,9	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,9
4-Hydroxy-3-methylacetophenone	876-02-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4

Sulfur-containing compounds

Carbonyl sulfide (*)	463-58-1	5,5	8,6	2,8	2,0	0,0	0,0	0,0	1,1	3,4	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimethyl sulfide	75-18-3	27,9	17,5	4,0	6,8	9,2	5,2	2,3	1,4	0,9	1,5	1,6	1,7	1,4	1,1
Carbon disulfide (*)	75-15-0	7,2	0,0	0,0	8,0	5,5	12,3	5,6	4,9	3,7	4,9	3,8	0,3	6,3	2,8
Disulfide, dimethyl	624-92-0	28,8	13,7	0,0	28,0	12,0	12,3	5,3	1,6	0,0	3,1	0,0	3,1	0,0	10,4
1-Propyne, 3-(ethenylthio)-	21916-66-5	0,8	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiophene, 2-methyl-	554-14-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiophene, 2-propyl-	1551-27-5	0,0	8,1	14,1	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,9	0,0
2-Methylthiolane, S,S-dioxide	1003-46-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimethyl sulfone	67-71-0	48,1	31,2	6,5	15,4	24,0	15,7	0,0	0,0	0,0	5,5	3,7	8,7	4,8	0,0
2-Methyl-2-tert-butyl-1,3-dithiane	37754-53-3	0,0	0,0	0,0	0,0	5,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiophene, 3-methyl-	616-44-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0
Methyl sec-butyl disulphide	67421-87-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Allyl dithioacetate	27249-83-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzothiazole	95-16-9	232,0	223,3	153,3	199,8	181,2	209,0	112,6	89,4	63,7	91,5	142,7	131,0	122,0	97,9

Terpenes

1,5-Dimethyl-1,4-cyclohexadiene	836559	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	28634-89-1	0,0	0,0	6,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)-	18172-67-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,9
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	2175-91-9	0,0	0,0	1076,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
α -Pinene	80-56-8	449,8	356,4	2157,5	796,4	277,1	378,2	183,7	171,6	81,8	210,2	129,5	127,4	126,3	530,1
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-5-methylene-	497-32-5	3,5	0,0	0,0	13,9	0,7	2,3	0,6	0,9	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	24,8
Bicyclo[2.2.1]heptane, 7,7-dimethyl-2-methylene-	471-84-1	17,9	18,1	0,0	30,5	10,6	14,8	0,0	0,0	0,7	8,7	3,6	2,5	2,5	64,7
Camphene	79-92-5	215,1	172,3	161,9	310,9	174,8	185,4	82,5	96,3	55,9	115,1	57,3	62,9	66,3	64,1
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2,3-trimethyl-, exo-	20536-41-8	0,0	0,0	10,1	4,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[4.1.0]heptane, 3,7,7-trimethyl-	554-59-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	34,8
β -Myrcene	123-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	34,2
β -Pinene	127-91-3	2,6	3,3	3,0	5,4	0,0	3,3	0,6	0,4	0,0	0,0	0,8	0,0	0,5	14,1
α -Phellandrene	99-83-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	89,6
1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	99-86-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	58,4
Limonene	138-86-3	108,1	150,9	96,2	148,9	92,6	152,5	157,7	60,8	37,0	58,2	71,5	31,0	46,6	564,6
o-Cymene	527-84-4	251,9	210,6	185,8	352,1	278,0	203,6	158,0	185,7	125,0	193,1	137,4	96,3	144,8	231,0
Eucalyptol	470-82-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	174,9
2-Carene	554-61-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	47,5
p-Cymene	99-87-6	24,7	32,0	48,9	19,3	21,9	18,5	14,3	8,2	8,9	8,2	15,4	9,3	11,0	8,3
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-	1195-32-0	175,2	161,5	98,2	327,8	197,2	95,7	129,5	49,8	59,5	73,0	62,2	43,3	69,6	239,5
Camphor	76-22-2	83,8	81,1	42,6	52,9	55,1	57,6	27,1	27,8	26,5	36,4	28,3	22,6	26,1	122,2

Heterogroups

Acetamide, 2-fluoro-	640-19-7	0,0	1,1	1,2	0,0	1,1	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Tetrazol-2-ylethanone	51410-11-8	80,0	0,0	5,0	37,8	39,9	51,9	20,4	24,8	0,0	26,2	0,0	0,0	21,3	0,0



Benzyl alcohol, a-(1-(dimethylamino)ethyl)-	17605-71-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propenamide	79-06-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
o-Allylhydroxylamine	6542-54-7	0,0	0,0	8,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitric acid, ethyl ester	625-58-1	0,0	0,0	0,0	0,8	0,3	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0
N-Ethyl-2-isopropoxycarbonylazetidine	54773-06-7	5,4	0,0	5,3	9,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	1,9	0,0	2,4	164,0
Trioxide, bis(trifluoromethyl)	1718-18-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Dioxin, 2,3-dihydro-	543-75-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4
Isopropylsulfonyl chloride	10147-37-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	56,6
2-Ethylthiolane, S,S-dioxide	10178-59-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0
Acetic acid, nitro-, methyl ester	2483-57-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phosphorocyanidous difluoride	14118-40-2	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Pyridinol	109-00-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, [(1,1-dimethylethyl)thio]-	24310-22-3	19,4	21,1	29,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,0	0,0	7,1	0,0	0,0
3-Ethoxyacrylonitrile	61310-53-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetamide, 2-cyano-	107-91-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Carboxy-N-methylpyrrolidine	30727-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Amino-6-hydroxypyrimidine	1193-22-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0
p-Fluoroaniline	371-40-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
6-Oxabicyclo[3.1.0]hexane	285-67-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-n-Butoxy-2,3-dimethyldiaziridine	343928-70-1	0,0	0,0	73,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
anti-2-Acetoxyacetaldoxime	37858-07-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropanecarboxylic acid, 1-amino-	22059-21-8	0,9	2,6	0,0	0,8	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Isoxazolidine	504-72-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanenitrile, 3,3'-oxybis-	1656-48-0	2,4	0,0	0,0	0,0	3,4	3,6	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	4,5
4(1H)-Pyridone	108-96-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Chloromethyl chloroacetate	6135-23-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
α-Amino-γ-butyrolactone	1192-20-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetaldoxime	107-29-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butene-1,2-diol, 1-(2-furanyl)-	19261-13-3	0,0	3,3	33,3	0,0	0,0	0,0	1,4	1,5	0,0	2,2	16,7	7,7	0,0	3,1
2-Fluoropyridine	372-48-5	0,0	3,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Dinocap	39300-45-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,2-Dimethyl-propyl 2,2-dimethyl-propanesulfinyl sulfone	82360-14-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 2-chloro-6-(2-furanylmethoxy)-4-(trichloromethyl)-	70166-48-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	43,2
4-Pyridinol	626-64-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Buten-2-one, 4-(1-aziridinyl)-	18277-57-1	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetamide, 2-chloro-, N-(2-propynyl)-	2030087	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-(2-Thienyl)-1-propanone	13679-75-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Endo-3-acetamidocamphor	3750-49-0	0,6	1,5	0,0	0,0	1,0	3,0	0,0	0,0	0,3	1,7	0,0	1,0	0,5	0,0
5-Methyl-2-thiophenecarboxaldehyde	13679-70-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propanol, 2,2-dimethyl-, nitrate	926-42-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0
Methane, isocyanato-	624-83-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,6	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methyl-3-thiosemicarbazide	21185-13-7	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Urea, ethyl-	625-52-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-yl-ethanol	13080-91-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanecarboxylic acid chloride	5006-22-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, hydrazide	1068-57-1	12,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Binapacryl	485-31-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,5-Oxadiazole	288-37-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Indane	496-11-7	10,0	12,3	42,6	12,2	41,2	18,7	6,4	6,1	5,8	2,0	8,9	6,6	5,3	36,1
Formamide, N-(cyanomethyl)-	5018-27-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Carbamoylmethyl-1,2-thiazolidine, 1,1-dioxide	63459-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6
Phosphorodiamidous fluoride, tetramethyl-	1735-82-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Ethyl-6-phenyl-1,3,4-thiadiazolo(3,2-a)(1,3,5)-triazine-5,7-dione	69378-04-7	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Tolyloxirane	2783-26-8	0,0	0,0	29,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,5-Furandione, 3-methyl-	616-02-4	0,0	7,6	9,5	2,9	4,4	0,0	0,0	6,1	0,0	0,0	5,8	8,1	5,3	5,4
Ethanone, 1-(3-ethyloxiranyl)-	17257-81-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiazole, 2-methyl-	3581-87-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,3-dichloro-	541-73-1	8,6	11,5	0,0	9,5	0,0	0,0	0,0	4,2	4,7	4,1	5,1	4,4	0,0	0,0
1H-Pyrazole, 5-methoxy-1,3-dimethyl-	53091-80-8	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	13980-04-6	2,7	0,0	1,4	0,0	0,0	3,3	1,3	1,3	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0
Acetamide, N-2-propynyl-	65881-41-6	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrrole-2,5-dione	541-59-3	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-(Dimethylthiophosphinyl)methylamine	42452-13-1	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxirane, 2-methyl-2-phenyl-	2085-88-3	0,0	0,0	79,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phosphonic acid, (p-hydroxyphenyl)-	33795-18-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,0	0,0	0,0
3-Methyl-1-[(1H)-1,2,4-triazol-1-yl]butan-2-one	64922-02-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Furanmethanamine	617-89-0	0,0	0,0	2,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Acetyl-5-methylfuran	1193-79-9	11,4	15,2	6,4	11,3	14,3	13,1	5,2	4,9	3,4	6,2	4,4	5,3	7,8	3,1
Benzene, 2-methoxy-1-(2-nitroethenyl)-3-(phenylmethoxy)-	74810-83-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(4-fluorophenyl)-	403-42-9	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxazole	288-42-6	0,0	0,0	0,0	0,0	10,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethaneperoxoic acid, 1-cyano-1-[2-(2-phenyl-1,3-dioxolan-2-yl)ethyl]pentyl ester	58422-92-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Chloropropionamide	27816-36-0	0,0	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiodiglycolic anhydride	3261-87-8	0,0	0,6	2,3	5,5	0,7	0,0	4,5	3,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanamine, N-sulfinyl-	13165-70-3	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	824-22-6	24,6	59,0	0,0	15,8	22,0	0,0	19,1	8,6	10,0	13,6	0,0	28,9	0,0	11,3
Diethylpropion	90-84-6	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nitro-2-propanone	10230-68-9	0,0	0,0	5,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methylindene	2177-47-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0
4'-Methylpropiophenone	5337-93-9	4,0	8,4	4,8	4,0	0,0	3,1	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	2,5
2,3-Dimethyl-4-hydroxy-2-butenic lactone	1575-46-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Oxa-3,4-diazacyclopentadiene	288-99-3	0,0	7,7	5,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	3,4	0,0
Carbonocyanidic amide, (trifluoromethyl)-	70856-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0
Propanenitrile, 2-hydroxy-	78-97-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1-dimethyl-	4912-92-9	0,0	16,0	9,7	0,0	0,0	3,5	0,0	2,0	1,8	3,7	6,2	2,9	0,0	2,7
N,N'-Bis(2,6-dimethyl-6-nitrosohept-2-en-4-one)	66737-12-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,6-dimethyl-	17059-48-2	0,0	17,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0
2'-Ethylpropiophenone	16819-79-7	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2(1H)-Naphthalenone, 3,4-dihydro-	530-93-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzenehexanenitrile, β,β -dimethyl-e-oxo-	62623-62-5	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 4-(4-methylbenzyloxy)-	66742-58-3	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allophanic acid, phenyl ester	49615-54-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
O-Ethyl methylphosphonothioate	18005-40-8	0,0	0,0	0,0	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzoyl benzyl disulfide	51840-31-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanethioic acid, S-(2-methylbutyl) ester	69078-80-4	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzonitrile, 3-ethoxy-	25117-75-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	6682-71-9	0,0	29,9	0,0	11,0	6,7	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	11,9	7,7	0,0	0,0
Phenyl tert-butyl ketone	938-16-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzylcyclobutane	5244-88-2	11,4	45,1	25,9	6,9	5,9	4,0	2,9	0,0	2,6	4,8	22,5	13,0	7,2	5,3
Acetamide, 2,2,2-trifluoro-	354-38-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
α -(Aminomethylene)glutaconic anhydride	67598-07-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,6-trimethyl-	14276-95-0	0,0	14,8	3,6	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	3,6	1,7	0,0	2,6
Butyl isocyanatoacetate	17046-22-9	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Benzoyl-2-t-butyl-4-isopropylloxazolidin-5-one	104057-68-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Urea	57-13-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5-methyl-	2809-64-5	5,9	19,9	7,7	0,0	4,1	3,7	1,2	0,0	0,0	1,9	8,2	3,5	0,0	3,1
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl-	2613-76-5	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzophenone	119-61-9	0,2	0,0	3,4	5,1	3,9	0,0	0,0	1,7	1,6	1,4	0,0	0,2	0,0	1,2
Isothiazole	288-16-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,5-Dithioxo-2,3,4,5-tetrahydro-1,2,4-triazine	461-90-5	5,9	0,0	0,0	2,2	17,6	16,0	0,0	4,4	0,8	0,2	5,5	13,5	11,6	0,0
Dimethylphosphinic fluoride	753-70-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	1,3	1,1	1,6	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 1-ethylidene-	2471-83-2	0,0	28,7	11,7	21,2	15,6	12,5	6,6	3,1	3,1	0,0	16,2	7,4	6,0	10,0
Naphthalene, 5-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro-	42775-75-7	0,0	4,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,8	0,0	0,0

(*) The concentration of this compound can not be determined accurately

The concentrations indicated as 0,0 don't exceed 0.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$



Anexo D Resultados de cuantificación de COV's para puntos de medición en la zona de Son Reus

Compound	CAS No.	µg/m³								
		PPI 1	PPI 2	PPI 3	PPI 4	PPI 5	PPI 6	PPI 7	PPI 8	PPI 9
Alcohols										
Methyl Alcohol (*)	67-56-1	362,2	224,6	158,3	149,3	170,3	111,2	110,3	99,5	85,7
Ethanol	64-17-5	128,9	90,5	131,4	126,4	27,7	95,6	103,5	99,2	100,5
Isopropyl Alcohol	67-63-0	22,1	31,2	20,6	21,2	31,9	19,9	25,2	16,4	16,1
2-Propanol, 2-methyl-	75-65-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,0	0,0	10,4
1-Propanol	71-23-8	4,7	5,6	8,9	6,7	15,1	7,6	6,6	10,5	9,3
Propylene Glycol	57-55-6	0,0	5,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propanol, 2-methyl-	78-83-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,1	0,0
1-Butanol	71-36-3	59,2	48,3	35,3	43,9	72,7	79,5	45,6	47,2	81,3
2-Butanol	78-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pentanol	6032-29-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Methyl-1,6-heptadien-4-ol	25201-40-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propargyl alcohol	107-19-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,0	19,8	18,9	21,9
Cyclobutanol, 2-ethyl-	35301-43-0	0,0	0,0	0,0	102,7	0,0	0,0	0,0	0,0	19,7
2-Undecen-4-ol	22381-86-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butyn-2-ol	2028-63-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexanol	111-27-3	207,1	199,0	237,1	323,6	239,5	223,1	239,4	197,0	220,3
3-Octyn-2-ol	41746-22-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene-	543-39-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butyn-2-ol, 2-methyl-	115-19-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Allyl-1,6-heptadiene-4-ol	10202-75-2	1,0	2,5	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Heptanol	111-70-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,3,4-Trimethyl-1-pentanol	6570-88-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	0,0	0,0



2-Propen-1-ol	107-18-6	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexanol, 2-ethyl-	104-76-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,3,4-Trimethyl-5-hexen-3-ol	28638-29-1	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Buten-2-ol	598-32-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Buten-1-ol, (Z)-	4088-60-2	0,0	7,0	0,0	0,0	5,2	9,0	5,3	8,9	0,0
1-Hexyn-3-ol	105-31-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclobutanediol, 2,2,4,4-tetramethyl-	3010-96-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nonanol	143-08-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Levomenthol	2216-51-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Aldehydes

Acetaldehyde (*)	75-07-0	137,1	141,6	209,5	184,7	191,6	158,7	149,6	186,6	0,0
2-Propenal	107-02-8	0,0	0,0	33,2	0,0	21,3	18,5	20,4	21,2	29,9
Propanal	123-38-6	58,7	85,1	67,8	79,8	90,2	88,6	88,4	87,2	80,6
Propanal, 2-methyl-	78-84-2	0,0	0,0	0,0	0,0	22,9	0,0	18,3	18,0	0,0
Methacrolein	78-85-3	12,4	8,8	10,2	7,7	14,9	12,8	10,8	13,3	15,9
Butanal	123-72-8	156,4	159,8	151,4	113,4	174,8	187,9	172,0	182,6	178,7
Pentanal	110-62-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	156,7	157,6	129,2	159,4
Hexanal, 3-methyl-	19269-28-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butenal, 2-methyl-	1115-11-3	0,0	7,7	16,8	45,9	0,0	26,0	23,4	0,0	26,7
Hexanal	66-25-1	0,0	75,0	0,0	102,7	0,0	126,1	88,2	142,6	100,7
2-Butenal, (Z)-	15798-64-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pent-2-ynal	55136-52-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptanal	111-71-7	42,6	70,4	17,1	80,8	59,2	74,4	72,9	72,2	90,6
2-Heptenal, 2-methyl-	30567-26-1	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexanal, 2-ethyl-	123-05-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butenal, (E)-	123-73-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0
Benzaldehyde	100-52-7	212,3	262,1	252,6	241,8	281,6	277,4	374,1	294,1	313,5
Benzeneacetaldehyde, a-methyl-	93-53-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,9	0,0	0,0	0,0
Octanal	124-13-0	41,6	89,3	20,4	117,1	79,9	116,5	74,2	156,7	118,1



Cyclopentanecarboxaldehyde	872-53-7	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 2-methyl-	529-20-4	15,8	19,3	24,8	20,1	22,0	23,2	23,7	26,8	26,7
Nonanal	124-19-6	40,1	82,7	24,8	105,2	0,0	85,4	60,8	130,5	67,1

Aliphatic Hydrocarbons

Propene	115-07-1	107,9	120,8	140,2	118,9	171,6	111,7	149,7	87,5	107,4
Ethane	74-84-0	0,0	0,0	0,0	14,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allene	463-49-0	0,3	0,0	0,6	0,1	0,5	0,0	0,0	0,2	0,4
Isobutane	75-28-5	18,0	11,4	8,4	8,2	6,2	9,0	0,0	4,5	0,0
1-Propene, 2-methyl-	115-11-7	294,9	247,2	320,6	463,6	279,1	241,0	247,2	206,1	221,6
1,3-Butadiene	106-99-0	5,7	7,4	7,7	6,0	12,3	9,3	7,5	9,3	6,3
2-Butene	107-01-7	22,9	24,9	30,8	25,8	28,3	26,5	22,9	22,9	25,2
1-Butene, 3-methyl-	563-45-1	6,4	5,8	8,2	7,0	6,1	4,5	4,5	4,1	4,6
Butane, 2-methyl-	78-78-4	534,6	386,0	353,7	560,1	393,1	250,2	269,1	261,4	224,5
1,4-Pentadiene	591-93-5	0,0	0,6	0,7	0,6	1,4	0,9	0,9	0,8	0,9
Pentane	109-66-0	429,5	355,0	359,3	506,5	338,3	259,0	278,0	264,2	232,7
2-Methyl-1-butene	563-46-2	43,0	59,3	68,8	106,5	79,8	69,2	64,7	63,1	75,9
2-Pentene, (Z)-	627-20-3	93,7	73,9	89,0	185,4	83,5	71,5	61,6	61,7	65,1
2-Pentene, (E)-	646-04-8	135,3	84,0	119,0	287,7	127,0	83,2	79,9	75,7	82,6
Butane, 2,2-dimethyl-	75-83-2	352,8	155,8	179,7	507,4	128,8	126,6	99,3	91,7	95,7
1,3-Pentadiene, (E)-	2004-70-8	6,9	0,0	7,2	0,0	0,0	11,9	11,5	15,1	10,9
Pentane, 3-methylene-	760-21-4	11,4	6,4	9,3	0,0	7,9	7,6	6,0	6,0	6,7
Butane, 2,3-dimethyl-	79-29-8	197,6	77,8	146,2	285,5	85,0	76,6	0,0	61,1	56,3
Pentane, 2-methyl-	107-83-5	526,4	407,9	543,7	669,8	437,8	404,4	256,5	367,8	330,0
2-Pentene, 4-methyl-	4461-48-7	56,6	12,6	44,1	20,7	34,8	11,1	16,5	9,3	12,5
Pentane, 3-methyl-	96-14-0	420,4	274,9	363,3	711,6	292,6	267,7	229,6	224,5	209,5
1,5-Hexadiene	592-42-7	0,0	0,6	0,7	0,0	2,0	1,8	1,3	1,8	1,6
1-Hexene	592-41-6	0,0	199,0	237,1	323,6	0,0	223,1	0,0	0,0	220,3
n-Hexane	110-54-3	388,4	302,6	332,2	491,7	283,3	243,2	216,8	215,3	205,2
1-Pentene, 3-methyl-	760-20-3	36,6	61,6	96,6	218,1	41,5	34,5	0,0	60,2	0,0



2-Hexene	592-43-8	133,1	75,0	126,2	267,5	89,3	85,0	70,8	72,9	76,4
Cyclopropane, 1,1,2-trimethyl-	4127-45-1	78,1	12,8	54,6	177,6	18,1	33,3	21,3	13,7	18,2
1-Pentene, 4,4-dimethyl-	762-62-9	96,4	36,9	55,3	181,6	51,0	0,0	2,1	33,6	35,3
3-Hexene, (E)-	13269-52-8	52,3	39,4	49,5	122,9	34,7	46,7	38,2	32,8	39,8
(Z),(Z)-2,4-Hexadiene	6108-61-8	19,6	9,3	27,9	23,1	23,1	11,2	9,4	15,8	12,8
1-Butyne, 3-methyl-	598-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pentene, 3-methyl-, (E)-	616-12-6	84,2	27,5	50,2	178,2	55,4	42,4	36,8	0,0	36,0
Pentane, 2,2-dimethyl-	590-35-2	68,9	22,1	59,6	160,1	22,4	21,8	14,8	16,2	11,3
3-Hexyne	928-49-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2-Butadiene	590-19-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butene, 3,3-dimethyl-	558-37-2	0,0	0,0	0,0	24,8	7,2	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Hexadiene	592-45-0	4,4	0,0	4,7	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0
1,3-Pentadiene, 2-methyl-, (E)-	926-54-5	8,2	6,8	9,8	14,7	8,5	8,4	7,9	0,9	8,1
Pentane, 3,3-dimethyl-	562-49-2	34,2	14,1	45,2	172,3	17,0	13,5	11,3	15,2	7,3
1-Pentene, 3,3-dimethyl-	3404-73-7	0,0	0,0	2,6	5,5	1,4	0,0	2,4	3,0	2,9
Hexane, 2-methyl-	591-76-4	256,4	242,6	345,6	582,4	252,7	227,9	196,2	197,5	155,4
Pentane, 2,3-dimethyl-	565-59-3	142,1	0,0	148,5	0,0	63,8	57,3	0,0	1,9	29,0
Hexane, 3-methyl-	589-34-4	452,3	297,4	388,1	610,0	245,3	252,6	222,3	207,2	177,3
1,4-Hexadiene, 4-methyl-	1116-90-1	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Hexadiyne	628-16-0	0,0	0,0	0,0	82,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentane, 2,2,4-trimethyl-	540-84-1	373,8	204,0	250,4	703,6	205,4	224,8	217,7	213,9	219,2
1-Pentene, 2,4-dimethyl-	2213-32-3	0,0	0,0	23,1	0,0	0,0	0,0	24,6	0,0	0,0
1-Heptene	592-76-7	0,0	0,0	111,6	0,0	191,0	143,7	156,1	195,3	182,6
Heptane	142-82-5	421,5	303,4	291,4	610,0	245,3	252,6	222,3	207,2	177,3
3-Heptene	592-78-9	6,8	4,6	18,4	31,4	13,2	14,4	30,0	12,4	7,6
2-Heptene	592-77-8	4,1	7,1	17,5	0,0	9,9	8,2	8,1	22,2	0,0
2-Heptene, (E)-	14686-13-6	60,7	0,0	0,0	0,0	0,0	50,4	55,3	48,0	50,8
3-Heptene, (E)-	14686-14-7	0,0	0,0	38,7	78,1	32,5	0,0	0,0	0,0	0,0
(Z)-3-Heptene	2097503	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,2	0,0	0,0	0,0
1-Pentene, 2,4,4-trimethyl-	107-39-1	13,5	14,3	16,9	13,4	0,0	14,3	0,0	12,4	14,4



2-Butene, (E)-	624-64-6	0,0	0,0	77,9	130,5	48,4	0,0	0,0	55,2	0,0
1-Hexyne, 5-methyl-	2203-80-7	0,0	0,0	0,0	1,7	7,2	7,7	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,5-dimethyl-	592-13-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,9
Hexane, 2,4-dimethyl-	589-43-5	121,8	67,5	0,0	285,6	62,6	0,0	29,8	42,3	0,0
1,4-Heptadiene	5675-22-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,9	4,3	7,9
Hexane, 3,3-dimethyl-	563-16-6	13,9	4,7	7,4	24,5	4,2	0,0	0,0	3,4	0,0
2-Pentyne, 4,4-dimethyl-	999-78-0	0,0	0,0	5,3	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	2,5
2-Heptyne	1119-65-9	11,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8	0,0
Pentane, 2,3,4-trimethyl-	565-75-3	91,4	80,1	208,2	421,0	136,5	124,6	95,2	89,8	68,3
3-Hexyne, 2-methyl-	36566-80-0	115,0	89,9	215,3	348,8	143,6	176,2	108,1	93,1	58,0
Heptane, 2-methyl-	592-27-8	323,7	216,7	164,9	228,3	92,6	76,8	68,9	72,1	60,3
Heptane, 4-methyl-	589-53-7	130,2	72,2	45,9	67,2	26,5	20,0	16,2	18,0	15,0
Heptane, 3-methyl-	589-81-1	342,0	195,0	178,5	318,2	110,5	86,2	83,5	73,3	73,7
Hexane, 3-ethyl-	619-99-8	0,0	34,7	0,0	53,1	0,0	10,1	0,0	0,0	8,9
1,4-Hexadiene, 2,3-dimethyl-	18669-52-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Heptadien-3-yne	3511-27-1	374,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane	111-65-9	289,8	220,5	140,1	178,3	136,9	104,8	117,6	109,2	80,3
Heptane, 3-methylene-	1632-16-2	0,0	14,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Octene, (E)-	14850-23-8	6,4	0,0	25,5	8,3	26,9	33,7	40,8	42,5	44,3
2-Hexene, 3,5-dimethyl-	3404-79-3	0,0	0,0	0,0	0,0	11,2	0,0	0,0	0,0	14,8
2-Octene	111-67-1	96,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptane, 2,4-dimethyl-	2213-23-2	0,0	76,9	62,6	60,3	59,3	57,0	59,3	0,0	53,3
1-Octen-3-yne	17679-92-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,4
2-Hexene, 3,5,5-trimethyl-	26456-76-8	1,3	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Heptadiene	1541-23-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,5-Dimethyl-3-heptene	59643-68-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Octadiene	1002-33-1	0,0	0,0	0,0	0,0	5,5	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,3-dimethyl-	584-94-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Ethyl-2-hexene	620-00-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,4-Dimethyl-1-heptene	19549-87-2	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0	37,9	16,6



1,4-Heptadiene, 3-methyl-	1603-01-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,3-Dimethyl-1-hexene	16746-86-4	0,0	0,0	10,6	0,0	0,0	16,1	0,0	0,0	15,3
3-Heptyne, 5-methyl-	61228-09-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 3-ethyl-2-methyl-	16789-46-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 2,3,5-trimethyl-	1069-53-0	90,3	0,0	0,0	0,0	0,0	48,2	0,0	31,4	0,0
Pentane, 3,3-diethyl-	1067-20-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 4-methyl-	2216-34-4	184,8	127,7	73,3	109,5	32,2	45,8	0,0	0,0	0,0
Undecane, 6-methyl-	17302-33-9	237,1	140,7	75,2	84,8	50,6	44,7	41,7	37,6	51,9
1,3-Butadiene, 2-methyl-	78-79-5	6,9	7,0	7,2	6,2	21,9	11,9	11,5	15,1	25,2
3-Heptene, 4-ethyl-	33933-74-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nonene	124-11-8	160,4	173,7	129,1	164,9	251,7	271,6	233,3	268,4	258,5
Nonane	111-84-2	208,6	160,9	53,5	45,8	84,9	0,0	0,0	0,0	63,7
2,3-Dimethyl-2-heptene	3074-64-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,1	8,3	12,2
(Z)-4-Methyl-2-hexene	3683-19-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	1,7
Pentane, 2,2,4,4-tetramethyl-	1070-87-7	8,9	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,7	2,7
4-Nonene	2198-23-4	0,0	1,2	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	10,3
Hexane, 2,4,4-trimethyl-	16747-30-1	45,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,7-Octadiene, 2,7-dimethyl-	59840-10-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
R(-)-3,7-Dimethyl-1,6-octadiene	10281-56-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Octene, 2,6-dimethyl-	6874-29-9	9,9	0,0	2,3	0,0	7,8	0,0	0,0	0,0	9,5
Octane, 3-ethyl-	5881-17-4	0,0	9,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nonane, 4-methyl-	17301-94-9	81,7	25,6	0,0	0,0	9,9	0,0	10,5	0,0	0,0
Nonane, 2-methyl-	871-83-0	70,0	24,3	0,0	2,4	10,3	7,8	0,0	7,1	3,6
Octane, 2,6-dimethyl-	2051-30-1	91,9	44,5	13,4	19,3	25,5	25,2	20,9	22,5	27,6
1-Decene	872-05-9	0,0	0,0	35,1	84,3	111,0	153,4	0,0	157,6	158,9
Decane	124-18-5	302,4	277,0	121,1	232,0	283,0	282,0	271,4	281,6	268,4
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	13475-82-6	30,3	56,0	0,0	16,4	77,7	78,4	64,9	67,3	65,5
2-Butene, 2-methyl-	513-35-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Octene, 2,6-dimethyl-, [S-(Z)]-	62960-77-4	0,0	3,7	2,4	2,1	1,1	3,7	0,0	3,4	0,0
Octane, 3,3-dimethyl-	4110-44-5	64,0	40,3	0,0	0,0	18,2	0,0	0,0	0,0	0,0



Hexane, 3,3,4,4-tetramethyl-	5171-84-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexene, 4-methyl-	3769-23-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptane, 4-ethyl-	2216-32-2	10,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 4,7-dimethyl-	17301-32-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decane, 2,6,7-trimethyl-	62108-25-2	24,7	25,7	0,0	0,0	48,5	0,0	44,4	27,3	28,8
2-Decene, 2,4-dimethyl-	74421-03-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 6-ethyl-2-methyl-	62016-19-7	27,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 2,3-dimethyl-	7146-60-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	26,5	0,0	0,0	0,0
1-Undecene	821-95-4	58,1	98,0	0,0	93,6	118,3	177,3	105,6	167,8	143,1
Undecane	1120-21-4	324,5	242,5	0,0	111,8	332,6	216,1	382,0	177,4	227,4
Octane, 2-methyl-	3221-61-2	9,8	0,0	0,0	0,0	15,6	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-propynyl-	673-32-5	0,0	0,0	4,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4,4-Dipropylheptane	17312-72-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 3-methyl-	1002-43-3	93,0	152,9	4,9	60,9	149,1	272,9	223,3	189,4	188,9
Heptane, 4-(1-methylethyl)-	52896-87-4	0,0	2,1	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	3,8	3,8
1-Dodecene	112-41-4	69,2	0,0	0,0	0,0	83,8	150,7	180,1	170,3	197,6
Dodecane	112-40-3	409,8	431,6	228,6	373,7	439,2	486,3	618,8	540,3	620,9
6-Dodecene, (E)-	7206-17-9	0,0	0,0	0,0	15,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Hexene, 3-methyl-	3404-61-3	4,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 2-methyl-	7045-71-8	0,0	31,3	0,0	0,0	40,2	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentene, 3-ethyl-2-methyl-	19780-66-6	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0
Undecane, 4,4-dimethyl-	17312-68-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Dodecene, (Z)-	7239-23-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decane, 3-ethyl-3-methyl-	17312-66-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	33,0	0,0
Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8	0,0	2,4	0,0	0,0	2,9	3,8	3,4	4,3	2,9
1-Tridecene	2437-56-1	0,0	11,2	0,0	12,8	0,0	0,0	12,5	16,3	0,0
Tridecane	629-50-5	101,4	146,1	20,6	146,0	207,9	116,6	349,5	202,4	274,4
2-Heptene, 2,6-dimethyl-	5557-98-2	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nonane, 4-methylene-	33717-91-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9
Decane, 3,6-dimethyl-	17312-53-7	21,2	0,0	0,0	0,0	48,3	6,0	0,0	0,0	0,0



Undecane, 2,4-dimethyl-	17312-80-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,8	0,0	0,0
Tridecane, 3-methyl-	6418-41-3	118,7	205,3	11,1	122,2	181,3	196,7	296,4	290,5	228,0
1-Tetradecene	1120-36-1	22,3	45,9	0,0	0,0	26,5	30,4	70,1	0,0	37,8
Tetradecane	629-59-4	163,3	341,9	178,5	576,5	222,3	309,2	339,6	706,4	322,8
2,4-Heptadiene, (E,E)-	2384-94-3	0,0	0,0	0,0	0,0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0
Tridecane, 2-methyl-	1560-96-9	12,4	25,0	0,0	0,0	0,0	20,5	49,9	33,2	0,0
2,4-Dimethyl 1,4-pentadiene	4161-65-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 3-methyl-	2216-33-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Octadiyne	764-74-9	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octane, 2,7-dimethyl-	1072-16-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,0
Octadecane	593-45-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	23,6	0,0	0,0	0,0
Decane, 2,5,9-trimethyl-	62108-22-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentadecane	629-62-9	300,1	333,7	411,4	66,1	437,1	159,4	197,2	209,1	180,7
Pentadecane, 3-methyl-	2882-96-4	55,3	139,1	0,3	551,2	129,5	266,1	118,6	942,6	163,7
Hexadecane	544-76-3	54,3	307,7	50,1	387,3	111,2	242,5	56,7	596,9	152,7

Amines

Dimethylamine	124-40-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	16,9	0,0
3-Aminocrotononitrile	1118-61-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butyn-2-amine, 2-methyl-	2978-58-7	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propen-1-amine, 2-methyl-	2878-14-0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentyn-3-amine, 3-methyl-	18369-96-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0
Cyclobutylamine	2516-34-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0	0,0
1,2-Ethanediamine, N,N-diethyl-N'-methyl-	104-79-0	0,0	0,0	0,0	6,3	0,0	4,8	0,0	0,0	7,3
Methanamine, N-butylidene-	6898-69-7	0,0	0,0	0,0	0,0	3,5	0,0	0,0	0,0	0,0
N-(1,1-Dimethyl-2-propynyl)-N,N-dimethylamine	19788-24-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-Benzyl-2-phenethylamine	3647-71-0	0,0	0,0	8,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propanamine	75-31-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0
Aziridine, 1-propyl-	5536-98-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Aziridine, 2-methyl-	75-55-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Hydroxylamine, O-(phenylmethyl)-	622-33-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Azabicyclo[3.1.0]hexane	285-76-7	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Aromatic Alcohol

Phenol, 3-methyl-	108-39-4	0,0	0,0	0,0	0,0	5,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol, 3,5-dimethyl-	108-68-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol, 2-ethyl-	90-00-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol	108-95-2	0,5	0,0	0,5	0,0	16,3	19,1	0,0	20,6	42,1
Benzyl alcohol	100-51-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
p-Cresol	106-44-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenol, 3,4-dimethyl-	95-65-8	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	1,9	0,0	0,0	3,0

Aromatic compounds

Benzene	71-43-2	207,3	166,4	181,4	200,1	189,0	171,4	154,7	151,7	156,4
Toluene	108-88-3	275,6	349,5	558,2	766,6	497,8	363,2	344,7	432,4	338,6
Ethylbenzene	100-41-4	310,8	301,4	287,7	490,6	315,6	340,2	431,2	272,5	187,6
p,m-Xylene	106-42-3/108-38-3	336,8	498,0	671,7	568,9	761,9	474,5	297,3	428,5	409,2
o-Xylene	95-47-6	0,0	0,0	259,1	216,7	165,0	173,5	217,3	213,3	201,2
Styrene	100-42-5	167,9	138,9	142,5	72,8	81,2	78,1	195,3	192,9	193,2
Benzene, (1-methylethyl)-	98-82-8	90,4	100,0	64,5	71,2	54,1	54,9	62,7	41,2	59,1
Benzene, 1-propenyl-	637-50-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,5	14,1	10,7	13,1
Benzene, propyl-	103-65-1	142,3	113,0	104,9	160,4	109,6	110,2	112,2	111,4	108,3
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	622-96-8	281,3	281,4	202,0	292,9	217,1	203,2	180,6	180,3	185,0
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	95-63-6	175,6	132,6	158,9	250,8	131,7	129,1	132,4	106,4	107,4
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	191,6	129,5	131,0	190,9	125,7	118,7	106,3	88,5	97,6
a-Methylstyrene	98-83-9	23,2	27,8	16,7	15,6	29,4	24,3	9,3	27,5	30,9
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	324,5	266,2	244,6	371,8	271,4	270,0	253,9	250,4	252,2
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	622-97-9	0,0	2,7	0,0	0,0	0,0	2,9	0,0	0,0	0,0
Benzene, (2-methylpropyl)-	538-93-2	148,3	109,7	74,9	157,7	115,3	90,0	98,8	80,4	79,3



Benzene, (1-methylpropyl)-	135-98-8	45,1	21,9	7,1	8,0	13,7	0,0	12,6	11,7	0,0
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	61141-97-7	0,0	0,0	0,0	10,6	7,3	13,1	0,0	14,8	7,7
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	36,0	22,6	10,9	25,3	19,2	15,1	14,6	13,6	15,8
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4	0,0	117,5	70,2	138,0	102,8	85,4	87,2	72,3	68,0
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	934-74-7	182,6	53,2	35,3	0,0	55,7	51,0	48,9	54,2	43,0
Benzene, butyl-	104-51-8	29,3	15,6	0,0	9,3	1,7	0,0	1,7	0,0	16,6
Benzene, 1,2-diethyl-	135-01-3	11,6	0,0	0,0	4,3	3,0	1,9	3,8	0,0	0,0
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	766-97-2	9,5	8,7	0,0	6,3	7,0	5,2	5,5	5,2	0,0
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	43,2	22,5	5,6	12,0	20,4	15,5	20,2	11,5	12,9
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	1758-88-9	46,4	29,1	11,5	32,7	26,5	19,4	23,7	17,7	18,4
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	768-49-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,4	10,4	12,2
2,4-Dimethylstyrene	2234-20-0	77,8	56,7	18,6	58,0	55,6	35,3	50,5	39,3	40,2
Benzene, (1,1-dimethylpropyl)-	2049-95-8	19,8	8,7	10,3	3,8	6,6	4,2	23,6	17,6	4,0
Naphthalene, decahydro-, cis-	493-01-6	17,8	0,0	6,7	0,0	0,0	0,0	20,9	0,0	0,0
Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	874-41-9	15,6	12,6	9,2	4,8	6,4	3,5	8,8	0,0	9,4
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	527-53-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	45,5	0,0	0,0
Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	488-23-3	92,8	79,7	15,5	85,8	90,2	69,6	72,4	77,9	57,1
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	535-77-3	0,0	38,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	1595-16-0	13,5	0,0	1,1	3,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methyl-4-butyl	1595-05-7	13,7	8,6	1,1	3,2	9,1	5,4	10,4	4,5	4,8
Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	27831-13-6	49,5	40,5	0,0	15,9	48,7	26,2	0,0	14,2	16,3
Benzene, (1,2-dimethylpropyl)-	4481-30-5	7,2	4,4	0,6	0,0	4,3	22,1	4,3	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2-dihydro-	447-53-0	4,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-ethyl-2,4,5-trimethyl-	17851-27-3	12,9	9,5	0,0	3,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Estragole	140-67-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,4-dipropyl-	4815-57-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene	91-20-3	95,7	93,2	49,8	54,7	83,5	54,7	83,7	63,1	56,3
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-methyl-	3877-19-8	0,0	8,6	0,0	0,0	6,6	0,0	6,6	0,0	0,0
Benzene, cyclopentyl-	700-88-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, hexyl-	1077-16-3	4,4	5,3	0,0	3,8	9,5	3,9	11,1	6,8	12,7



Benzene, 1,1'-(1,1,10,10-tetramethyl-1,10-decanediyl)bis[3,4-dimethyl-	63934-83-8	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1,3-dimethylbutyl)-	19219-84-2	3,2	0,0	1,2	0,0	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, pentamethyl-	700-12-9	0,0	0,0	0,0	2,2	4,4	3,4	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-4-ethenyl-	1746-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Anethole	104-46-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 2-methyl-	91-57-6	29,5	39,6	1,9	0,0	29,1	16,1	42,8	0,0	0,0
Benzene, (1-methyldodecyl)-	4534-53-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	292,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5,7-dimethyl-	21693-54-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Biphenyl	92-52-4	28,9	35,4	8,0	25,0	44,5	37,4	45,5	33,4	50,1
Diphenylmethane	101-81-5	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Phenyl-5-methylheptane	103240-92-2	0,7	0,0	0,0	0,0	1,4	0,0	2,2	0,0	0,0
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	581-42-0	3,1	4,9	0,0	2,0	3,9	2,8	0,0	3,2	0,0

Cyclic Hydrocarbons

Cyclopropane, ethyl-	1191-96-4	98,7	98,5	119,1	98,5	102,1	82,7	77,1	73,0	85,2
Cyclopropane, ethylidene-	18631-83-9	15,8	26,5	20,3	12,3	21,9	31,0	24,0	26,7	25,2
Spiropentane	157-40-4	3,5	7,0	3,5	6,2	0,0	6,1	64,8	8,4	0,0
Cyclopropylacetylene	6746-94-7	11,3	9,9	5,8	9,2	12,7	8,7	11,1	9,1	7,1
Cyclopentene	142-29-0	4,0	4,0	4,4	6,0	5,5	3,1	4,6	3,0	3,2
Cyclopentane	287-92-3	7,1	7,7	5,2	60,0	6,7	3,9	10,2	4,9	9,6
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	96-39-9	0,0	0,0	0,9	0,1	1,2	0,7	0,9	0,8	1,3
3-(2-Propenyl)cyclopentene	14564-97-7	20,2	1,4	1,1	0,0	1,3	0,0	1,2	1,3	0,0
Cyclopropane, 1-propenyl-	4663-21-2	0,0	0,0	0,0	0,0	12,4	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, methyl-	96-37-7	123,3	78,6	87,1	207,4	90,9	64,6	42,4	50,5	43,9
Cyclopentane, methylene-	1528-30-9	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-cyclobutylcyclobutene	58372-37-5	0,0	2,5	3,6	10,3	8,1	2,3	7,6	6,3	0,0
Cyclopentene, 3-methyl-	1120-62-3	43,4	16,7	29,8	186,8	27,1	23,7	15,3	18,3	17,5
Cyclopropene, 3-methyl-3-vinyl-	71153-30-5	6,4	0,0	20,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclopentadiene, 5-methyl-	96-38-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Cyclopentene, 1,5-dimethyl-	16491-15-9	0,0	0,4	2,2	7,8	0,5	0,0	1,1	1,0	1,0
Cyclopentene, 1-methyl-	693-89-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	5,2	0,0	8,3
Cyclopentane, 1,1-dimethyl-	1638-26-2	17,4	0,0	9,2	20,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis-	2532-58-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	28,5	64,2	0,0	0,0
Cyclohexene	110-83-8	73,5	33,0	0,0	0,0	30,5	0,0	96,2	0,0	34,5
1,2-Dimethyl cyclopropene	14309-32-1	0,0	0,0	1,4	56,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentene, 4,4-dimethyl-	19037-72-0	45,7	6,1	24,4	103,3	7,1	16,2	4,9	13,3	4,0
Bicyclo[2.1.0]pentane, 1,4-dimethyl-	17065-18-8	0,0	11,4	0,0	0,0	13,9	0,0	10,5	0,0	8,2
cis-1-Methyl-2-(2'-propenyl)cyclopropane	76588-97-1	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0
Cyclohexane, methyl-	108-87-2	477,9	388,3	218,9	276,2	162,3	128,9	92,9	107,2	92,7
Cyclopentadiene, 2,5,5-trimethyl-	7086-15-9	1,0	1,6	0,0	0,0	0,9	0,0	3,4	0,0	0,0
Cyclopentane, ethyl-	1640-89-7	190,6	97,3	72,3	135,8	38,6	0,0	27,6	30,2	23,0
1,3-Cyclopentadiene, 5,5-dimethyl-	4125-18-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-	2815-58-9	99,2	0,0	0,0	51,1	13,0	11,2	9,4	8,3	9,1
Cyclohexane, methylene-	1192-37-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 4-methyl-	591-47-9	0,0	7,6	10,0	14,9	7,2	0,0	0,0	4,0	0,0
Cyclopentene, 3-ethyl-	694-35-9	7,5	0,0	8,6	15,1	9,1	14,2	0,0	7,0	0,0
Cyclobutene, 2-propenylidene-	52097-85-5	0,0	3,7	2,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,7
Cyclohexene, 1-methyl-	591-49-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 3-methyl-	591-48-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	638-04-0	302,5	0,0	76,9	78,6	39,4	35,6	28,7	21,9	25,4
3,3,5,5-Tetramethylcyclopentene	38667-10-6	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,4	3,0
Cyclopentane, 2-ethylidene-1,1-dimethyl-	56324-66-4	0,0	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
cis-1-Butyl-2-methylcyclopropane	38851-69-3	38,0	36,9	31,0	0,0	0,0	0,0	26,6	0,0	18,4
Cyclohexane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	4923-77-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, ethyl-	1678-91-7	167,3	147,8	0,0	36,1	0,0	17,0	0,0	16,4	15,9
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	3073-66-3	157,4	104,1	0,0	0,0	0,0	0,0	21,8	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-isopropyl-1-methyl-	16580-26-0	0,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, ethylidene-	1003-64-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-	1839-63-0	42,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-, (1a,3a,5b)-	1795-26-2	13,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
trans-1-Methyl-2-(2'-propenyl)cyclopropane	76588-95-9	0,0	0,0	0,0	1,0	3,2	1,5	0,0	0,0	0,0
Butane, 2-cyclopropyl-	1406223	0,0	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclohexadiene, 5,6-dimethyl-	5715-27-5	0,0	0,0	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-, cis-	1755-05-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,5
Pentalene, octahydro-	694-72-4	30,7	21,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, 1-methyl-2-pentyl-	41977-37-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, propyl-	1678-92-8	40,8	13,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Ethyl-3-methylcyclohexane (c,t)	3728-55-0	0,0	32,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexene, 1-propyl-	2539-75-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, (1-methylethyl)-	696-29-7	36,1	16,3	8,1	0,0	3,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-2-methyl-	3868-64-2	58,3	37,2	14,7	8,2	9,0	6,8	6,5	0,0	0,5
Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7,7-trimethyl-	508-32-7	23,9	18,4	21,9	13,8	21,8	0,0	29,0	15,4	33,5
Cyclopentane, (2-methylpropyl)-	3788-32-7	55,9	119,1	49,8	0,0	44,3	36,3	34,5	0,0	33,7
Cyclobutane, ethyl-	4806-61-5	0,0	0,0	0,0	6,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentalene, octahydro-1-methyl-	32273-77-1	29,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, octahydro-, trans-	3296-50-2	21,3	16,4	11,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-ethyl-1,3-dimethyl-, cis-	62238-31-7	1,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, (2-methylbutylidene)-	53366-54-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,0
Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-	5256-65-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, ethenylmethylene-	19995-92-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Trans-1,4-diethylcyclohexane	13990-93-7	4,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentene, 1,3-dimethyl-2-(1-methylethyl)-	61142-32-3	0,0	0,0	9,2	0,0	18,8	0,0	19,9	0,0	0,0
1H-Indene, octahydro-, cis-	4551-51-3	66,1	27,1	18,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8	0,0
Cyclobutane, 1-ethyl-3-methylene-	56335-70-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2,7,7-trimethyl-	514-14-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,3,3-trimethyl-	488-97-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,0
1-Butene, 4-cyclopropyl-	7736-35-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6
1,3,5-Cycloheptatriene	544-25-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethyl)-, trans-	1124-26-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.2.0]hepta-2,6-diene	2422-86-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, butyl-	1678-93-9	45,4	15,3	10,9	0,0	12,7	9,2	13,2	0,0	18,5
Cyclopropane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	19781-68-1	0,0	5,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,5
Cyclohexane, hexyl-	4292-75-5	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-, trans-	493-02-7	68,4	41,7	23,8	7,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(E)-2-Butenylcyclopropane	76588-98-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, pentyl-	4292-92-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, (2-methylpropyl)-	1678-98-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-	91-17-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Spiro[4.5]decane	176-63-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3,8-p-Menthatriene	18368-95-1	0,0	0,0	17,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-2-methyl-	2958-76-1	18,0	6,3	0,4	2,0	4,1	0,0	4,6	0,0	0,0
Cyclohexane, 1,1,3,5-tetramethyl-, cis-	50876-32-9	11,4	0,0	1,5	7,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	874-35-1	37,1	32,0	8,4	26,7	31,3	17,8	68,9	38,5	19,3
Isopropylcyclobutane	872-56-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	119-64-2	54,6	0,0	9,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropene	2781-85-3	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, pentyl-	3741-00-2	59,0	90,7	0,1	0,0	91,9	124,1	0,0	93,2	98,5
Cyclohexane, 2-propenyl-	2114-42-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0
Azulene	275-51-4	0,0	0,0	15,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,1'-Bicyclopentyl	1636-39-1	0,0	1,4	0,0	1,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropane, 1-butyl-2-(2-methylpropyl)-	41977-35-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane, 1-ethyl-1-methyl-	4926-90-3	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,1'-Bicyclohexyl	92-51-3	9,4	0,0	0,0	0,0	11,7	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, 1-ethyl-2-methyl-, cis-	930-89-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	35,3	0,0
Benzene, 3-cyclohexen-1-yl-	4994-16-5	7,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,8	0,0
Cyclohexane, 1,1'-methylenebis-	3178-23-2	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,1'-Bicyclohexyl, 2-methyl-, cis-	50991-08-7	0,0	0,0	0,0	0,0	4,9	0,0	4,4	0,0	0,0



Cyclopentane, 1,1,3-trimethyl-	4516-69-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cycloheptane, methyl-	4126-78-7	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Naphthalene, decahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	29788-41-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4-dimethyl-	4175-54-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4-Methenoazulene, decahydro-1,5,5,8a-tetramethyl-, [1S-(1a,2a,3a β ,4a,8a β ,9R*)]-	1137-12-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexane	110-82-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-2,4a-Methanonaphthalene, 1,3,4,5,6,7-hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-, (2S)-	1135-66-6	0,0	6,5	0,0	6,6	21,7	0,0	0,0	9,3	6,3
Cyclopentane, nonyl-	2882-98-6	35,8	75,8	0,0	40,2	43,9	54,4	135,1	93,7	60,2
Cyclohexane, octyl-	1795-15-9	0,0	8,7	0,0	0,0	0,0	0,0	17,7	0,0	0,0
Cyclopentane, butyl-	2040-95-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9
Cyclopentane, 1,2,3-trimethyl-, (1a,2a,3a)-	2613-69-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,4	0,0	0,0	0,0
Acenaphthene	83-32-9	1,7	3,3	0,0	3,1	4,6	2,5	3,4	3,6	3,8

Esters

Methyl formate	107-31-3	6,4	3,0	2,2	1,7	1,5	1,7	3,2	1,6	1,6
Acetic acid, methyl ester	79-20-9	0,0	2,6	0,6	0,0	0,0	0,0	1,4	0,0	0,0
Ethyl Acetate	141-78-6	35,6	38,3	37,7	39,6	49,6	51,7	101,7	47,2	41,4
Acetic anhydride	108-24-7	0,0	0,0	0,0	0,0	220,6	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoic acid, 2-methyl-, methyl ester	547-63-7	0,0	0,0	0,0	0,3	1,0	0,3	0,4	0,0	0,0
Vinyl crotonate	14861-06-4	0,0	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0	3,8	21,8	26,3
Methyl methacrylate	80-62-6	0,0	23,4	0,0	0,0	0,0	31,9	3,9	5,6	4,4
n-Propyl acetate	109-60-4	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	1,0
Carbonic acid, dimethyl ester	616-38-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-isocyanato-	1795-48-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexanoic acid, methyl ester	106-70-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methacrylic acid, ethyl ester	97-63-2	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allyl acetate	591-87-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, ethyl ester	105-54-4	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, butyl ester	123-86-4	57,7	62,3	78,1	52,8	82,3	71,9	72,3	75,2	70,3



2-Ethoxyethyl acetate	111-15-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Crotonic anhydride	623-68-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, 2-methyl-, ethyl ester	7452-79-1	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0
Formic acid, 1-methylethyl ester	625-55-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanol, 3-methyl-, acetate	123-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanol, 2-methyl-, acetate	624-41-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propenoic acid, butyl ester	141-32-2	0,0	95,6	43,2	0,0	26,8	0,0	25,7	14,5	0,0
1,4-Diacetoxy-trans-2-butene	1576-98-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid ethenyl ester	108-05-4	0,0	0,0	0,0	0,0	2,7	0,0	8,2	0,0	0,0
Butanoic acid, 2-methylpropyl ester	539-90-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, anhydride	106-31-0	0,0	0,0	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methyl 2-butynoate	23326-27-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	19,3	0,0	0,0	0,0
2-Propenoic acid, 2-methyl-, ethenyl ester	4245-37-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, hexyl ester	142-92-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Valeric anhydride	2082-59-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pivalic acid vinyl ester	3377-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
di-tert-Butyl dicarbonate	24424-99-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,6	22,0	0,0
Acetic acid, 2-ethylhexyl ester	103-09-3	0,0	11,4	0,0	0,0	23,4	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Dioxane-2,5-dione, 3,3,6,6-tetramethyl-	6713-72-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0
3,5,5-Trimethylhexyl acetate	58430-94-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, phenylmethyl ester	140-11-4	0,0	3,3	0,0	16,2	26,8	12,5	18,9	25,2	46,6
Diethyl Phthalate	84-66-2	0,0	0,0	0,0	0,0	30,5	0,0	2,4	16,6	0,0
Cyclopentanecarboxylic acid, ethenyl ester	16523-06-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Formic acid, 2-methylpropyl ester	542-55-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	11,4	0,0	0,0	0,0
Triacetin	102-76-1	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Butadien-1-ol, acetate	1515-76-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,9
2-Propynoic acid, methyl ester	922-67-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methylbenzyl p-toluate	67157-61-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, methyl ester	623-42-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dibutyl phthalate	84-74-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	17,2	0,0



Ethers

Ethylene oxide	75-21-8	0,0	0,0	0,2	0,3	0,0	0,5	0,0	0,0	1,0
Trimethylene oxide	503-30-0	58,7	85,1	67,8	79,8	90,2	88,6	88,4	87,2	80,6
Oxirane, ethyl-	106-88-7	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,5	0,0	0,4	0,5
1-Propene, 3-methoxy-	627-40-7	0,0	0,0	3,4	0,0	9,6	11,1	49,9	7,7	6,8
Propane, 2-ethoxy-2-methyl-	637-92-3	152,5	72,3	145,8	494,2	106,8	96,3	70,7	66,1	0,0
1-Propene, 3-(ethenyloxy)-	3917-15-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,2	0,0	0,0
Butane, 1-methoxy-	628-28-4	0,0	0,0	0,0	0,0	6,9	6,0	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,2-dimethoxy-	110-71-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptane, 1,1'-oxybis-	629-64-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butane, 2-methoxy-3-methyl-	62016-49-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0
2-Propanol, 1-methoxy-	107-98-2	3,2	4,3	4,7	9,3	11,8	9,4	43,6	8,5	11,3
1,4-Dioxane	123-91-1	0,0	2,8	4,5	0,0	5,2	1,8	0,0	0,0	3,4
1-Propanol, 2-methoxy-	1589-47-5	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethene, ethoxy-	109-92-2	0,0	0,0	0,0	0,0	5,6	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butyne, 3-methyl-3-propoxy-	53907-64-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,2'-Bi-1,3-dioxolane	6705-89-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentane, 1-propoxy-	18641-82-2	0,0	0,0	0,0	2,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethene, methoxy-	107-25-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanol, 2-butoxy-	111-76-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methoxy-4-methyl-	104-93-8	0,0	0,0	2,3	0,0	6,6	4,5	0,0	0,0	6,0
1-Butyne, 3-methyl-3-(1-methylethoxy)-	53907-63-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Benzodioxole	274-09-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propanol, 1-butoxy-	5131-66-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetramethyl orthocarbonate	1850-14-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Methyl-1-ethoxycyclobutane	59416-06-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimethyl ether	115-10-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-ethoxy-	625-54-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	0,0	0,0
Oxetane, 3,3-dimethyl-	6921-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0



Benzene, [1-[[1-(1-methylethyl)-3-butenyl]oxy]ethyl]-, [S-(R*,R*)]-	98088-51-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propene, 3-(1,1-dimethylethoxy)-	1471-04-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butoxyethyl acetate	112-07-2	61,6	255,1	15,8	75,2	258,7	55,6	67,7	62,5	67,7
Ethene, tetramethoxy-	1069-12-1	7,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (propoxymethyl)-	937-61-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxetane, 3-(1-methylethyl)-	10317-17-6	0,0	0,0	7,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isobutylene epoxide	558-30-5	0,0	0,0	5,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethoxyacetylene	927-80-0	1,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,5	0,0
1-Pentyne, 3-ethyl-3-methoxy-	53941-20-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxirane, 2-methyl-3-(1-methylethyl)-	1192-31-0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1-methoxy-4-methyl-2-(1-methylethyl)-	31574-44-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ether, hexyl pentyl	32357-83-8	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-(Methylenedioxy)toluene	7145-99-5	0,0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4,5-Tetroxane, 3,3,6,6-tetraphenyl-	16204-36-7	0,0	0,0	7,3	0,3	19,6	6,2	0,0	0,0	0,0
Diphenyl ether	101-84-8	19,1	25,9	0,0	16,0	34,4	14,4	36,8	16,0	29,7
1,3-Benzodioxole, 5-(2,2-dimethylethyl)-	28140-80-9	0,2	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Furans

Furan, 2-methyl-	534-22-5	25,1	28,2	25,6	30,6	33,6	28,0	29,0	29,3	31,2
Furan, 3-methyl-	930-27-8	0,0	6,5	1,5	0,0	11,6	6,2	10,5	8,9	9,9
Tetrahydrofuran	109-99-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,3'-Bifuran, 2,2',3',5-tetrahydro-	98869-93-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2-ethyl-	3208-16-0	15,4	17,4	17,4	18,3	21,3	20,4	16,5	22,1	26,1
Furan, 2,5-dimethyl-	625-86-5	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	12,6	15,9	19,5
2,4-Dimethylfuran	3710-43-8	0,0	0,0	0,0	16,5	0,0	5,6	0,0	17,3	0,0
Furan, 2-propyl-	4229-91-8	0,0	7,0	5,8	9,3	10,3	9,8	9,1	11,5	11,5
Furan, 2,3,5-trimethyl-	10504-04-8	0,0	0,0	0,0	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2,3-dihydro-	1191-99-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,3'-Bifuran, 2,2',3,3'-tetrahydro-	98869-94-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Furan, 2-(2-propenyl)-	75135-41-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,6	7,7	8,3	0,0
Furan, 2-methoxy-	25414-22-6	0,0	0,0	0,0	3,7	6,3	6,5	0,0	5,7	5,9
2-n-Butyl furan	4466-24-4	8,8	21,6	8,2	9,5	11,8	11,7	9,9	11,3	13,7
2,5-Furandione, 3,4-dimethyl-	766-39-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Maleic anhydride	108-31-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Furan, 2-pentyl-	3777-69-3	11,1	14,6	7,3	15,6	19,8	20,3	19,0	19,6	17,7
Furan, 2-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-	6141-68-0	5,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzofuran	271-89-6	0,0	0,0	6,5	0,0	0,0	5,5	2,3	0,0	0,0
Furan	110-00-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanone, 1-(2-furanyl)-	4208-57-5	3,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Halogen-containing compounds

Heptane, hexadecafluoro-	335-57-9	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	1,0	0,0
Dichlorodifluoromethane	75-71-8	1,4	3,3	0,0	1,3	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0
Methane, bromo-	74-83-9	0,4	0,4	0,5	0,3	0,4	0,4	0,4	0,9	0,3
Ethyl Chloride	75-00-3	0,3	0,3	0,4	0,7	0,4	0,3	0,3	0,4	0,6
Trichloromonofluoromethane	75-69-4	6,7	8,8	7,9	6,7	7,7	8,0	7,9	7,5	7,3
1,1-Dichloro-1-fluoroethane	1717-00-6	0,5	0,0	0,5	0,4	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
Ethylamine, 2-((p-bromo-a-methyl-a-phenylbenzyl)oxy)-N,N-dimethyl-	3565-72-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,1,2-trichloro-1,2,2-trifluoro-	76-13-1	12,7	16,7	0,0	17,9	21,4	19,6	17,7	15,6	17,8
Methane, iodo-	74-88-4	0,0	1,1	1,1	1,0	1,1	0,0	0,0	0,8	0,0
Methylene chloride	75-09-2	0,0	0,0	0,0	0,0	15,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3,5-Trifluorobenzene	372-38-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,9
Ethene, fluoro-	75-02-5	5,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,3	0,0
Trichloromethane	67-66-3	16,5	1,7	0,2	37,6	8,0	10,3	10,7	8,9	10,7
Ethane, 1,1,1-trichloro-	71-55-6	0,0	0,0	0,0	0,0	4,0	3,7	1,2	3,6	1,1
Carbon Tetrachloride	56-23-5	23,2	44,5	30,8	0,0	47,3	40,9	42,0	39,4	46,7
Acrolein, 2-chloro-	683-51-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	2,8
Trichloroethylene	79-01-6	0,0	0,5	0,5	0,0	0,6	0,9	0,0	0,4	0,6



Methane, bromodichloro-	75-27-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, bromo-	137-43-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cycloheptane, bromo-	2404-35-5	0,0	0,0	8,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetrachloroethylene	127-18-4	366,3	346,3	402,3	269,8	316,4	306,7	367,1	310,4	346,5
exo-2-Bromonorbornane	2534-77-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
Methane, dibromochloro-	124-48-1	31,3	6,3	5,5	8,6	3,1	5,3	4,0	18,5	0,0
Bromochloronitromethane	135531-25-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoyl chloride, 3-chloro-	625-36-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexane, 1-chloro-	544-10-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, chloro-	108-90-7	9,1	8,6	7,4	0,0	13,6	0,0	11,0	12,2	0,0
Propane, 2-bromo-2-methyl-	507-19-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0
Methane, tribromo-	75-25-2	0,0	0,0	2,2	0,0	12,5	27,5	0,0	116,8	12,1
Ethanone, 1-(3-fluorophenyl)-	455-36-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-chloro-2-nitro-	594-71-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cycloheptatrienylium, iodide	1316-80-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3
Propane, 2,2-difluoro-	420-45-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,4-dichloro-	106-46-7	2,8	12,3	8,7	8,4	4,1	0,0	14,3	0,0	0,0
Ethane, 1,1-difluoro-	75-37-6	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethane, 1,1,1-trifluoro-	420-46-2	1,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
tert-Butyl iodide	558-17-8	0,0	0,0	0,0	0,0	9,5	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, 1,3,5-trichloro-	108-70-3	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dodecane, 1-iodo-	4292-19-7	0,0	0,0	0,0	6,8	0,0	0,0	36,5	0,0	0,0
2-Chloroethyl benzoate	939-55-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Chlorine	7782-50-5	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetradecane, 1-iodo-	19218-94-1	0,0	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Iodo-2-methylundecane	73105-67-6	0,0	26,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	30,8	0,0

Ketones

Acetone	67-64-1	178,2	187,8	200,2	240,5	296,1	181,3	183,8	172,7	190,6
Acetyl valeryl	96-04-8	33,0	0,0	0,0	97,5	20,3	16,1	16,1	13,8	12,0



Methyl vinyl ketone	78-94-4	34,9	41,2	44,6	41,8	46,4	41,9	58,4	49,1	59,7
2,3-Butanedione	431-03-8	0,0	0,0	0,0	28,5	0,0	0,0	0,0	0,0	4,7
2-Butanone	78-93-3	84,9	95,4	94,7	90,2	101,1	109,4	102,6	108,5	112,5
3-Penten-2-one	625-33-2	0,2	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone, 2,3-dimethyl-, cis-	28113-36-2	3,3	0,0	2,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Hexen-2-one	763-93-9	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hexen-3-one	2497-21-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,4	6,9	10,7
Ethanone, 1-(2-methyl-2-cyclopenten-1-yl)-	1767-84-6	0,0	0,0	0,0	0,0	6,9	0,0	6,0	0,0	0,0
3-Buten-2-one, 3-methyl-	814-78-8	0,0	0,0	0,0	0,0	7,7	0,0	0,0	29,3	0,0
1-Penten-3-one	1629-58-9	5,0	5,8	4,1	5,1	9,7	9,4	10,6	13,5	12,5
2-Pentanone	107-87-9	173,7	80,6	111,5	297,4	96,8	92,3	93,9	85,8	84,9
3-Pentanone	96-22-0	37,0	74,9	49,6	55,9	86,5	97,1	101,5	99,8	93,8
2-Butanone, 3,3-dimethyl-	75-97-8	0,0	1,4	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Nonen-4-one	32064-72-5	0,0	0,0	0,0	0,0	6,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclohexanone, 3-methyl-	591-24-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,4	0,0	0,0	0,0
Methyl Isobutyl Ketone	108-10-1	0,0	69,2	0,0	0,0	88,3	80,9	80,1	91,3	77,5
Cyclobutanone, 2,2,3-trimethyl-	1449-49-6	0,0	5,3	2,0	7,6	16,3	14,9	13,6	14,7	21,5
2-Pentanone, 3-methyl-	565-61-7	18,3	0,0	4,5	0,0	8,9	6,2	7,9	0,0	17,9
Cyclobutanone, 2,3,3-trimethyl-	28290-01-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hexen-3-one, 4-methyl-	52883-78-0	68,8	0,0	0,0	0,0	21,5	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pentanone, 4,4-dimethyl-	590-50-1	3,9	5,1	2,9	3,9	0,0	8,8	0,0	9,6	0,0
3-Hexanone	589-38-8	23,9	49,2	31,1	53,8	54,7	88,2	64,4	97,4	97,6
4-Hepten-3-one, 5-methyl-	1447-26-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8
2-Hexanone	591-78-6	93,6	129,9	94,7	141,7	137,4	180,1	201,8	226,9	252,1
2-Hepten-4-one, 2-methyl-	22319-24-0	14,7	19,0	21,6	15,1	9,4	16,4	10,1	17,0	22,9
4-Octen-3-one	14129-48-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,7	0,0	0,0
trans-3,4-Dimethylcyclopentanone	19550-73-3	0,0	0,0	0,0	11,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thujone	546-80-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.1.0]hexan-3-one, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	1125-12-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2-Cyclopenten-1-one, 3,5,5-trimethyl-	24156-95-4	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(2-methyl-1-cyclopenten-1-yl)-	3168-90-9	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone, 2,2,3,4-tetramethyl-, cis-	87481-00-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Hexanedione	4437-51-8	0,0	1,7	0,0	2,5	2,6	3,9	3,0	0,0	3,2
2-Butanone, 3-methyl-	563-80-4	1,7	0,0	0,0	2,2	0,0	3,3	5,1	4,2	4,3
1-Propanone, 1-cyclopropyl-	6704-19-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,3	0,0	0,0
2-Hexanone, 5-methyl-	110-12-3	0,0	9,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,4
Cyclopentanone, 3-methyl-	1757-42-2	0,0	0,0	0,0	6,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Heptanone	123-19-3	4,2	2,6	3,5	6,9	5,9	7,3	3,9	0,0	5,6
2-Cyclopenten-1-one, 3,4,5-trimethyl-	55683-21-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	14,3
3-Heptanone	106-35-4	0,0	37,5	15,6	34,1	42,5	41,5	54,8	65,6	67,0
2-Heptanone	110-43-0	0,0	49,8	33,0	45,5	48,4	62,7	69,0	75,3	83,3
4,5,6,6a-Tetrahydro-2(1H)-pentalenone	72200-41-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Octanone	106-68-3	0,0	17,0	16,9	17,1	17,6	20,8	19,5	9,3	31,6
2-Heptanone, 3-methyl-	2371-19-9	0,0	15,2	0,0	0,0	15,8	25,4	21,4	26,1	0,0
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	123-42-2	0,0	0,0	3,6	0,0	0,0	12,2	14,0	0,0	13,5
4,6-Octadiyn-3-one, 2-methyl-	29743-33-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Cyclopenten-1-one, 2,3,5-trimethyl-4-methylene-	29765-85-3	0,0	0,9	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hepten-3-one, 5-ethyl-4-methyl-	22319-28-4	0,0	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Cyclohexen-1-one	930-68-7	9,1	3,6	3,1	4,0	5,2	0,0	6,4	0,0	0,0
1-Propanone, 1-(1-cyclohexen-1-yl)-	1655-03-4	0,0	1,1	0,0	0,0	4,3	0,0	4,7	0,0	0,0
3-Hepten-2-one	1119-44-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentanone, 1-(4-methylphenyl)-	1671-77-8	5,4	2,7	6,5	0,0	8,2	2,9	9,7	5,9	6,0
5-Hepten-2-one, 6-methyl-	110-93-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Octanone	111-13-7	40,7	67,0	48,3	78,9	69,8	97,4	92,2	106,8	113,0
2-Pentyn-4-one	7299-55-0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentanone, 2,2,4-trimethyl-	28056-54-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,3	0,0	0,0	0,0
1-Penten-1-one, 2-methyl-	29336-29-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Ethylidenecyclohexanone	1122-24-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2-Cyclohexen-1-one, 3,5-dimethyl-	1123-09-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Heptadien-4-one, 3,3,6-trimethyl-	546-49-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(R)-(+)-3-Methylcyclopentanone	6672-30-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0	0,0
Cyclobutanone, 3-ethyl-	56335-73-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Penten-3-one, 2-methyl-	25044-01-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-cyclopropyl-	765-43-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Nonanone	821-55-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	29,7	0,0
Ethanone, 1-(4-ethylphenyl)-	937-30-4	0,0	0,0	0,0	3,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetophenone	98-86-2	173,1	186,3	152,5	165,3	206,9	200,0	229,5	222,9	189,2
1-Hexanone, 5-methyl-1-phenyl-	25552-17-4	0,0	0,0	0,0	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,3,3-trimethyl-	1195-79-5	0,0	0,0	26,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	83-33-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4
6-Methyl-3,5-heptadiene-2-one	1604-28-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Penten-2-one, (E)-	3102-33-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Octen-4-one	4643-27-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Penten-2-one	13891-87-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Decanone	928-80-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	9,5	0,0	12,0
2-Decanone	693-54-9	25,9	41,6	0,0	45,3	37,9	65,8	55,2	59,9	56,5
Cyclohexanone, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-, (2R-cis)-	1196-31-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propanone, 1-phenyl-	93-55-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(4-methylphenyl)-	122-00-9	0,0	0,0	0,0	5,4	9,1	0,0	8,7	8,4	11,0
4-Hepten-2-one, (E)-	36678-43-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanone	1191-95-3	0,0	7,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
(-)-Carvone	6485-40-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Undecanone	112-12-9	10,2	0,0	0,0	26,5	0,0	0,0	0,0	0,0	25,1
2-Dodecanone	6175-49-1	12,5	27,6	3,1	30,5	0,0	20,0	38,4	52,7	48,3

Lactones

2(5H)-Furanone, 5-methyl-	591-11-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
---------------------------	----------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----



2(5H)-Furanone, 3-methyl-	22122-36-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propiolactone	57-57-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-Pyran-2-one	504-31-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,6	0,0
2(5H)-Furanone, 5,5-dimethyl-	20019-64-1	5,0	1,0	13,8	0,0	33,9	22,3	1,5	0,0	14,3
2(3H)-Furanone, dihydro-5-methyl-	108-29-2	0,0	41,3	44,3	41,5	46,4	49,7	45,4	61,4	47,2
2(3H)-Furanone, 5-ethyldihydro-	695-06-7	0,0	0,0	41,0	38,4	0,0	0,0	0,0	73,8	0,0
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-	542-28-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,5-Furandione, 3-(1,1-dimethylethyl)-	18261-07-9	31,5	0,0	35,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-methyl-	823-22-3	0,0	0,0	2,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1(3H)-Isobenzofuranone, 3,3-dimethyl-	1689-09-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,0	0,0
2(5H)-Furanone	497-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5

Mercaptans

Methanethiol	74-93-1	5,2	0,0	3,8	5,3	3,4	0,0	3,5	4,3	5,6
--------------	---------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Nitrogen-containing compounds

Propane, 2-nitro-	79-46-9	159,6	0,0	208,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetonitrile	75-05-8	37,9	47,4	80,9	50,6	48,9	50,2	36,6	45,1	48,9
Ethane, diazo-	1117-96-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hydrazine, 1,1-dimethyl-	57-14-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,4
Propane, 2-methyl-2-nitro-	594-70-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, nitro-	75-52-5	19,7	19,0	22,7	32,7	13,9	17,9	20,0	21,1	21,6
Propanenitrile	107-12-0	14,8	18,3	31,8	16,8	18,8	19,9	14,3	16,1	15,7
1,2-Dimethyldiaziridine	6794-95-2	0,0	5,0	4,0	10,0	0,0	0,0	5,2	0,0	0,0
Butanedinitrile	110-61-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Methyl-1H-1,2,4-triazole	6086-21-1	0,0	71,9	25,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Methylpyridazine	1632-76-4	0,4	0,0	0,0	3,3	9,0	0,0	0,0	11,5	0,0
Pyrrolidine, 3-methyl-	34375-89-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Butenamide	28446-58-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanenitrile, 2-methyl-	18936-17-9	0,0	0,0	0,0	0,0	10,2	0,0	0,0	0,0	5,3



Pyridine	110-86-1	18,0	19,6	22,2	20,7	21,5	23,9	35,0	31,1	29,4
1H-Pyrrole, 2-ethyl-	1551-06-0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Aminopyrimidine	591-54-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0
Pentanenitrile	110-59-8	22,7	67,4	70,2	44,5	59,6	73,1	62,8	67,4	61,1
Propane, 1-isocyanato-	110-78-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,4-Diamino-1,3,5-triazine	504-08-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2(1H)-Pyrimidinone, 4-amino-	71-30-7	0,0	0,0	32,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isobutyronitrile	78-82-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1
N,N'-Ethylenebis-acrylamide	2956-58-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-1,2,3-Triazole	288-36-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 2-methyl-	109-06-8	1,7	0,0	0,0	3,2	4,8	5,8	5,8	8,5	9,9
Formamide, N,N-dimethyl-	68-12-2	0,0	28,1	11,6	6,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4-Triazine	290-38-0	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, nitroso-	865-40-7	0,0	0,0	2,7	0,0	0,0	5,6	0,0	4,9	0,0
1H-Tetrazole, 1-methyl-	16681-77-9	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diethylcyanamide	617-83-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0	0,0
Hydroxyurea	127-07-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Tetrazole	288-94-8	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanenitrile, 3-(propylamino)-	7249-87-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
5-Amino-1-ethylpyrazole	3528-58-3	0,0	0,0	3,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazole, 1,5-dimethyl-	694-31-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazol, 1-methyl-2-amino-	6646-51-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,1	0,0
1,2,4,5-Tetrazine	290-96-0	3,5	2,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5	0,0
Pyridine, 3-methyl-	108-99-6	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazole, 3-methyl-	1453-58-3	0,0	5,5	6,4	4,6	7,9	0,0	7,6	6,8	0,0
Pyrrolidine	123-75-1	1,6	0,0	0,5	0,0	0,0	10,9	7,8	0,0	15,3
Hexanenitrile	628-73-9	30,3	45,3	105,0	57,1	58,6	76,5	53,6	78,0	72,3
1-Azabicyclo[2.2.2]octane, 4-methyl-	45651-41-0	3,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 1-nitro-	108-03-2	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	2,7	0,0	6,1
4H-1,2,4-Triazol-4-amine	584-13-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	4,8



Isoxazole, 5-methyl-	5765-44-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopentane, nitro-	2562-38-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Pyridinediamine	54-96-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Pyrimidinamine, 6-methyl-	3435-28-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propene, 3-azido-	821-13-6	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetrazolo[1,5-a]pyrazine	13349-87-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazole, 1,4-dimethyl-	6338-45-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-Methyl-4-pyridinamine	1121-58-0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 1,2,5,6-tetrahydro-1,2-dimethyl-	15031-95-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Cyanoimidazole	57090-88-7	0,0	0,0	31,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyanamide, dibutyl-	2050-54-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazole, 1-methyl-	616-47-7	0,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Heptanonitrile	629-08-3	0,0	0,0	173,3	109,1	0,0	110,8	0,0	105,8	165,8
Butanenitrile, 4-(dimethylamino)-	13989-82-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzonitrile	100-47-0	0,0	39,8	49,9	26,2	45,6	44,9	49,8	47,9	45,8
1,6-Diazabicyclo[4.1.0]heptane	59204-83-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Tetrazole-1,5-diamine	2165-21-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	3,6
Acetonitrile, (dimethylamino)-	926-64-7	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Cyanocyclohexene	100-45-8	0,0	0,0	0,0	0,0	16,6	0,0	18,2	17,4	0,0
1H-Imidazole, 4,5-dihydro-2-methyl-	534-26-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetamide, N,N'-ethylenebis(N-nitro-	922-89-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,4-Triazolo[4,3-a]pyridine, 3-methyl-	1004-65-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1-nitropropyl)-	5279-14-1	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, azido-	622-37-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Octanenitrile	124-12-9	85,1	115,6	210,6	129,6	103,6	137,1	107,7	122,9	136,9
5-Dimethylamino-2-methyl-3-pentyn-2-ol	25400-83-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Aminocyclohexanone	6719-21-7	2,9	1,4	0,8	1,0	0,0	2,7	1,3	0,0	1,3
Benzene, nitro-	98-95-3	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazol-4-amine, 3,5-dimethyl-	5272-86-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0
Methanamine, N-(phenylmethylene)-	622-29-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Imidazo[1,2-a]pyrimidine	274-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,7	0,0	0,0	0,0
(1H)Pyrrole-3-carbonitrile, 2-methyl-	26187-27-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diazene, dimethyl-	503-28-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Imidazole, 4-(2-propenyl)-	50995-98-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nitrosoadamantane	22734-10-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2H-Tetrazole, 2-methyl-	16681-78-0	0,0	0,0	0,0	2,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Diethylamine, 1,1'-dimethyl-N-nitro-	4164-30-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Azetidinone, 3,3-dimethyl-	7486-91-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Tetrazole, 5-methyl-	4076-36-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,5-Diazabicyclo[3.1.0]hexane	13090-31-8	0,0	0,0	0,0	0,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Formic acid hydrazide	624-84-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Tetracyanopyrrole	5231-17-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propane, 2-methyl-1-nitro-	625-74-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrazole-1-carboximidamide, 3,5-dimethyl-	22906-75-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 2,3,4,5-tetrahydro-	505-18-0	3,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyrazine, isopropenyl-	34413-32-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Formaldehyde, dimethylhydrazone	2035-89-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyrimidine, 5-formamido-	56621-84-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,4	0,0	0,0	0,0
Quinoline	91-22-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Purine-6-carbonitrile	2036-13-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Decanenitrile	1975-78-6	0,0	33,9	6,6	16,8	0,0	0,0	0,0	0,0	36,4
1H-5-Triazolo[1,5-a]pyridin-4-ium, 2-hydroxy-1-methyl-, hydroxide, inner salt	13980-64-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pyrrolidinone	616-45-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanenitrile, 3-methyl-	625-28-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Azetidinone, 3,3,4,4-tetramethyl-	13423-22-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Indole	120-72-9	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzene, (1-nitroethyl)-	7214-61-1	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Propyn-1-amine, N,N-dimethyl-	7223-38-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	18,7	0,0



Organic Acids

Butanoic acid	107-92-6	128,8	139,2	20,7	238,3	245,5	256,5	294,7	342,5	303,4
Pentanoic acid	109-52-4	91,8	90,4	123,0	129,3	92,1	46,1	80,0	173,0	154,0
Butanoic acid, 2-methyl-	116-53-0	0,0	0,0	0,0	3,3	0,0	3,0	4,2	12,5	11,1
1-Pentyne, 3-methoxy-3-methyl-	22802-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,3
Heptanoic acid, 2-ethyl-	3274-29-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Butynoic acid	590-93-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Butanoic acid, 4-hydroxy-	591-81-1	0,0	0,0	32,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phenylpropionic acid	637-44-5	1,9	1,5	0,0	1,4	0,0	1,5	0,0	0,8	2,1
Formic acid	64-18-6	385,8	409,5	110,9	386,1	413,6	243,4	495,4	444,9	541,5
Acetic acid	64-19-7	957,9	537,6	290,4	246,8	462,5	469,2	511,3	565,9	0,0
Propanoic acid	79-09-4	238,7	265,4	153,2	250,7	344,0	334,6	425,0	405,8	471,8
Propanoic acid, 2-methyl-	79-31-2	31,5	43,7	54,6	67,5	72,6	58,0	121,6	97,3	131,5
1,2-Benzenedicarboxylic acid	88-99-3	13,1	21,7	0,0	12,4	10,3	0,0	24,6	32,3	17,7

Oxygen-containing compounds

2-Butanone, 3-methoxy-3-methyl-	36687-98-6	126,4	73,2	92,0	0,0	75,2	66,0	51,2	49,0	57,0
1,3-Dioxolane-2-methanol	5694-68-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Methyl-5H-furan-2-one	6124-79-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanoic acid, 2-methoxy-, methyl ester	17639-76-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,7
1,2,4,5-Tetroxane, 3,3,6,6-tetramethyl-	1073-91-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Pentanone, 1-(2-furanyl)-	3194-17-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(2-furanyl)-	1192-62-7	4,9	6,7	1,2	15,6	6,0	4,0	5,1	2,8	8,6
Methacrylic anhydride	760-93-0	0,0	5,9	0,0	0,0	0,0	5,6	0,0	7,9	8,4
2H-Pyran-2-carboxaldehyde, 5,6-dihydro-	53897-26-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,1	0,0
Methyl glyoxal	78-98-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,9	0,0	7,6	4,4
Furfural	98-01-1	0,0	10,6	10,1	3,8	0,0	11,7	0,0	11,4	1,1
2H-Pyran-2,6(3H)-dione, dihydro-4,4-dimethyl-	4160-82-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, ethoxy-	627-03-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Pentanone, 5-hydroxy-	1071-73-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,6



3-Acetyl-2,5-dimethyl furan	10599-70-9	0,0	0,0	0,0	10,8	0,0	12,9	0,0	11,3	0,0
3,3-Tetramethyleneglutaric anhydride	5662-95-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-	620-02-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	2,1	2,5	2,0
1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)-	106-62-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, methoxy-, ethyl ester	3938-96-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isomaltol	3420-59-5	0,0	0,0	0,0	3,7	2,0	0,0	2,6	3,5	3,9
3-Oxabicyclo[3.2.0]heptane-2,4-dione, cis-	118554-23-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3,4-Dimethyldihydrofuran-2,5-dione	7475-92-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzeneacetic acid, 4-methyl-a-oxo-	7163-50-0	15,8	19,3	0,0	0,0	0,0	23,2	0,0	26,8	26,7
3',5'-Dihydroxyacetophenone	51863-60-6	0,0	0,0	0,0	0,0	13,3	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzoylformic acid	611-73-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanol, 2-phenoxy-	122-99-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2-Ethanediol, monobenzoate	94-33-7	0,0	0,0	0,0	0,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 4-methoxy-	123-11-5	0,0	0,0	0,0	7,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Hydroxy-3-methylacetophenone	876-02-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Sulfur-containing compounds

Carbonyl sulfide (*)	463-58-1	7,5	3,9	5,2	2,6	3,1	2,8	4,8	5,4	10,4
Dimethyl sulfide	75-18-3	7,7	5,3	6,9	5,4	5,7	5,9	6,2	8,1	9,2
Carbon disulfide (*)	75-15-0	9,2	13,2	13,4	12,2	0,0	10,2	14,8	12,9	0,0
Disulfide, dimethyl	624-92-0	7,9	0,0	36,8	68,6	0,0	3,3	3,2	3,9	9,1
1-Propyne, 3-(ethenylthio)-	21916-66-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6	0,0	0,6
Thiophene, 2-methyl-	554-14-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiophene, 2-propyl-	1551-27-5	0,0	4,7	2,2	0,0	0,0	2,5	1,8	0,0	15,8
2-Methylthiolane, S,S-dioxide	1003-46-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimethyl sulfone	67-71-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	13,9
2-Methyl-2-tert-butyl-1,3-dithiane	37754-53-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiophene, 3-methyl-	616-44-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methyl sec-butyl disulphide	67421-87-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
Allyl dithioacetate	27249-83-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,3	0,0	0,0	0,0



Benzothiazole	95-16-9	131,8	174,8	75,3	112,4	183,0	202,6	200,5	220,2	195,7
---------------	---------	-------	-------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

Terpenes

1,5-Dimethyl-1,4-cyclohexadiene	836559	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	28634-89-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)-	18172-67-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	2175-91-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
α -Pinene	80-56-8	155,7	162,8	75,9	47,9	75,5	40,6	172,4	237,2	340,3
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-5-methylene-	497-32-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	1,1	1,2	1,2
Bicyclo[2.2.1]heptane, 7,7-dimethyl-2-methylene-	471-84-1	0,0	0,0	0,0	0,0	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0
Camphene	79-92-5	44,1	82,1	72,7	81,3	83,7	94,9	133,3	137,4	147,8
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2,3-trimethyl-, exo-	20536-41-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicyclo[4.1.0]heptane, 3,7,7-trimethyl-	554-59-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
β -Myrcene	123-35-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
β -Pinene	127-91-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7	10,9	1,1	1,1	1,5
α -Phellandrene	99-83-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	99-86-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Limonene	138-86-3	75,1	64,5	57,8	51,2	82,2	77,0	99,1	80,6	82,0
o-Cymene	527-84-4	134,3	144,8	125,2	127,9	171,9	148,0	189,4	172,7	181,0
Eucalyptol	470-82-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Carene	554-61-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
p-Cymene	99-87-6	53,3	37,1	30,1	29,5	32,5	25,4	31,0	23,7	24,2
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-	1195-32-0	81,8	71,2	37,3	66,3	95,3	57,6	96,1	84,4	102,5
Camphor	76-22-2	28,8	41,7	65,0	29,2	41,1	36,2	46,9	45,0	39,0

Heterogroups

Acetamide, 2-fluoro-	640-19-7	0,0	1,1	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Tetrazol-2-ylethanone	51410-11-8	47,5	25,1	18,0	35,6	8,1	47,9	93,5	55,1	0,0
Benzyl alcohol, α -(1-(dimethylamino)ethyl)-	17605-71-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2-Propenamide	79-06-1	0,0	0,0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
o-Allylhydroxylamine	6542-54-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitric acid, ethyl ester	625-58-1	6,4	4,0	10,7	0,0	3,0	3,5	2,6	2,5	1,7
N-Ethyl-2-isopropoxycarbonylazetidine	54773-06-7	5,3	7,0	4,8	0,0	0,0	0,0	7,1	0,0	0,0
Trioxide, bis(trifluoromethyl)	1718-18-9	4,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,4-Dioxin, 2,3-dihydro-	543-75-9	4,8	0,0	0,0	3,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Isopropylsulfonyl chloride	10147-37-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Ethylthiolane, S,S-dioxide	10178-59-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, nitro-, methyl ester	2483-57-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	5,0	0,0	0,0
Phosphorocyanidous difluoride	14118-40-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Pyridinol	109-00-2	0,0	0,0	0,0	1,4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, [(1,1-dimethylethyl)thio]-	24310-22-3	53,3	25,1	0,0	18,9	16,6	4,1	17,2	0,0	0,0
3-Ethoxyacrylonitrile	61310-53-0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetamide, 2-cyano-	107-91-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Carboethoxy-N-methylpyrrolidine	30727-23-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	6,4	0,0	0,0	0,0
4-Amino-6-hydroxypyrimidine	1193-22-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
p-Fluoroaniline	371-40-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,0	0,0
6-Oxabicyclo[3.1.0]hexane	285-67-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,6
1-n-Butoxy-2,3-dimethyldiaziridine	343928-70-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
anti-2-Acetoxyacetaldoxime	37858-07-4	17,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclopropanecarboxylic acid, 1-amino-	22059-21-8	0,0	0,0	8,9	0,0	0,3	1,5	0,8	1,1	1,3
Isoxazolidine	504-72-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanenitrile, 3,3'-oxybis-	1656-48-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,5	2,9	3,8
4(1H)-Pyridone	108-96-3	0,0	0,0	1,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Chloromethyl chloroacetate	6135-23-5	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0
α-Amino-t-butyrolactone	1192-20-7	2,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetaldoxime	107-29-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,4
3-Butene-1,2-diol, 1-(2-furanyl)-	19261-13-3	54,0	37,3	18,3	24,5	20,4	7,4	506,9	6,4	3,9
2-Fluoropyridine	372-48-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dinocap	39300-45-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



2,2-Dimethyl-propyl 2,2-dimethyl-propanesulfinyl sulfone	82360-14-3	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Pyridine, 2-chloro-6-(2-furanyl-methoxy)-4-(trichloromethyl)-	70166-48-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4-Pyridinol	626-64-2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0	0,0
3-Buten-2-one, 4-(1-aziridinyl)-	18277-57-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetamide, 2-chloro-, N-(2-propynyl)-	2030087	4,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-(2-Thienyl)-1-propanone	13679-75-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,0	0,0	0,0
Endo-3-acetamidocamphor	3750-49-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	2,1	1,8
5-Methyl-2-thiophenecarboxaldehyde	13679-70-4	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Propanol, 2,2-dimethyl-, nitrate	926-42-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Methane, isocyanato-	624-83-9	0,0	0,0	3,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methyl-3-thiosemicarbazide	21185-13-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Urea, ethyl-	625-52-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7
2-Bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-yl-ethanol	13080-91-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cyclobutanecarboxylic acid chloride	5006-22-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetic acid, hydrazide	1068-57-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Binapacryl	485-31-4	0,0	2,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2,5-Oxadiazole	288-37-9	0,0	0,0	0,0	7,0	13,5	10,1	14,3	10,5	12,2
Indane	496-11-7	23,2	14,7	1,4	14,0	21,6	15,0	14,0	12,4	8,9
Formamide, N-(cyanomethyl)-	5018-27-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Carbamoylmethyl-1,2-thiazolidine, 1,1-dioxide	63459-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phosphorodiamidous fluoride, tetramethyl-	1735-82-6	0,0	0,2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Ethyl-6-phenyl-1,3,4-thiadiazolo(3,2-a)(1,3,5)-triazine-5,7-dione	69378-04-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Tolyloxirane	2783-26-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2,5-Furandione, 3-methyl-	616-02-4	0,4	1,8	0,0	0,0	10,8	0,0	0,0	10,3	0,0
Ethanone, 1-(3-ethyloxiranyl)-	17257-81-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Thiazole, 2-methyl-	3581-87-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5
Benzene, 1,3-dichloro-	541-73-1	0,0	0,0	0,0	0,0	10,9	12,3	0,0	10,3	10,9
1H-Pyrazole, 5-methoxy-1,3-dimethyl-	53091-80-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	13980-04-6	0,0	2,5	0,0	4,4	0,0	0,0	5,1	5,9	6,4



Acetamide, N-2-propynyl-	65881-41-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Pyrrole-2,5-dione	541-59-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
N-(Dimethylthiophosphinyl)methylamine	42452-13-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxirane, 2-methyl-2-phenyl-	2085-88-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Phosphonic acid, (p-hydroxyphenyl)-	33795-18-5	0,0	0,0	0,0	19,9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Methyl-1-[(1H)-1,2,4-triazol-1-yl]butan-2-one	64922-02-7	0,0	0,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Furanmethanamine	617-89-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Acetyl-5-methylfuran	1193-79-9	0,0	10,6	0,0	12,1	15,8	12,8	20,3	12,2	15,6
Benzene, 2-methoxy-1-(2-nitroethenyl)-3-(phenylmethoxy)-	74810-83-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanone, 1-(4-fluorophenyl)-	403-42-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxazole	288-42-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,7	0,0	0,0	0,0
Ethaneperoxoic acid, 1-cyano-1-[2-(2-phenyl-1,3-dioxolan-2-yl)ethyl]pentyl ester	58422-92-7	1,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Chloropropionamide	27816-36-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,6	0,0
Thiodiglycolic anhydride	3261-87-8	0,0	0,0	0,0	0,0	5,2	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Butanamine, N-sulfinyl-	13165-70-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	824-22-6	68,9	48,9	0,0	29,0	46,8	2,7	0,0	0,0	21,5
Diethylpropion	90-84-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Nitro-2-propanone	10230-68-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2-Methylindene	2177-47-1	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4'-Methylpropiophenone	5337-93-9	8,4	6,6	1,1	2,9	7,4	3,5	6,8	2,8	3,4
2,3-Dimethyl-4-hydroxy-2-butenic lactone	1575-46-8	0,0	0,0	0,0	0,0	1,9	0,0	0,0	0,0	0,0
1-Oxa-3,4-diazacyclopentadiene	288-99-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	15,4
Carbonocyanidic amide, (trifluoromethyl)-	70856-23-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Propanenitrile, 2-hydroxy-	78-97-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	4,2
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1-dimethyl-	4912-92-9	16,2	14,3	0,0	6,9	0,0	4,5	9,8	6,0	0,0
N,N'-Bis(2,6-dimethyl-6-nitrosohept-2-en-4-one)	66737-12-0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,6-dimethyl-	17059-48-2	12,1	12,9	0,0	0,0	10,2	0,0	10,1	0,0	0,0
2'-Ethylpropiophenone	16819-79-7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,5
2(1H)-Naphthalenone, 3,4-dihydro-	530-93-8	5,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0



Benzenehexanenitrile, β,β -dimethyl-e-oxo-	62623-62-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzaldehyde, 4-(4-methylbenzyloxy)-	66742-58-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Allophanic acid, phenyl ester	49615-54-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0
O-Ethyl methylphosphonothioate	18005-40-8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzoyl benzyl disulfide	51840-31-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ethanethioic acid, S-(2-methylbutyl) ester	69078-80-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzonitrile, 3-ethoxy-	25117-75-3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	6682-71-9	18,2	9,9	1,1	4,4	9,8	0,0	12,7	0,0	0,0
Phenyl tert-butyl ketone	938-16-9	0,0	2,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzylcyclobutane	5244-88-2	0,0	35,5	0,0	0,0	28,9	0,0	24,2	6,8	0,0
Acetamide, 2,2,2-trifluoro-	354-38-1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
a-(Aminomethylene)glutaconic anhydride	67598-07-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3	0,0
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,6-trimethyl-	14276-95-0	11,4	5,3	0,0	2,8	5,6	0,0	0,0	0,0	0,0
Butyl isocyanatoacetate	17046-22-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3-Benzoyl-2-t-butyl-4-isopropylloxazolidin-5-one	104057-68-3	0,0	0,0	0,0	0,0	4,2	0,0	0,0	0,0	0,0
Urea	57-13-6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	0,0	0,0
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-5-methyl-	2809-64-5	0,0	15,4	0,9	2,2	11,9	4,2	14,7	4,5	5,9
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,3-trimethyl-	2613-76-5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Benzophenone	119-61-9	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,8	0,0
Isothiazole	288-16-4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,2	0,0
3,5-Dithioxo-2,3,4,5-tetrahydro-1,2,4-triazine	461-90-5	7,4	9,3	0,0	13,0	0,0	0,0	0,0	0,0	24,4
Dimethylphosphinic fluoride	753-70-8	1,2	2,7	0,0	2,0	0,5	0,0	0,0	0,0	0,0
1H-Indene, 1-ethylidene-	2471-83-2	23,5	24,2	0,0	10,0	23,9	0,0	33,8	12,7	16,8
Naphthalene, 5-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro-	42775-75-7	4,2	3,4	0,0	0,0	11,5	0,0	0,0	0,0	0,0

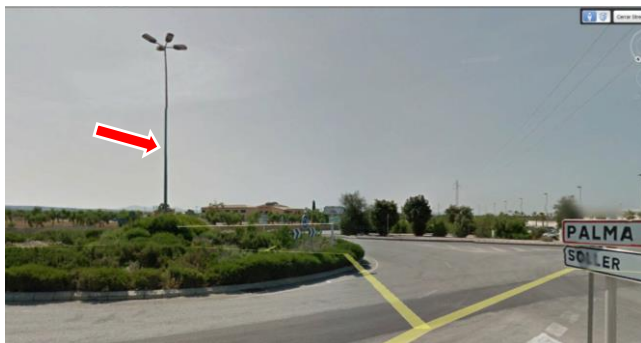
(*) The concentration of this compound can not be determined accurately

The concentrations indicated as 0,0 don't exceed 0.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$



Anexo E Ubicación de los puntos de medición

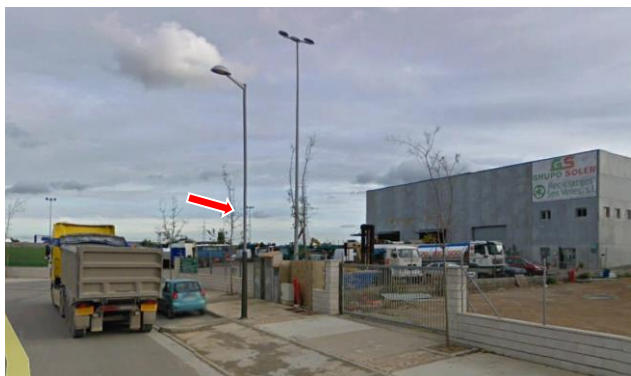
SR -1 Glorieta Tirme



SR-2: Carrer Alfabeguera, 38



SR-3: P.I. Ses Veles; Carrer Fonoll,54



SR-4: Disseminat Districte 2 Secció 4



SR-5



SR-6 C/ Alfabeguera 20A



SR-7 Camí de Sa Fita



SR-8: Av. Garrovers (Es Garrovers)



SR-9: C. Publico M^a Antonia Salva



SR-10, Son Sardina C/ de Ribas, 52



SR-11: C/ Rosa, 283, Marratxí



SR-12 Camí de Na Cerdana, 21



SR-13 C. de Miquel Fortaleza i Pinya, 24



SR-14 Palmañola, Av Sóller



PPI-1 Captador anclado en puente entre contenedores dentro de CLH



PPI-2 Captador anclado en mástil de cámara de vigilancia en aparcamiento CLH

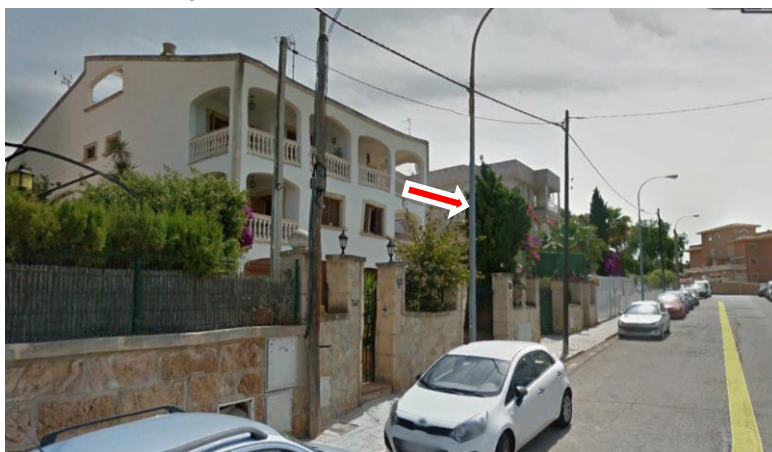
PPI-3 Captador anclado en mástil de cámara de vigilancia en lateral de parcela de CLH por el exterior



PPI-4 C/r Can Morro, 17 Palma



PPI-5- C/ Vista Alegre, 34



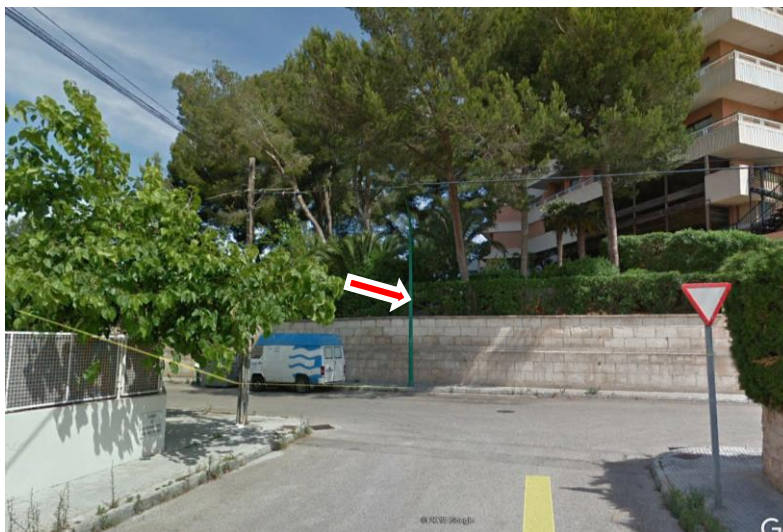
PPI-6 C/ Vista Alegre, 14



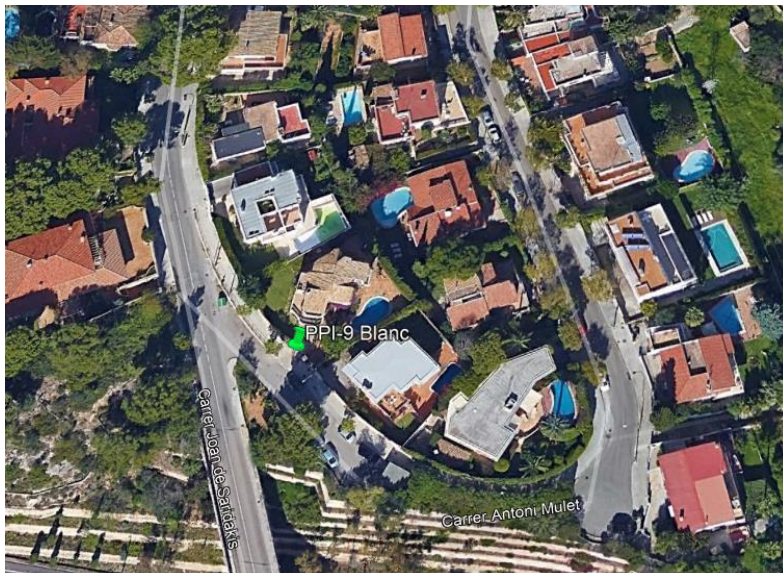
PPI-7 - Francesc de Verònica Bassa, 1



PPI-8 - C/ de Son Buit con Francesc de Verònica Bassa



PPI-9 Blanc - Blanc Carrer Joan de Saridakis, 50 (Fanal enlluminat)





Anexo F Datos meteorológicos considerados para el periodo de estudio

Fecha	Temp. Promedio	
	°C	K
05/09/2019	23,30	296,45
06/09/2019	22,30	295,45
07/09/2019	22,00	295,15
08/09/2019	22,10	295,25
09/09/2019	22,70	295,85
10/09/2019	22,20	295,35
11/09/2019	20,50	293,65
12/09/2019	24,00	297,15
13/09/2019	23,10	296,25
14/09/2019	25,30	298,45
15/09/2019	26,10	299,25
16/09/2019	25,00	298,15
17/09/2019	24,60	297,75
18/09/2019	24,10	297,25
19/09/2019	24,00	297,15
20/09/2019	24,40	297,55

Temp. Promedio Exposición Formaldehído (K): 295,62

Temp. Promedio Exposición COV, NH₃ y H₂S (K): 296,63



Anexo G Relación de tiempos de exposición en puntos en los que se toman muestras mediante dosímetros pasivos (NH₃, H₂S, COV)

Ref.	Instalación		Retirada		Días	Minutos
	Fecha	Hora	Fecha	Hora		
SR-1	05/09/2019	13:35	20/09/2019	13:08	14,98	23013
SR-2	05/09/2019	14:20	20/09/2019	13:20	14,96	22980
SR-3	05/09/2019	13:45	20/09/2019	12:33	14,95	22968
SR-4	05/09/2019	14:05	20/09/2019	12:08	14,92	22923
SR-5	05/09/2019	14:00	20/09/2019	12:42	14,95	22962
SR-6	06/09/2019	13:05	20/09/2019	13:25	14,01	21620
SR-7	06/09/2019	12:50	20/09/2019	13:35	14,03	21645
SR-8	06/09/2019	12:20	20/09/2019	12:15	14,00	21595
SR-9	06/09/2019	9:00	20/09/2019	8:20	13,97	21560
SR-10*	06/09/2019	13:30	Extraviado			
SR-11	06/09/2019	11:20	20/09/2019	9:18	13,92	21478
SR-12	06/09/2019	11:40	20/09/2019	9:24	13,91	21464
SR-13	06/09/2019	12:00	20/09/2019	9:36	13,90	21456
SR-14	06/09/2019	13:20	20/09/2019	8:45	13,81	21325
SR-15	06/09/2019	8:10	20/09/2019	8:10	14,00	21600
PPI-1	06/09/2019	9:45	20/09/2019	10:20	14,02	20195
PPI-2	05/09/2019	9:55	20/09/2019	10:25	15,02	21630
PPI-3	05/09/2019	10:02	20/09/2019	10:05	15,00	21603
PPI-4	05/09/2019	11:40	20/09/2019	10:45	14,96	21545
PPI-5	05/09/2019	11:45	20/09/2019	10:55	14,97	21550
PPI-6	05/09/2019	11:55	20/09/2019	10:50	14,95	21535
PPI-7	05/09/2019	12:05	20/09/2019	10:58	14,95	21533
PPI-8	05/09/2019	12:15	20/09/2019	11:01	14,95	21526
PPI-9	05/09/2019	12:25	20/09/2019	11:10	14,95	21525



Anexo H Relación de tiempos de exposición en puntos en los que se toman muestras mediante dosímetros pasivos (Formaldehído)

Ref.	Instalación		Retirada		Días	Minutos
	Fecha	Hora	Fecha	Hora		
SR-1	05/09/2019	13:35	13/09/2019	12:40	6,96	10025
SR-2	05/09/2019	14:20	13/09/2019	12:30	6,92	9970
SR-3	05/09/2019	13:45	13/09/2019	12:55	6,97	10030
SR-4	05/09/2019	14:05	13/09/2019	11:05	6,88	9900
SR-5	05/09/2019	14:00	13/09/2019	13:06	6,96	10026
SR-6	06/09/2019	13:05	13/09/2019	12:32	7,98	11487
SR-7	06/09/2019	12:50	13/09/2019	12:25	7,98	11495
SR-8	06/09/2019	12:20	13/09/2019	11:15	7,95	11455
SR-9	06/09/2019	9:00	13/09/2019	13:25	8,18	11785
SR-10*	06/09/2019	13:30	Extraviado			
SR-11	06/09/2019	11:20	13/09/2019	12:00	8,03	11560
SR-12	06/09/2019	11:40	13/09/2019	12:05	8,02	11545
SR-13	06/09/2019	12:00	13/09/2019	11:30	7,98	11490
SR-14	06/09/2019	13:20	13/09/2019	13:10	7,99	11510
SR-15	06/09/2019	8:10	13/09/2019	8:10	8,00	11520
PPI-1	06/09/2019	9:45	13/09/2019	12:40	7,00	10080
PPI-2	05/09/2019	9:55	13/09/2019	9:45	8,00	11515
PPI-3	05/09/2019	10:02	13/09/2019	9:50	7,96	11463
PPI-4	05/09/2019	11:40	13/09/2019	9:05	7,93	11425
PPI-5	05/09/2019	11:45	13/09/2019	10:05	7,94	11427
PPI-6	05/09/2019	11:55	13/09/2019	10:12	7,93	11420
PPI-7	05/09/2019	12:05	13/09/2019	10:15	7,93	11413
PPI-8	05/09/2019	12:15	13/09/2019	10:18	7,92	11409
PPI-9	05/09/2019	12:25	13/09/2019	10:24	7,93	11415

