

เอกสารอ้างอิง

1. Bandelier, J., Chunhieng, T., Olle, M., Montet, D. (2002) **Original Study of the Biochemical and Oil Composition of the Cambidia Nut Irvingia malayana.** *J. Agri. Food Chem.* 50(6): 1478-1482.
2. กระบกจาก http://www.rspg.thaigov.net/scbotdat/plantdat/irvingia/imalay_1.htm และ <http://wanakorn.com/tree/krabok.php>
3. Panee Sirisa-ard, Suporn Charumanee, Sirivipa Piyamongkol, Duangporn Winijkul and Songwut Yotsawimonwat. **Component Investigation and Physicochemical Properties Evaluation of Krabok Wax.** *Asian Symposium for Pharmaceutical Science in JSPS Asian Core Program.* January 26-27th, 2006. Kyushu University, Fukuoka.
4. ศิริวิภา ปิยะมงคล, ทรงวุฒิ ยศวิมลวัฒน์, ดวงพร วินิจกุล, พาณี ศิริสะอาด และสุพร จารุมณี. **การศึกษาสมบัติทางเคมีและทางกายภาพของไขกระบก,** *Thai Pharm Health Sci. J.* 2006; 1(2) : 26-30.
5. ศิริวิภา ปิยะมงคล, ทรงวุฒิ ยศวิมลวัฒน์, ดวงพร วินิจกุล, พาณี ศิริสะอาด และสุพร จารุมณี. **การพัฒนายาพื้นสำหรับยาเหน็บจากไขกระบก.** *Thai Pharm Health Sci. J.* 2006; 1(2) : 31-37.

ภาคผนวก

ตาราง ผลการสำรวจครีมบำรุงมือและเล็บในท้องตลาด จากผู้ใช้

ยี่ห้อครีม	กลิ่น	บริเวณที่ใช้		ลักษณะเนื้อครีม	ความรู้สึกหลังการใช้
		มือ	เท้า		
1.O Pess	Apple	/		เนื้อครีมดี	กลิ่นมันแรงมาก ราคาถูก
2. Oli Hand cream		/		เจลชุ่มเล็กน้อยเวลาทา เจลจะกลายเป็นน้ำ ซึ่มซาบดี	เหนอะๆ เหนียวๆ มือ ไม่รู้สึกว่ามัน เท้าไหม้
3. Eu Hand cream		/		เนื้อครีมเข้มข้น ซึ่มยาก ไปนิด	กลิ่นแรง
4. Vas Hand cream		/		เนื้อครีมจะข้นกว่าวา สลิ้นที่ผลิตในประเทศไทย ครีมซึ่มซาบดี	กลิ่นหอมดี แต่ก็ไม่ได้รู้สึกว่าบำรุงล้ำลึกมากมาย เท้าไหม้
5. Mi Ri Hand Cream	Powdery	/		เนื้อครีมซึ่มซาบดี	เนื้อครีมไม่ความเหนียว ราคาไม่แพง
6. Mark S	Camellia	/		เนื้อครีมไม่ค่อยเข้มข้น เท้าไหม้ เนื้อครีมซึ่มซา บดี	กลิ่นดอก Camellia จะหอมอ่อนๆ
7. Mark S	Rose	/		เนื้อครีมดี	กลิ่นติดทน ไม่หอมจนชวนให้ปวดหัว กลิ่นหอมกุหลาบอ่อนๆ ให้ความรู้สึก หอมสะอาด
8. Bath & Body Hand lotion	Sun Ripened Raspberry	/		เนื้อครีมดี	กลิ่นจะหอมทน หอมนานแล้ว มี ความสามารถพิเศษในการฆ่าเชื้อโรค ราคาก็ไม่แพง ทาแล้วจะรู้สึกว่ามือได้รับการ บำรุงจริงๆ เนียนนุ่ม

ชื่อครีม	กลิ่น	บริเวณที่ใช้		ลักษณะเนื้อครีม	ความรู้สึกหลังการใช้
		มือ	เท้า		
9. Crab & Ever Hand TherapyI	Lavender และ Summer Hill	/		เนื้อครีมดีมาก	ใช้เพียงครั้งแรก จะรู้สึกได้เลยว่ามือนุ่ม ลื่นขึ้น แต่ไม่ชอบตรงแพคเกจนี้แหละ เป็นสังกะสี ยังกะหลอดยาสีฟัน พกพาลำบาก เพราะอาจไปขีดขีดกับอย่างอื่น ในกระเป๋าให้เกิดรอยได้ และหลอดฉีกขาดได้ง่ายด้วย
10. L' O	Lavender	/		เนื้อครีมเข้มข้น	ใช้ครั้งแรกมือก็จะนุ่มขึ้นจริงๆ
11. Crab & Ever Hand TherapyII	Gardeners	/		เนื้อครีมดี	กลิ่นหอมอ่อนๆ งามๆ ใช้แล้วติดใจ
12. L' O ผสม Shea Butter 20%		/		เนื้อครีมเข้มข้น ชิมซาบดี	กลิ่นหอมละมุน เพียงครั้งแรกที่ใช้ จะรู้สึกได้ว่ามือที่แห้งกร้าน มันเนียนนุ่มขึ้น อย่างเห็นได้ชัดเจน
13. Vas Heal Guard			/	เนื้อครีมเข้มข้นสุดๆ	กลิ่นหอมมากกก ทาส้นเท้าที่แห้งๆ แล้วใส่ถุงเท้าทิ้งไว้ทั้งคืน ประสิทธิภาพดีจริงๆ

ตัวอย่างสารองค์ประกอบในเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บที่มีจำหน่ายในท้องตลาด

ตัวอย่างที่ 1

Polyglyceryl-2trisostearate

Cetylhexanoate

Acetylatedlanolin

Diisostearylmalate

Ethylene/propylene copolymer
Hydrogenated polyisobutene
Ceresin
Triethylhexanoic
Microcrystalline wax
Candelilla wax
Silica dimethylsilylate
Butyl paraben
Ethyl paraben
Dimethicone (Silicone oil 305)
Lecithin

ตัวอย่างที่ 2

Cetostearyl alcohol
Cetyl palmitate
Isopropyl myristate
Sorbitan monostearate
Polysorbate60
Triethanolamine
Benzyl alcohol

ตัวอย่างที่ 3

White beeswax
BHT
Lanolin alcohol (Lanixol AWS)
Cetomacrogol 1000
Methyl paraben
Propyl paraben

ตัวอย่างที่ 4

Glyceryl monostearate SE
Alfa-tocopherol
Titanium dioxide (micronized)

ตัวอย่างที่ 5

Hydrogenated vegetable oil

Petrolatum

Acetoglycirides

Canauba wax

Candelilla wax

Bees wax

Ozokerite 70-72°

Spermaceti

Ceresin wax

Silphenylene copolymers

Castor oil

สารแต่งกลิ่น

Rose alcohol

Rose ester

Aniseed, cinnamon, clove, lemon, orange, tangerine, ylang ylang, geranium oil

ตัวอย่างที่ 6

Isopropyl linoleate

Lanolin anh

Liquid paraffin

Oleyl alcohol

Stearic acid

Bromo acid dye

ตัวอย่างที่ 7

Diethy sebacate

Eosin paste

Butylene glycol

Ceresin, 70°

Cetyl alcohol

Liquid paraffin, Heavy

Laramine GM-101

Propylene glycol monomyristate

Aceto glyceride L/C

Aceto glyceride S/C

Polyethylene glycol 200

Polyethylene glycol 400

Polyethylene glycol 600

Polyethylene glycol 1000

PEG 400 monostearate

Ethanol

Isopropyl alcohol, pure

Distilled coconut triglyceride

EDTA, sodium

ตัวอย่างที่ 8

Moisture lotion

Glycerin

Steric acid triple press

PEG-100 stearate

Wheat germ oil

Xantan Gum

Vitamin E palmitate

Vitamin E acetate

Glyceryl stearate

Carbopol 2020

Ethyl paraben

Tetrasodium EDTA

Blue (CI42090)

Yellow 5(CI19140)

Triclosan 0.3%

Phenoxy ethanol

Acetylate lanolin alcohol

Pro vitamin B5

Hydroxy propylmethyl cellulose

Butylene alcohol

ตัวอย่างที่ 9 Citrus twist

Mineral oil

Stearic acid

Glyceryl stearate

Sunflower seed oil

Cetyl alcohol

Lanolin alcohol

Ascorbylmethylsilanol pectinate

Ascorbic acid

Biotin

Tocopheryl acetate

Retinyl palmitate

Agar

Lavender extract

Corylus americana seed extract

Salvia officinalis(sage) leaf extract

Paraffin

Propyl paraben methyl paraben

Triethanolamine

Benzophenone-3

Disodium EDTA

Yellow 10/amarinllo

Titanium dioxide

ข้อมูลสำหรับอาสาสมัคร

ชื่อโครงการศึกษาวิจัย : การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บจากไชกระบก

(Development of hand and nail cream)

ผู้วิจัย : รศ.ดร.พานี ศิริสะอาด และคณะ

เมื่อท่านได้รับการชักชวนให้เข้าร่วมการวิจัยนี้ ผู้วิจัยขอให้ท่านสละเวลาอ่าน (หรือผู้วิจัยเป็นผู้อ่านให้ท่าน) และทำความเข้าใจกับข้อมูลข้างล่างก่อน หากมีข้อสงสัยประการใดเกี่ยวกับการวิจัยหรือสิทธิของท่าน กรุณาซักถามจากผู้วิจัยซึ่งจะเป็นผู้ที่สามารถให้ความกระจ่างแก่ท่านได้ เมื่อท่านตัดสินใจเข้าร่วมการวิจัยนี้แล้ว ท่านจะได้รับเอกสารข้อมูลสำหรับอาสาสมัครฉบับนี้ และสำเนาใบยินยอมพร้อมลายเซ็นชื่อของท่านเก็บไว้อีก 1 ฉบับ ขอขอบคุณที่ท่านได้สละเวลาอ่านข้อมูลเกี่ยวกับงานวิจัยนี้

สรุปย่อโครงการวิจัย (Project summary)

กระบก (*Irvingia malayana*. Oliv. ex A. Benn.) เป็นพืชที่พบทั่วทุกภาคในประเทศไทย มีผลรูปไข่ มีเนื้อหุ้มเมล็ด เนื้อในเมล็ดมีสีขาว สามารถรับประทานได้ เมื่อสกัดน้ำมันออกจากเมล็ดพบว่า จะเกิดการแข็งตัวที่อุณหภูมิห้อง ซึ่งก็มีรายงานว่าน้ำมันที่ได้จากเมล็ดกระบกสามารถนำมาใช้ทำสบู่ และเทียนไข นอกจากนั้นในรายงานวิจัยของ Bandelier และคณะยังกล่าวไว้ว่ากรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบของไชกระบกจะเป็นชนิดอิ่มตัวสูงถึงร้อยละ 85 โดยจะเป็น myristic acid (C14:0) ในปริมาณสูงถึงร้อยละ 42.1 ซึ่งไม่ค่อยพบในน้ำมันพืชทั่วไป ยกตัวอย่างเช่น น้ำมันปาล์มจะมี myristic acid เป็นองค์ประกอบเพียงร้อยละ 17 เท่านั้น นอกจากนี้ยังมีปริมาณของสเตอโรลสูงมาก มีการหลอมตัวที่อุณหภูมิช่วง 38-39 องศาเซลเซียสจึงเหมาะแก่การนำมาใช้ในอุตสาหกรรมการผลิตยาและเครื่องสำอาง ผลงานวิจัยของกลุ่มก็ได้ยืนยันการพบไขมันในไชกระบกสูงถึงร้อยละ 87 โดยจะเป็น myristic acid ร้อยละ 42 และ lauric acid ร้อยละ 48 ตามลำดับ ซึ่งมีสมบัติเหมาะแก่การเตรียมเป็นครีมทาผิวแห้ง เพราะนอกจากจะให้ความนุ่มนวลแก่ผิวแห้งแล้ว ยังไม่ก่อให้เกิดการหื่นจากน้ำมันซึ่งเป็นองค์ประกอบหลักในตำรับอีกด้วย กลุ่มผู้วิจัยจึงได้ศึกษาความเป็นไปได้ที่จะนำไชกระบกมาใช้เป็นส่วนประกอบในยาพื้นเพื่อให้ได้ตำรับครีมที่เน้นการบำรุงมือและเล็บ โดยหวังว่าจะช่วยลดการนำเข้ายาพื้นประเภทไชแข็งหรือกรดไขมันไม่อิ่มตัว เช่น cetyl alcohol และ stearic acid จากต่างประเทศ และเป็นการเพิ่มมูลค่าของวัตถุดิบอีกด้วย

วัตถุประสงค์ของโครงการ

เพื่อพัฒนาตำรับครีมบำรุงมือและเล็บ ที่มีส่วนผสมจากสารธรรมชาติ มีลักษณะทางกายภาพที่ดี มีความคงสภาพ นำใช้

ทำไมต้องทำการวิจัยนี้ในอาสาสมัคร

เนื่องจากงานวิจัยเป็นการพัฒนาผลิตภัณฑ์เพื่อนำมาใช้เป็นเครื่องสำอางในมนุษย์ ดังนั้นการทดสอบการระคายเคือง การประเมินความพึงพอใจและประสิทธิผลของผลิตภัณฑ์ต่อผิวหนังมนุษย์จึงเป็นสิ่งสำคัญอย่างยิ่ง แม้จะพบการนำเมล็ดกระดูกมาใช้เป็นอาหารพื้นบ้านมาเป็นเวลานาน อีกทั้งยังมีรายงานการนำไขกระดูกมาใช้ทำสบู่ก็ตาม การทดสอบการระคายเคืองก็ยังคงเป็นสิ่งจำเป็นที่ควรกระทำเพื่อให้มั่นใจว่าผลิตภัณฑ์ที่ได้พัฒนาขึ้นมีความปลอดภัยต่อผิวหนังมนุษย์ เพราะตำรับที่พัฒนาขึ้นมีองค์ประกอบอื่นอีกหลายชนิดที่อาจก่อให้เกิดการระคายเคืองผิวหนังในบางคน เช่น สารลดแรงตึงผิว สารกันเสีย หรือน้ำมันธรรมชาติบางตัว เป็นต้น ในส่วนการประเมินประสิทธิผลของผลิตภัณฑ์ต่อผิวหนังมนุษย์จะทำให้ทราบถึงผลในการป้องกันการสูญเสียความชุ่มชื้นของผิวหนัง โดยเฉพาะมือและเล็บซึ่งเป็นบริเวณที่สัมผัสกับสารชำระล้างจำพวกสบู่ ผงซักฟอก น้ำยาล้างจาน และน้ำยาทำความสะอาดที่มีฤทธิ์กัดกร่อนอยู่เป็นประจำ นอกจากนี้การประเมินความพึงพอใจก็เป็นสิ่งจำเป็นพื้นฐานของการพัฒนาสูตรตำรับครีมเพื่อให้มั่นใจว่าเป็นที่ยอมรับของผู้ใช้ ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่จะต้องทำการทดสอบกับผิวหนังของอาสาสมัครโดยตรงเพื่อให้ได้ข้อมูลทางวิทยาศาสตร์ที่น่าเชื่อถือ และเป็นที่ยอมรับของผู้ใช้

เกณฑ์การคัดเลือกอาสาสมัครเข้าโครงการ

1. อาสาสมัครยินยอมเข้าโครงการ โดยมีการเซ็นยินยอมในหนังสือแสดงความยินยอม การเข้าร่วมในโครงการวิจัย
2. เพศหญิง และมีอายุ 30 ปีขึ้นไป
3. สามารถปฏิบัติตามขั้นตอนการวิจัยได้ตลอดช่วงการวิจัย
4. อาสาสมัครเป็นบุคคลที่มีสุขภาพดี ไม่มีอาการหรือลักษณะใดลักษณะหนึ่ง ดังนี้
 - 4.1 ผื่นแพ้ปรากฏให้เห็น
 - 4.2 อยู่ระหว่างการรับประทานยาแก้แพ้หรือยาใดๆ
 - 4.3 มีประวัติเป็นโรคภูมิแพ้ทางผิวหนัง
 - 4.4 ผิวหนังถลอก เป็นแผล หรืออยู่ในสภาพที่ผิดปกติ

เกณฑ์การไม่รับอาสาสมัครเข้าโครงการ

1. อาสาสมัครที่ไม่ได้มีการเซ็นยินยอมในหนังสือแสดงความยินยอมการเข้าร่วมในโครงการวิจัย
2. อาสาสมัครที่เข้าร่วมโครงการกับงานวิจัยอื่นอยู่แล้ว
3. ไม่เข้าตามเงื่อนไขเกณฑ์การคัดเลือกอาสาสมัครเข้าโครงการดังกล่าวข้างต้น

ท่านจะต้องปฏิบัติตัวอย่างไร

หากท่านตัดสินใจเข้าร่วมการศึกษาวิจัยนี้ ท่านจะถูกขอร่องให้เซ็นชื่อลงในใบยินยอม ท่านจะได้รับการอธิบายเกี่ยวกับรายละเอียดของโครงการวิจัย ขั้นตอนการวิจัย วิธีการที่ใช้ทดสอบ และสิทธิที่จะได้รับ หลังจากนั้นท่านจะต้องปฏิบัติตามวิธีการทดสอบอย่างเคร่งครัด และมารับการวิเคราะห์สภาพผิวตามที่ผู้วิจัยนัดหมายทุกครั้ง

ความเสี่ยงจากการเข้าร่วมการวิจัยนี้

ท่านอาจเกิดการแพ้บริเวณผิวหนังที่ทดสอบใช้ผลิตภัณฑ์ในลักษณะของผื่นแพ้ มีอาการบวมแดง หรือคันได้ หากเกิดอาการไม่พึงประสงค์ที่บริเวณผิวหนังดังกล่าวให้รีบทำการปฐมพยาบาลเบื้องต้น โดยการเช็ดครีมออกและล้างผิวหนังด้วยน้ำสะอาด หากอาการไม่รุนแรงมากให้ใช้ 0.1% triamcinolone (TA) cream ทาบางๆบริเวณที่เป็น และ/หรือรับประทานยาแพ้ กรณีมีอาการรุนแรงให้พบแพทย์ทันที

ค่าตอบแทนและค่าชดเชยความเสียหาย

ค่าตอบแทนอาสาสมัคร 200 บาท/คน

ค่าชดเชยความเสียหาย รับผิดชอบค่าใช้จ่ายจากการรักษาทั้งหมดและจะได้รับการชดเชยรายได้ที่สูญเสียไปในระหว่างการรักษาพยาบาลดังกล่าวในวงเงินไม่เกิน 500 บาท

การดูแลและรักษา หากพบความผิดปกติเกิดขึ้นระหว่างการทดสอบ อาสาสมัครสามารถติดต่อผู้รับผิดชอบโครงการได้ตลอดเวลาตามเบอร์โทรหรือที่อยู่ที่ได้ให้ไว้

ท่านจะทำอย่างไรหากท่านไม่ต้องการเข้าร่วมการศึกษาวิจัย หรือเปลี่ยนใจระหว่างร่วมการศึกษาวิจัย

การเข้าร่วมวิจัยนี้เป็นไปโดยสมัครใจ หากท่านไม่ต้องการเข้าร่วมการศึกษาวิจัย ท่านสามารถที่จะปฏิเสธไม่ตอบแบบสอบถาม หรือหากท่านเปลี่ยนใจภายหลังเข้าร่วมการศึกษาวิจัย ท่านสามารถถอนตัวได้ทุกเมื่อ

การปกป้องรักษาข้อมูล : ข้อมูลใดบ้างที่จะถูกเก็บรวบรวมไว้จากการศึกษานี้

ข้อมูลส่วนตัวที่ท่านไม่ต้องการเปิดเผยจะถูกเก็บรวบรวมไว้โดยผู้วิจัยและนำมาใช้เพื่อวัตถุประสงค์ทางการวิจัยเฉพาะในส่วนที่เกี่ยวข้องกับการศึกษา

หากท่านมีคำถามเกี่ยวกับการศึกษานี้ท่านสามารถติดต่อใครได้บ้าง

หากท่านมีคำถาม หรือมีความวิตกกังวลเกี่ยวกับการศึกษาวิจัยนี้ หรือสงสัยว่าท่านกำลังได้รับบาดเจ็บจากการเข้าร่วมการวิจัยนี้ กรุณาติดต่อ รองศาสตราจารย์ ดร.พานี ศิริสะอาด ได้ที่ภาควิชาวิทยาศาสตร์เภสัชกรรม คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ โทรศัพท์ 053-944342-3

**หนังสือแสดงความยินยอมของอาสาสมัคร
การวิจัยเรื่อง การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บจากไขกระดูก**

วันที่.....เดือนพ.ศ.

ข้าพเจ้า(นาย,นางนางสาว).....บ้านเลขที่..... หมู่ที่.....ถนน/ตำบล.....

อำเภอ.....จังหวัด.....รหัสไปรษณีย์.....โทรศัพท์.....

ก่อนที่จะลงนามในใบยินยอมให้ทำการวิจัยนี้ ข้าพเจ้าได้รับการอธิบายจากผู้วิจัย ถึงวัตถุประสงค์ของการวิจัย วิธวิจัย อันตราย หรืออาการที่อาจเกิดขึ้นจากการวิจัยอย่างละเอียด และมีความเข้าใจดีแล้ว

ผู้วิจัยรับรองว่าจะตอบคำถามต่างๆที่ข้าพเจ้าสงสัยด้วยความเต็มใจ ไม่ปิดบัง ซ่อนเร้น จนข้าพเจ้าพอใจ ข้าพเจ้าเข้าร่วมโครงการนี้ด้วยความสมัครใจ และมีสิทธิ์ที่จะบอกเลิกการเข้าร่วมโครงการวิจัยนี้เมื่อใดก็ได้

ผู้วิจัยรับรองว่า หากเกิดอันตรายใดๆด้วยเหตุแห่งการวิจัยนี้ ข้าพเจ้าจะได้รับการรักษาพยาบาลโดยไม่คิดมูลค่าและจะได้รับการชดเชยรายได้ที่ได้สูญเสียไปในระหว่างการรักษาพยาบาลดังกล่าว ในวงเงินไม่เกิน 500 บาท นอกจากนี้ผลการทดสอบของอาสาสมัครที่เข้าร่วมโครงการจะถือเป็นความลับส่วนบุคคล จะไม่เปิดเผยจนกว่าจะได้รับอนุญาตจากอาสาสมัครที่เข้าร่วมโครงการ

ในกรณีที่เกิดข้อข้องใจหรือความผิดปกติจากการทดสอบใดๆที่ข้าพเจ้าต้องการปรึกษาผู้วิจัย ข้าพเจ้าสามารถติดต่อกับผู้วิจัย คือ รองศาสตราจารย์ ดร.พานี ศิริสะอาด ได้ที่ภาควิชาวิทยาศาสตร์เภสัชกรรม คณะเภสัชศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่ โทรศัพท์ 053-944342-3

ข้าพเจ้าได้อ่านข้อความข้างต้นแล้ว และมีความเข้าใจดีทุกประการ จึงได้ลงนามในใบยินยอมฉบับนี้ด้วยความเต็มใจ

ลงนาม.....

อาสาสมัครผู้ยินยอม

(.....)

ลงนาม.....

ผู้รับผิดชอบโครงการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.พานี ศิริสะอาด)

ลงนาม.....พยาน

(.....)

ลงนาม.....พยาน

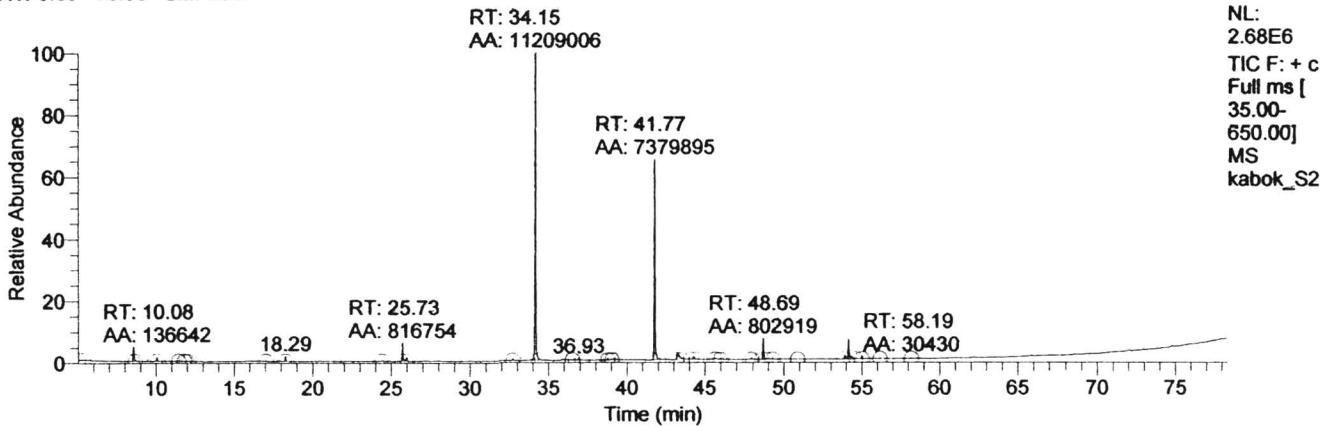
(.....)

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
GC MS Library search S2

Library Search Report # 2

Data File: kabok_S2 Orig Data Path: kabok_S2.RAW
Curr Data Path: C:\Xcalibur\Data\Ake\ Sample Type: Unknown
Sample ID: 1 Sample Name:
Operator: PolarisQ Acquisition Date: 02/26/10 19:40:41
Run Time (min): 73.35 Comments: 3g_2BF_3MeOH
Vial: 208 Inst Method: C:\Xcalibur\methods\jeab\scf_extract.meth
Proc Method: C:\Xcalibur\methods\Ake\mint

RT: 5.00 - 78.35 SM: 15G



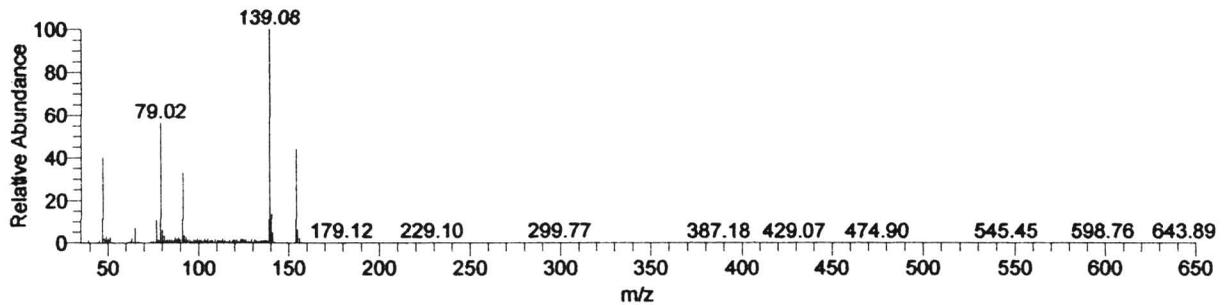
NL:
2.68E6
TIC F: + c
Full ms [
35.00-
650.00]
MS
kabok_S2

RT	Peak Area	Area %	S/N
5.00	48000	0.20	4.06
8.57	561104	2.31	55.23
10.08	136642	0.56	60.21
11.47	15091	0.06	2.14
11.82	4929	0.02	2.16
12.02	10837	0.04	2.07
17.05	31282	0.13	3.36
18.29	166080	0.68	33.30
24.37	28241	0.12	5.61
25.73	816754	3.36	68.43
32.72	60768	0.25	9.37
34.15	11209006	46.09	1679.73
35.91	231603	0.95	3.51
36.93	247419	1.02	8.26
38.79	50662	0.21	4.00
38.99	67531	0.28	3.54
39.18	115437	0.47	4.16
41.77	7379895	30.34	351.94
43.24	642399	2.64	8.54
44.26	221863	0.91	5.27
45.66	66778	0.27	3.90
45.98	57056	0.23	4.16
47.93	67080	0.28	7.41

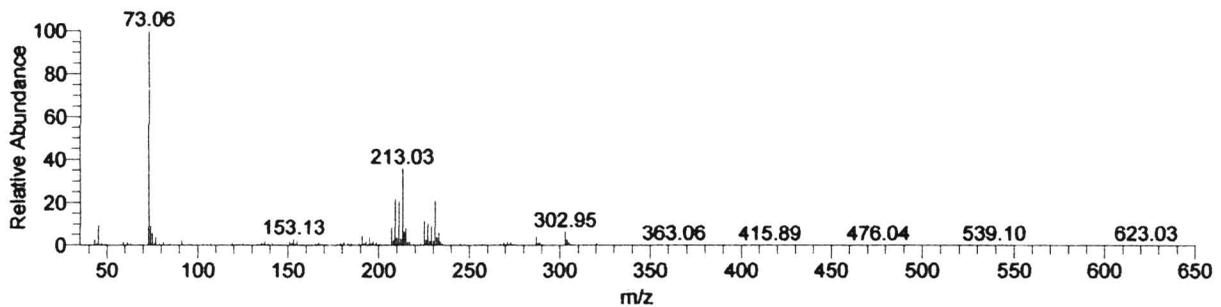
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

48.69	802919	3.30	93.71
49.30	51123	0.21	5.60
50.90	11951	0.05	2.95
54.15	1073646	4.41	112.23
55.01	87610	0.36	7.96
56.17	27952	0.11	3.71
58.19	30430	0.13	5.09

RT	Name	SI	Library	Formula
5.00	Oxirane, 2-(chloromethyl)-2-cyclopropyl-	245	mainlib	C6H9ClO
5.00	4-Cyclopropylnorcarane	276	mainlib	C10H16
5.00	Cyclohexaneethanol, α -methylene-	304	mainlib	C9H16O



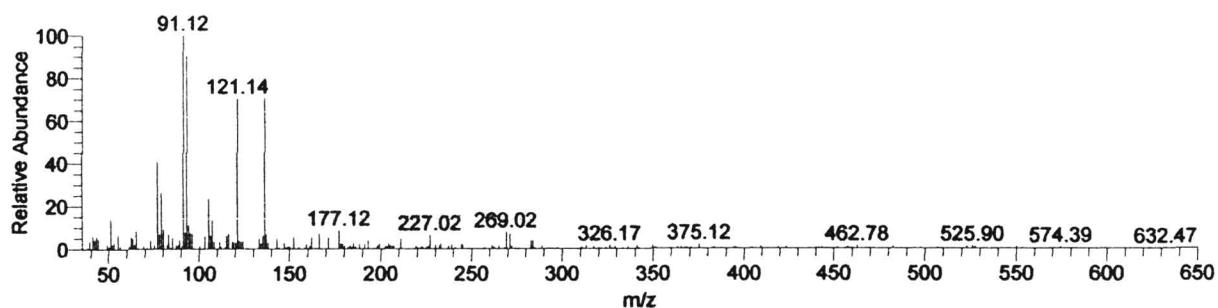
RT	Name	SI	Library	Formula
8.57	2-Propanone, (1-methylethyl)(2-propenyl)hydrazone	524	mainlib	C9H18N2
8.57	p-Toluenesulfinylamide	526	mainlib	C7H9NOS
8.57	3-Acetyl-2,5-dimethylthiophene	549	replib	C8H10OS



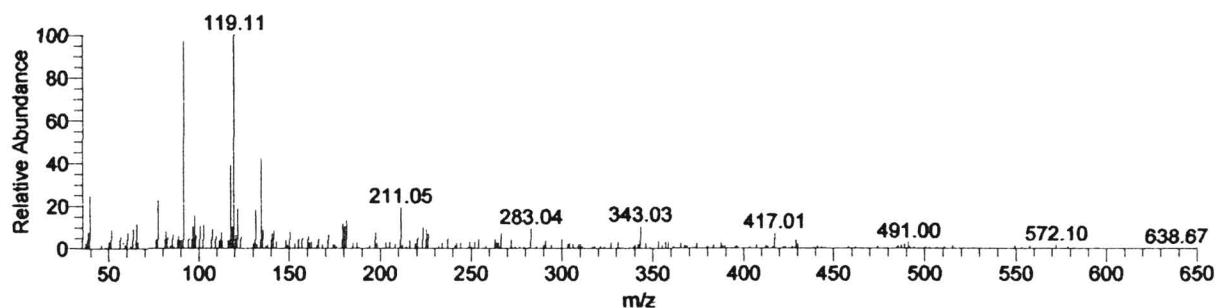
RT	Name	SI	Library	Formula
10.08	1,1,1-Trimethyl-4,4-dichloro-4-vinylidisilylethylene	394	mainlib	C7H16Cl2Si2
10.08	4-Methoxymandelic acid, ethyl ester, TMS	396	mainlib	C14H22O4Si
10.08	1-Butyl-3-methylimidazolium	428	nist_msms	C8H15N2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

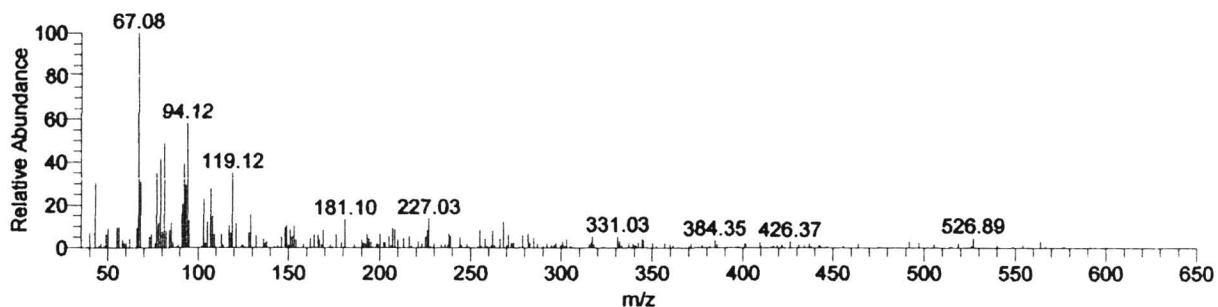
{#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
11.47	Diazene, methylphenyl-, 1-oxide, (E)-	287	mainlib	C7H8N2O
11.47	Cyclopenta[c]pyran-1,3-dione, 4,4a,5,6-tetrahydro-4,7-dimethyl-	330	mainlib	C10H12O3
11.47	Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethylidene)-	405	mainlib	C10H16

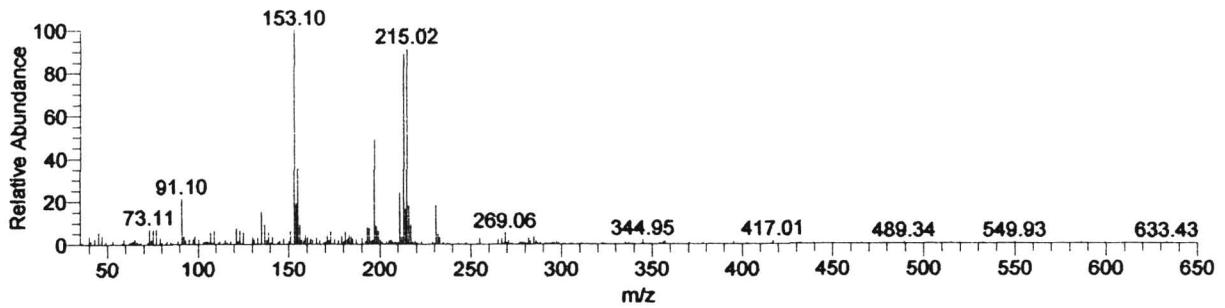


RT	Name	SI	Library	Formula
11.82	2-Cyclohexene-6-carboxylic acid, 3-methyl-1-(5-oxo-3,4-dihydro-2H-pyrrolyl)-, ethyl ester	128	mainlib	C14H21NO3
11.82	Benzeneethanamine, 1,3,4-trimethyl-	275	mainlib	C11H17N
11.82	2,3-Dimethylamphetamine	279	mainlib	C11H17N

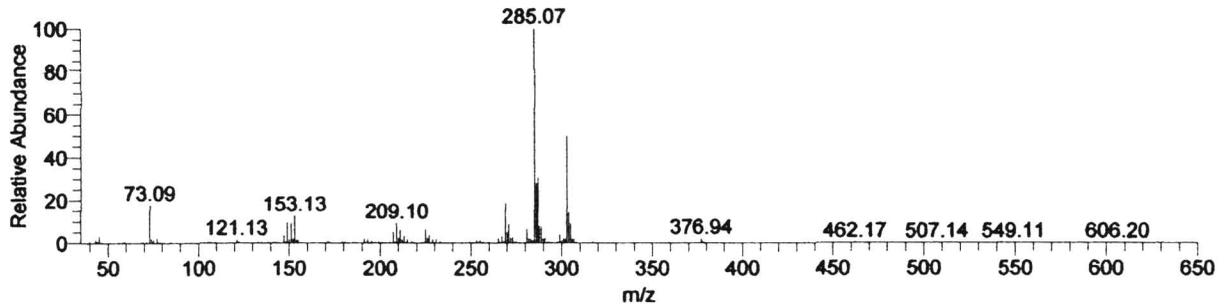


RT	Name	SI	Library	Formula
12.02	Mercury, chloro(3,17-dioxoandrosta-1,4,6-trien-2-yl)-	161	mainlib	C19H21ClHgO2
12.02	1-Methylene-2b-hydroxymethyl-3,3-dimethyl-4b-(3-methylbut-2-enyl)-cyclohexane	194	mainlib	C15H26O
12.02	2-Cyclopentene-1-acetaldehyde, 2-formyl-1,3-dimethyl-	314	mainlib	C10H14O2

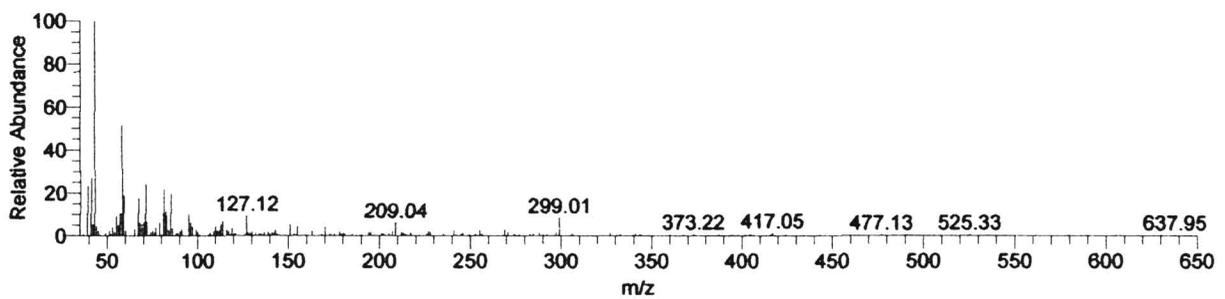
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
 {#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
17.05	2-Propenoic acid, 3,3-dibromo-, methyl ester	176	mainlib	C4H4Br2O2
17.05	1-Propene, 1,1,2,3,3,3-hexachloro-	276	replib	C3Cl6
17.05	Phenol, 2-[(phenylimino)methyl]-, N-oxide	339	mainlib	C13H11NO2



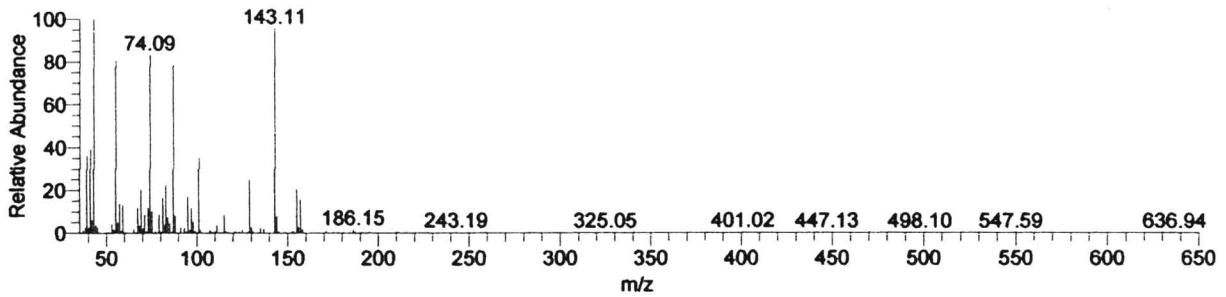
RT	Name	SI	Library	Formula
18.29	Diazepam	491	nist_msms	C16H13ClN2O
18.29	Oxazepam	636	nist_msms	C15H11ClN2O2
18.29	Diazepam	660	nist_msms	C16H13ClN2O



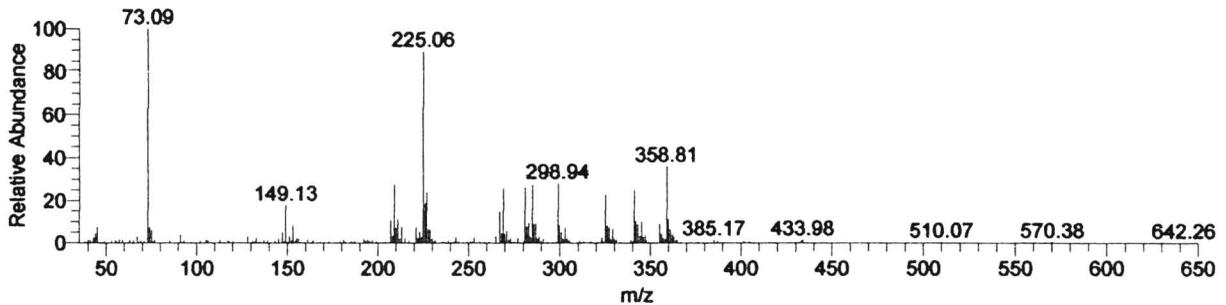
RT	Name	SI	Library	Formula
24.37	Tetradecanoic acid, 2-iodo-	115	mainlib	C14H27IO2
24.37	(5S,6R)-Thymidine glycol	120	nist_msms	C10H16N2O7
24.37	4-Cyclooctene-1-carboxaldehyde	388	mainlib	C9H14O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

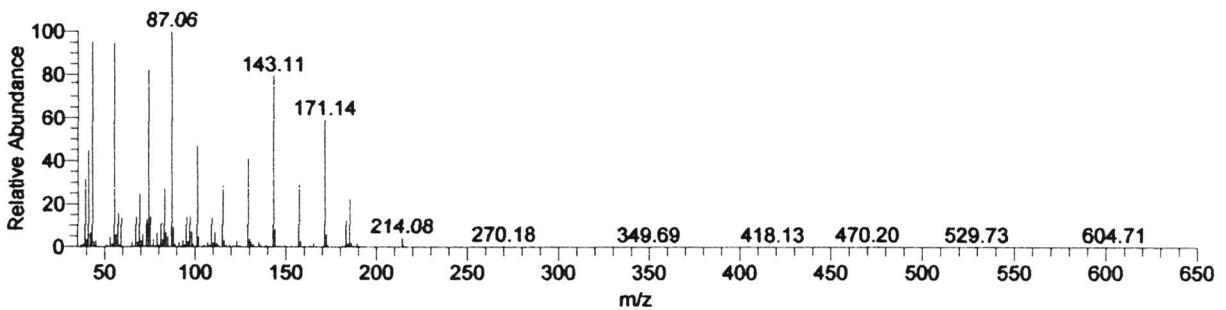
{#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
25.73	Methyl 6-methyl heptanoate	549	mainlib	C9H18O2
25.73	Decanoic acid, 2-methyl-	600	mainlib	C11H22O2
25.73	Decanoic acid, methyl ester	709	replib	C11H22O2

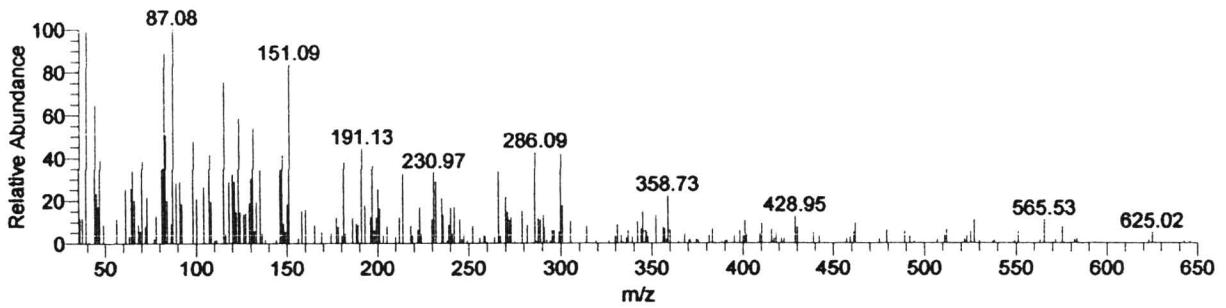


RT	Name	SI	Library	Formula
32.72	O-Acetyldimethylcephalotaxinone	220	mainlib	C19H19NO5
32.72	1,1,1,3,5,7,9,11,11,11-Decamethyl-5-(trimethylsiloxy)hexasiloxane	294	mainlib	C13H42O6Si7
32.72	Phosphonic acid, methyl-, bis(trimethylsilyl) ester	417	replib	C7H21O3PSi2

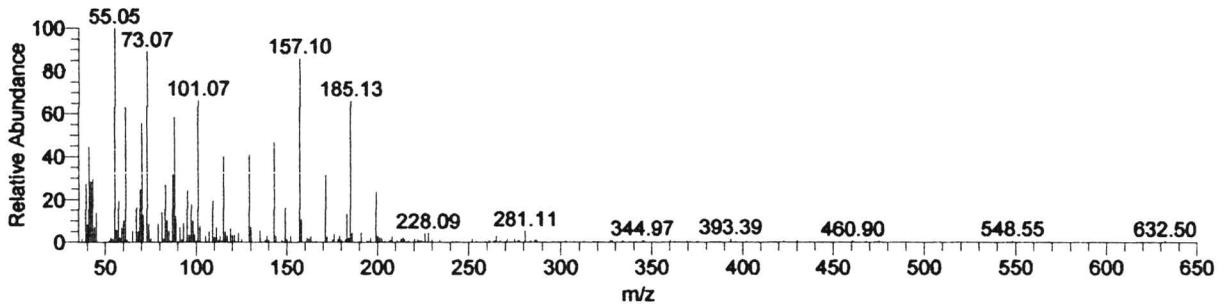


RT	Name	SI	Library	Formula
34.15	Dodecanoic acid, 2-methyl-	665	mainlib	C13H26O2
34.15	Undecanoic acid, methyl ester	689	replib	C12H24O2
34.15	Dodecanoic acid, methyl ester	733	replib	C13H26O2

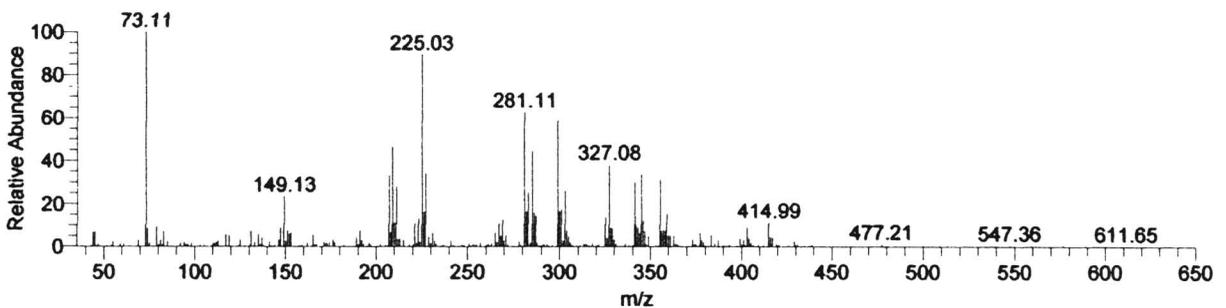
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
 {#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
35.91	1-Phenyl-1-methyl-2,2-dibromo-cyclopropane	131	mainlib	C10H10Br2
35.91	2,2,4-Trimethyl-3-pentanol	280	mainlib	C8H18O
35.91	Benzeneacetic acid, 2-methoxy- <i>n</i> -(trimethylsilyl)oxy]-, methyl ester	310	mainlib	C13H20O4Si



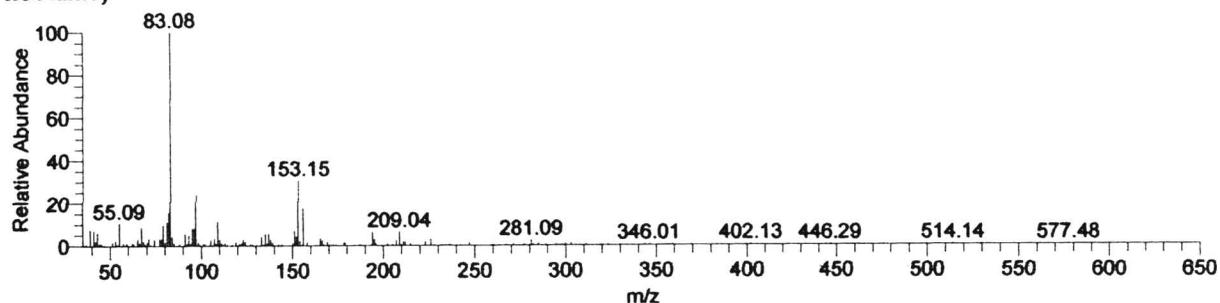
RT	Name	SI	Library	Formula
36.93	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	132	mainlib	C10H14O6
36.93	Mercury, chloro(3,17-dioxoandrosta-1,4,6-trien-2-yl)-	240	mainlib	C19H21ClHgO2
36.93	Pentanedioic acid, 3,3-dimethyl-, dimethyl ester	300	replib	C9H16O4



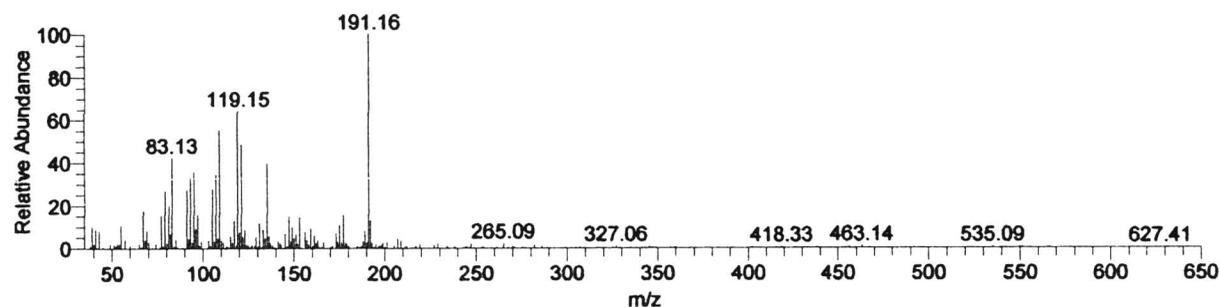
RT	Name	SI	Library	Formula
38.79	Proadifen	148	nist_msms	C23H31NO2
38.79	5'-O-(<i>tert</i> -butyldimethylsilyl)-thymidine	230	mainlib	C16H28N2O5Si
38.79	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	313	mainlib	C15H13N3O4

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

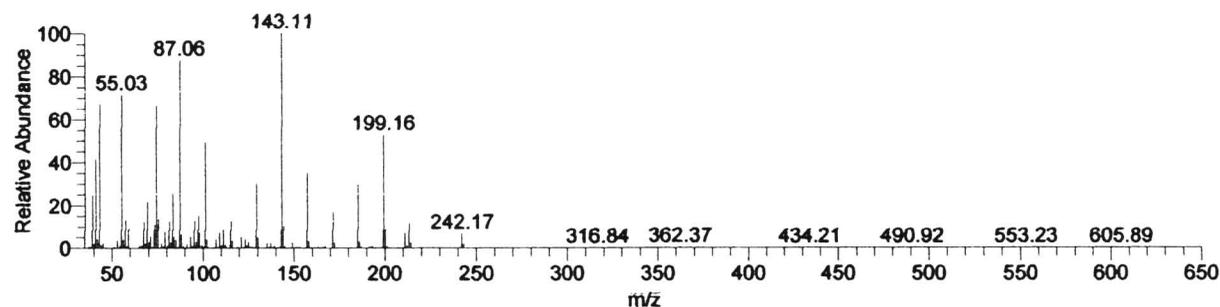
{#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
38.99	16-Azatricyclo[9.2.2.1(4,8)]hexadeca-4,6,8(16),11,13,14-hexaene, 16-oxide	71	mainlib	C15H15NO
38.99	1-Hexyl-1-nitrocyclohexane	155	mainlib	C12H23NO2
38.99	2-Pentene, 5-bromo-2,3-dimethyl-	362	mainlib	C7H13Br

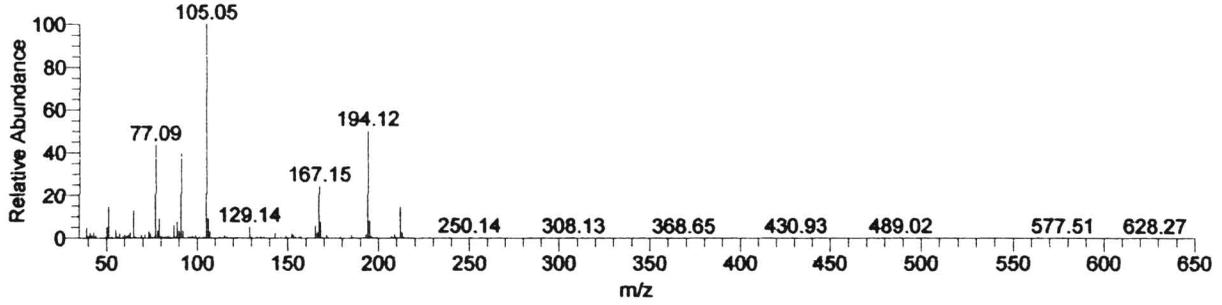


RT	Name	SI	Library	Formula
39.18	2,3,4'-Benzophenonetetracarboxylic acid	231	mainlib	C16H10O7
39.18	2,4,4-Trimethyl-3-hydroxymethyl-5a-(3-methyl-but-2-enyl)-cyclohexene	276	mainlib	C15H26O
39.18	Cyclohexanone, 2,3,3-trimethyl-2-(3-methyl-1,3-butadienyl)-, (Z)-	379	mainlib	C14H22O

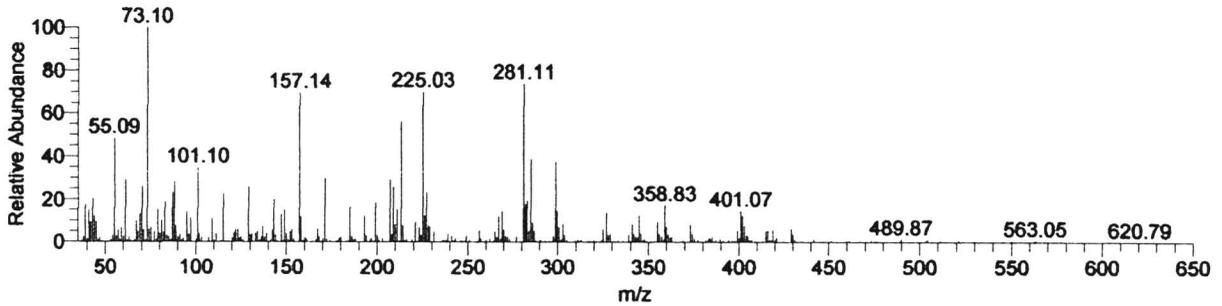


RT	Name	SI	Library	Formula
41.77	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	236	mainlib	C10H14O6
41.77	7-Tridecanol, 7-ethyl-	487	mainlib	C15H32O
41.77	Tetrabutylsilane	526	mainlib	C16H36Si

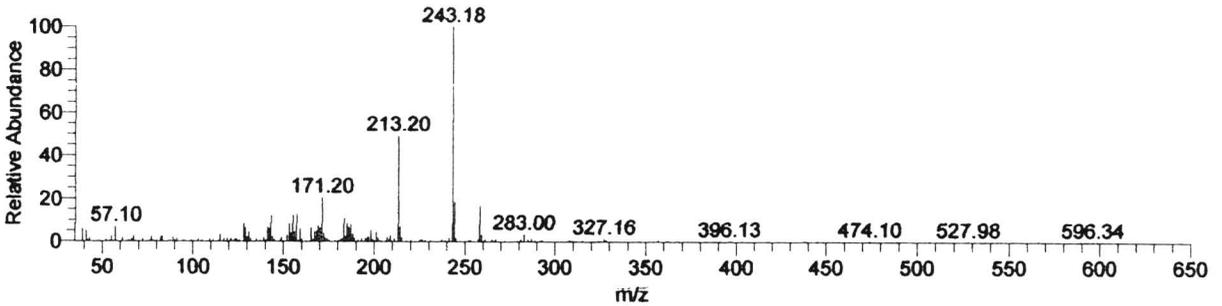
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
 {#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
43.24	Phenacyl thiocyanate	434	mainlib	C9H7NOS
43.24	Benzyl Benzoate	608	NISTDEMO	C14H12O2
43.24	Benzyl Benzoate	608	mainlib	C14H12O2



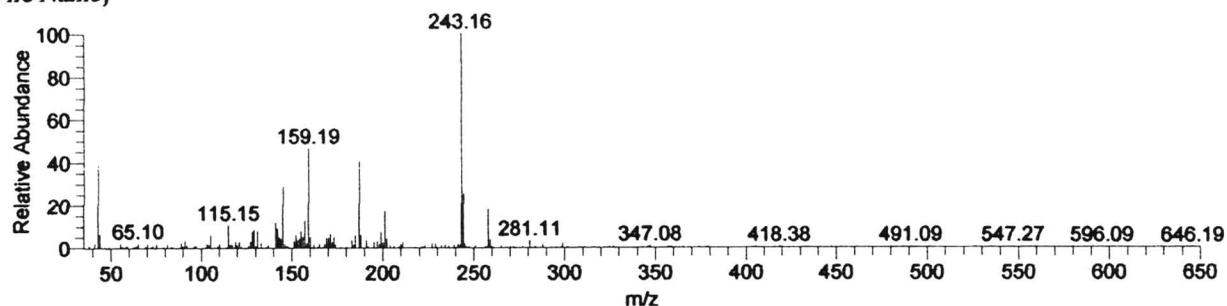
RT	Name	SI	Library	Formula
44.26	(5R,6S)-Thymidine glycol	82	nist_msms	C10H16N2O7
44.26	Proadifen	133	nist_msms	C23H31NO2
44.26	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	334	mainlib	C15H13N3O4



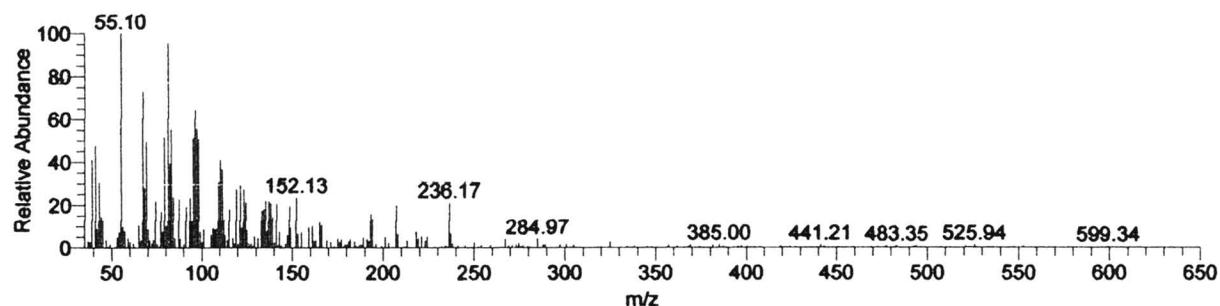
RT	Name	SI	Library	Formula
45.66	(E)-2-Methoxymethoxy-4'-fluoro-stilbene	185	mainlib	C16H15FO2
45.66	3-(2,7-Dimethoxy-1-naphthyl)acrylic acid	243	mainlib	C15H14O4
45.66	2,3,4-Trimethoxydibenzofuran	299	mainlib	C15H14O4

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พันธ์ ศิริสะอาดและคณะ 2552

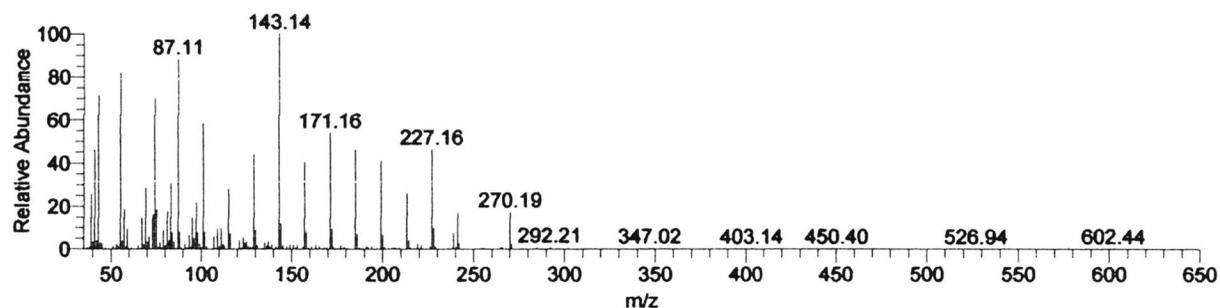
{#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
45.98	7-Methyl-5-phenyl-5H-pyrazolo[3,4-e]-1,2,4-triazine-3-thiol	207	mainlib	C11H9N5S
45.98	5-Isoxazolidinecarboxylic acid, 2-[2,3-O-(1-methylethylidene)-5-O-(triphenylmethyl)- α -D-ribofuranosyl]-, methyl ester, (S)-	211	mainlib	C32H35NO7
45.98	Methyl-2,3-dideoxy-2-C-methyl-6-O-triphenylmethyl- α -D-threo-hexopyranoside-4-ulose	214	mainlib	C27H28O4



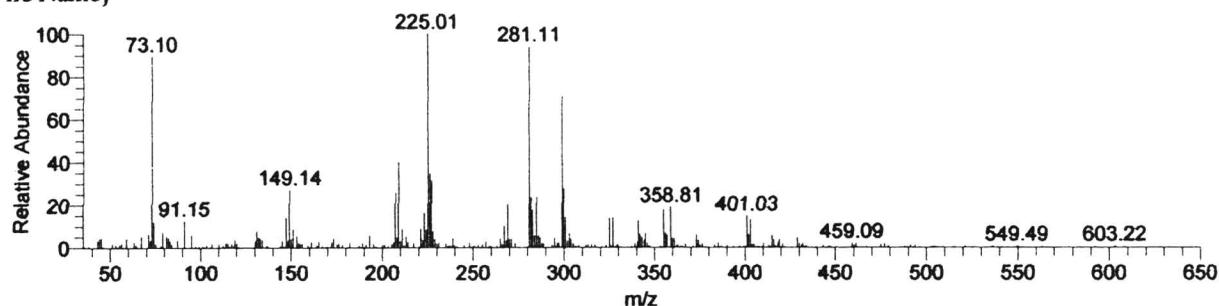
RT	Name	SI	Library	Formula
47.93	1,2-Dioxin-3-acetic acid, 6-(8,10-dodecadienyl)-3,6-dihydro-6-methoxy-, methyl ester, [3 α ,6 α ,6(8E,10E)]-	277	mainlib	C20H32O5
47.93	Cyclohexaneethanol, α -methylene-	331	mainlib	C9H16O
47.93	(2S,4R)-p-Mentha-[1(7),8]-diene 2-hydroperoxide	358	mainlib	C10H16O2



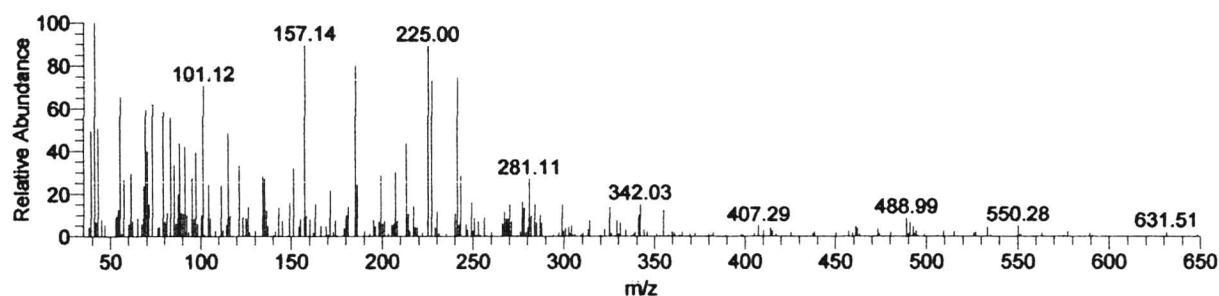
RT	Name	SI	Library	Formula
48.69	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	204	mainlib	C10H14O6
48.69	Hexadecanoic acid, methyl ester	710	replib	C17H34O2
48.69	Hexadecanoic acid, methyl ester	710	mainlib	C17H34O2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

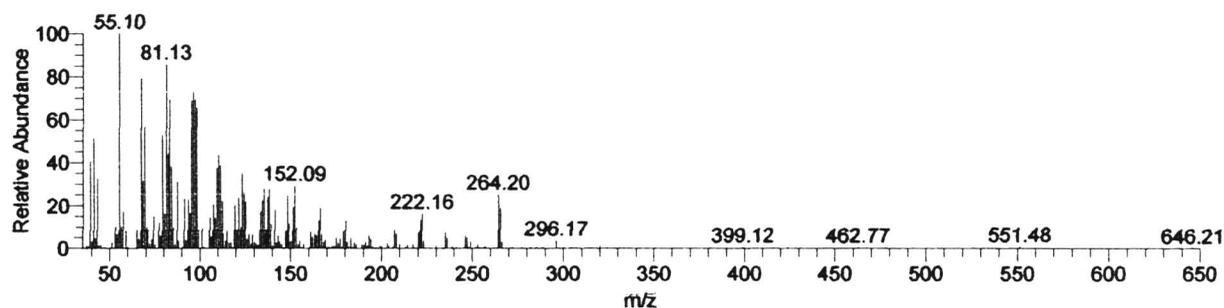
{#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
49.30	N-(2,6-Dichlorophenyl)-N-[(2E)-3-methyl-1,3-thiazolidin-2-ylidene]amine #	119	mainlib	C10H10Cl2N2S
49.30	(5R,6S)-Thymidine glycol	125	nist_msms	C10H16N2O7
49.30	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	337	mainlib	C15H13N3O4

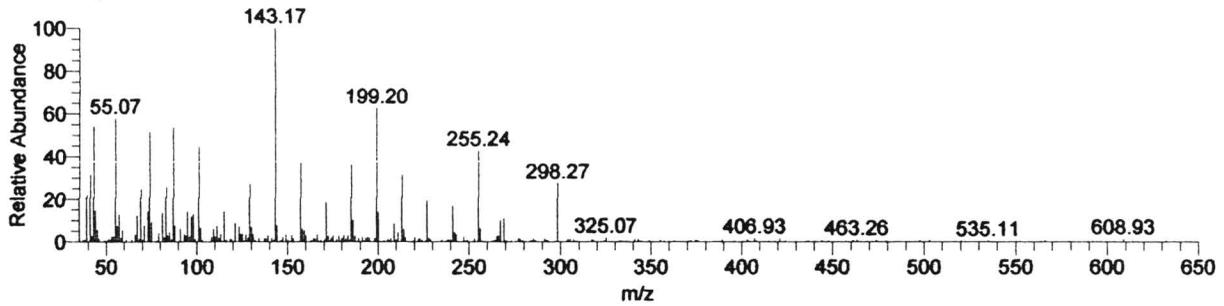


RT	Name	SI	Library	Formula
50.90	Ethyl 2-aza-3-oxatricyclo[3.3.3.0(1,5)]undecane-4-carboxylate	229	mainlib	C12H19NO3
50.90	Tetrazepam	406	nist_msms	C16H17ClN2O
50.90	Bisnorallocholanic acid	421	mainlib	C22H36O2

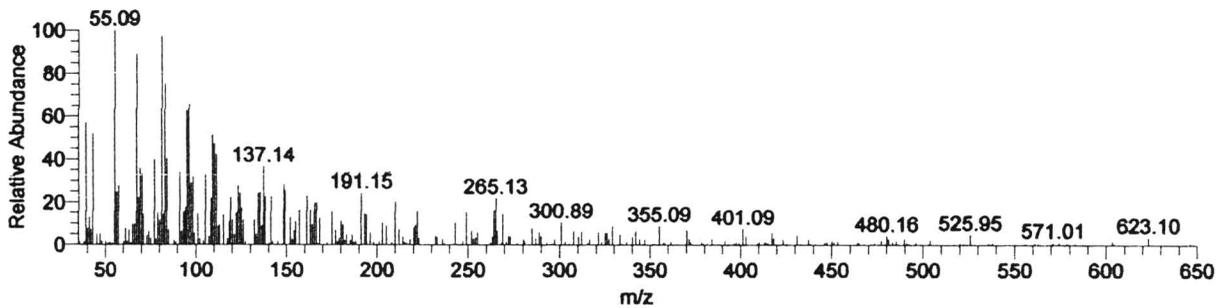


RT	Name	SI	Library	Formula
54.15	cis,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	377	mainlib	C12H22
54.15	trans,trans-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	382	mainlib	C12H22
54.15	cis,cis-1,6-Dimethylspiro[4.5]decane	391	mainlib	C12H22

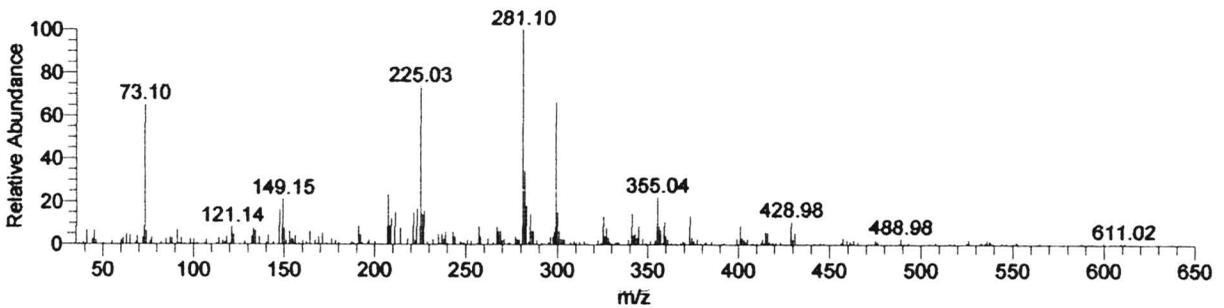
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
 {#Raw File Name}



RT	Name	SI	Library	Formula
55.01	2-(2-Furyl)-2,5-dimethyltetrahydrofuran	193	mainlib	C10H14O2
55.01	7-Tridecanol, 7-ethyl-	231	mainlib	C15H32O
55.01	7-Hydroxy-3-(1,1-dimethylprop-2-enyl)coumarin	268	mainlib	C14H14O3



RT	Name	SI	Library	Formula
56.17	10-Pentadecen-5-yn-1-ol, (E)-	76	mainlib	C15H26O
56.17	5,10-Pentadecadiyn-1-ol	78	mainlib	C15H24O
56.17	Norethindrone	135	nist_msms	C20H26O2



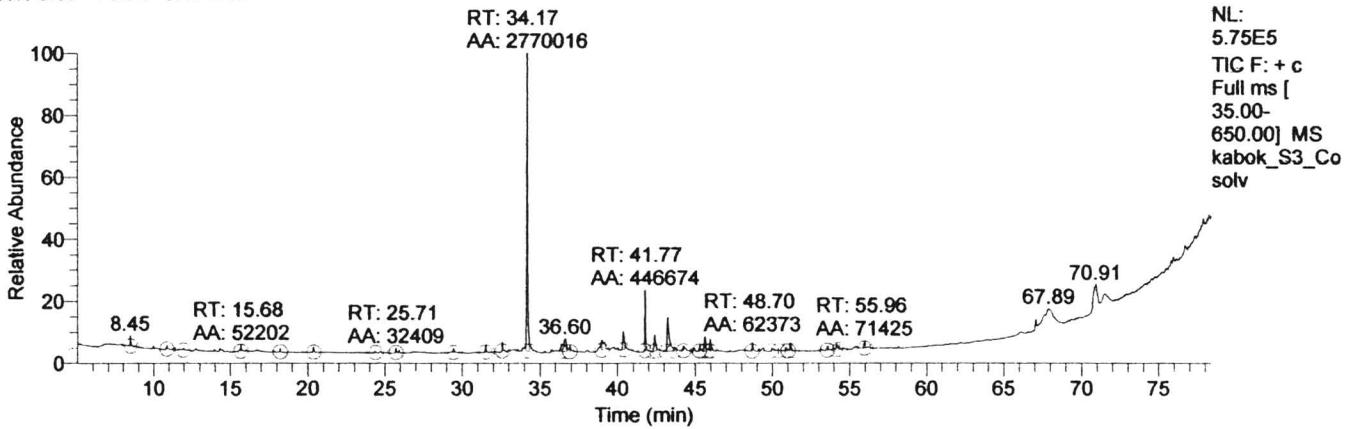
RT	Name	SI	Library	Formula
58.19	Spathulasin diacetate	59	mainlib	C34H52O10
58.19	1,1,1,3,5,5,7,7,7-Nonamethyl-3-(trimethylsiloxy)tetrasiloxane	303	mainlib	C12H36O4Si5
58.19	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	307	mainlib	C15H13N3O4

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
 GC MS Library search S3 cosolvent

Library Search Report # 2

Data File: kabok_S3_Cosolv Orig Data Path: kabok_S3_Cosolv.RAW
 Curr Data Path: C:\Xcalibur\Data\Ake\ Sample Type: Unknown
 Sample ID: 1 Sample Name:
 Operator: PolarisQ Acquisition Date: 02/26/10 16:52:09
 Run Time (min): 73.38 Comments: 3g_2BF_3MeOH
 Vial: 210 Inst Method: C:\Xcalibur\methods\jeab\scf_extract.meth
 Proc Method: C:\Xcalibur\methods\Ake\mint

RT: 5.00 - 78.38 SM: 15G

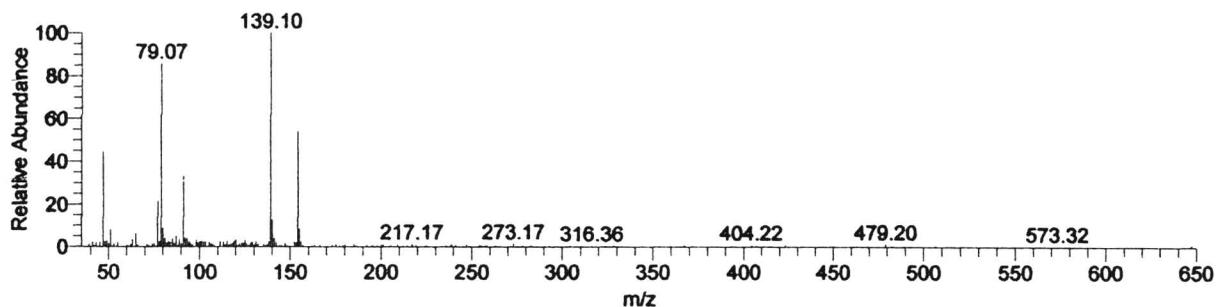


RT	Peak Area	Area %	S/N
8.45	84378	1.36	6.99
10.86	25108	0.41	2.06
11.97	19825	0.32	2.15
15.68	52202	0.84	4.34
18.22	19174	0.31	3.83
20.36	46603	0.75	10.36
24.34	13937	0.23	2.55
25.71	32409	0.52	4.30
29.44	49186	0.79	6.66
31.51	66121	1.07	4.35
32.58	65751	1.06	3.47
34.17	2770016	44.77	79.91
36.60	377037	6.09	4.95
36.92	27318	0.44	2.60
38.98	113699	1.84	2.90
40.36	249060	4.03	3.03
41.77	446674	7.22	11.37
42.40	209183	3.38	4.88
43.22	679553	10.98	14.70
44.24	43722	0.71	2.06
45.30	36578	0.59	2.86
45.63	208870	3.38	8.06

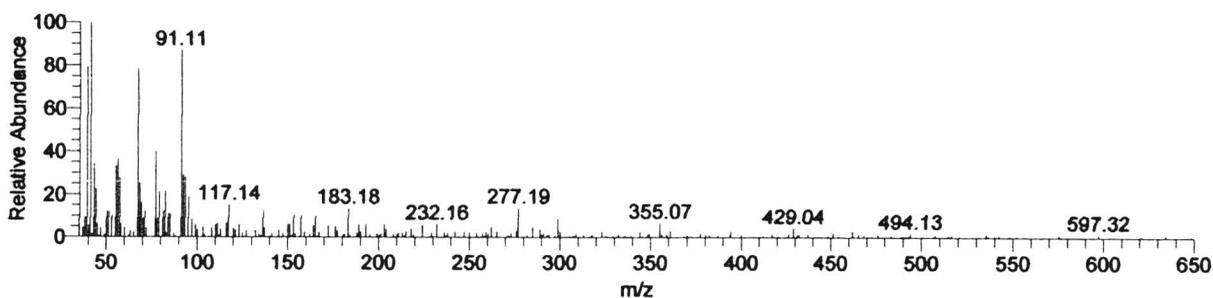
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

GC MS Library search S3 cosolvent

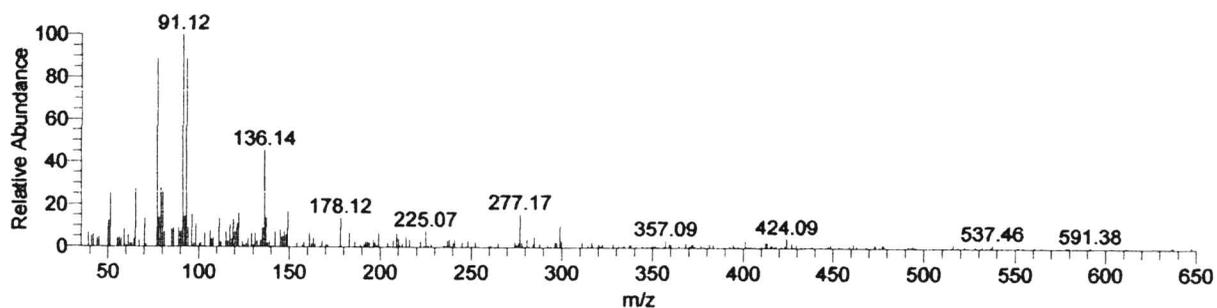
45.96	133882	2.16	5.94
48.70	62373	1.01	4.52
50.01	57244	0.93	2.01
50.92	27425	0.44	4.17
51.16	81932	1.32	13.43
53.56	31684	0.51	3.04
54.16	85044	1.37	4.70
55.96	71425	1.15	2.39



RT	Name	SI	Library	Formula
8.45	Bicyclo[3.1.0]hexane, 6-methylene-	181	replib	C7H10
8.45	Tricyclo[3.2.1.0(2,4)]octan-8-one, 3,3-dimethyl-, (1 α ,2 α ,4 α ,5 α)-	206	mainlib	C10H14O
8.45	2-Propanone, (1-methylethyl)(2-propenyl)hydrazone	362	mainlib	C9H18N2

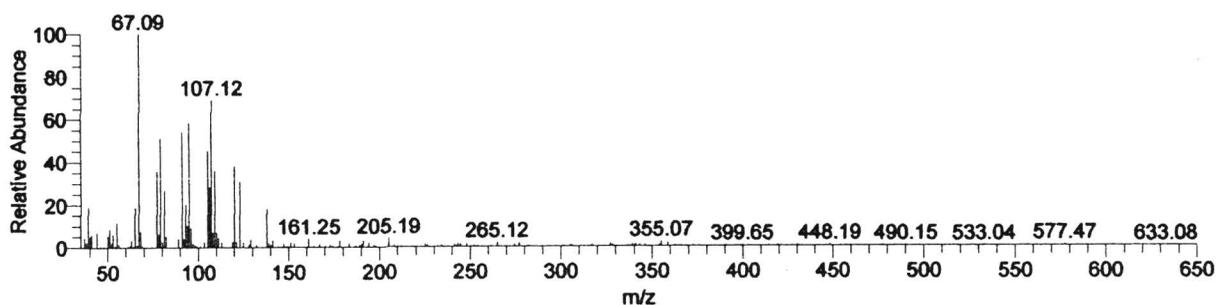


RT	Name	SI	Library	Formula
10.86	5,10-Pentadecadiyn-1-ol	127	mainlib	C15H24O
10.86	5,10-Pentadecadiyne, 1-chloro-	137	mainlib	C15H23Cl
10.86	6,9,12-Octadecatrienoic acid, phenylmethyl ester, (Z,Z,Z)-	532	mainlib	C25H36O2

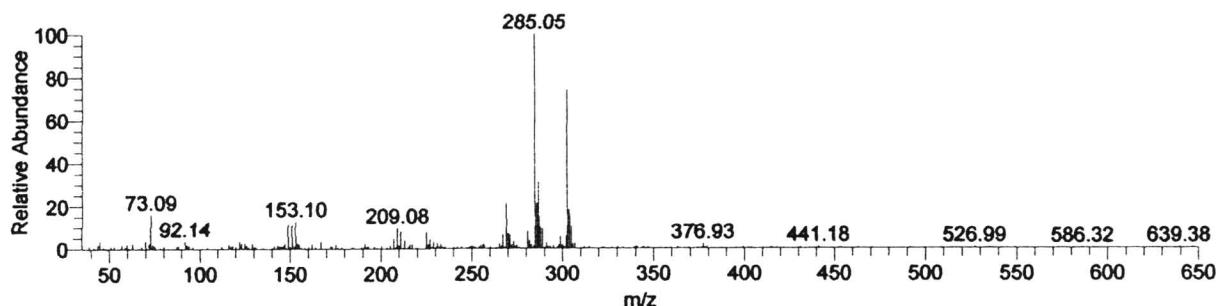


การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
GC MS Library search S3 cosolvent

RT	Name	SI	Library	Formula
11.97	2-Cyclohexene-6-carboxylic acid, 3-methyl-1-(5-oxo-3,4-dihydro-2H-pyrrolyl)-, ethyl ester	164	mainlib	C ₁₄ H ₂₁ NO ₃
11.97	3-Oxazolidinecarboxylic acid, 2-(1,1-dimethylethyl)-4-[4-hydroxyphenylmethyl]-5-oxo-, phenylmethyl ester, (2S,4R,4'S)-	226	mainlib	C ₂₂ H ₂₅ NO ₅
11.97	Tricyclo[4.1.0.0(2,4)]heptane, 5-(phenylthio)-, (1 <i>r</i> ,2 <i>r</i> ,4 <i>r</i> ,5 <i>r</i> ,6 <i>r</i>)-	323	mainlib	C ₁₃ H ₁₄ S



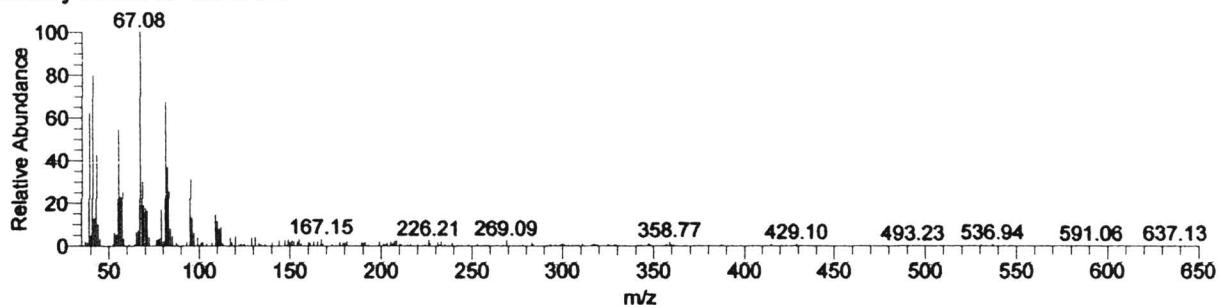
RT	Name	SI	Library	Formula
15.68	5,10-Pentadecadiyne, 1-chloro-	159	mainlib	C ₁₅ H ₂₃ Cl
15.68	10-Pentadecen-5-yn-1-ol, (E)-	159	mainlib	C ₁₅ H ₂₆ O
15.68	5,10-Pentadecadiyn-1-ol	165	mainlib	C ₁₅ H ₂₄ O



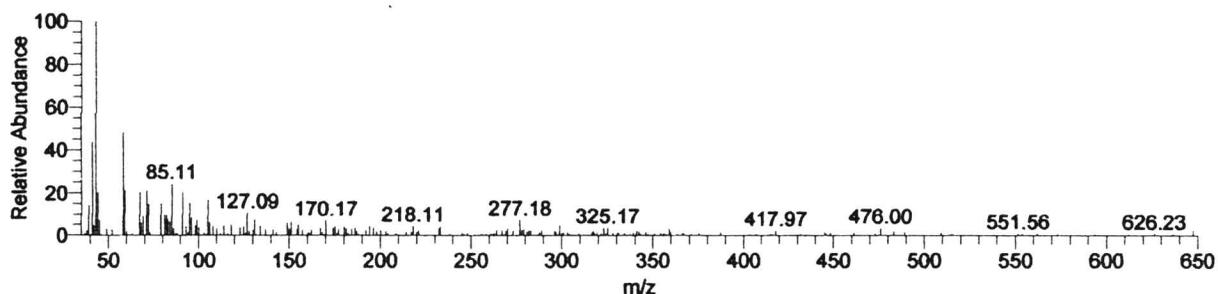
RT	Name	SI	Library	Formula
18.22	2-(4-Nitrophenylthio)-5-methylthio-1,3,4-thiadiazole	365	mainlib	C ₉ H ₇ N ₃ O ₂ S ₃
18.22	Oxazepam	465	nist_msms	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂
18.22	Diazepam	524	nist_msms	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาณิชย์ ศิริระอาดและคณะ 2552

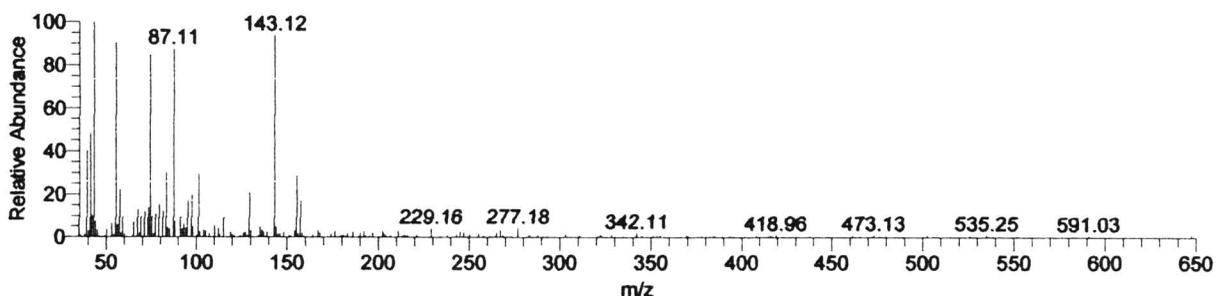
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
20.36	5,10-Pentadecadienoic acid, (Z,Z)-	143	mainlib	C15H26O2
20.36	5,10-Pentadecadien-1-ol, (Z,Z)-	144	mainlib	C15H28O
20.36	5,10-Pentadecadienoic acid, (E,E)-	144	mainlib	C15H26O2



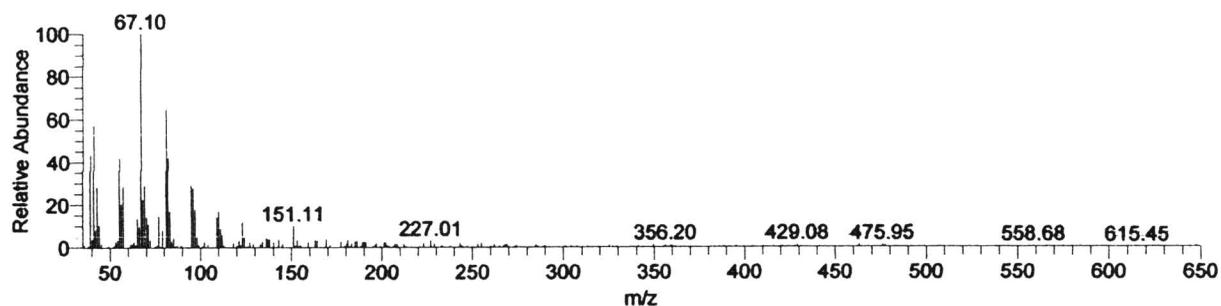
RT	Name	SI	Library	Formula
24.34	Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene-3-methanol, 1-methyl-8-(1-methylethyl)-	243	mainlib	C15H24O
24.34	2-Methyl-2-[(1-E,3Z-E,5E)-4-methyl-6-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexenyl)-1,3,5-hexatrienyl]-1,3-dioxolane	293	mainlib	C20H30O2
24.34	17-Octadecene-9,11-diynoic acid, 8-oxo-, methyl ester	326	mainlib	C19H26O3



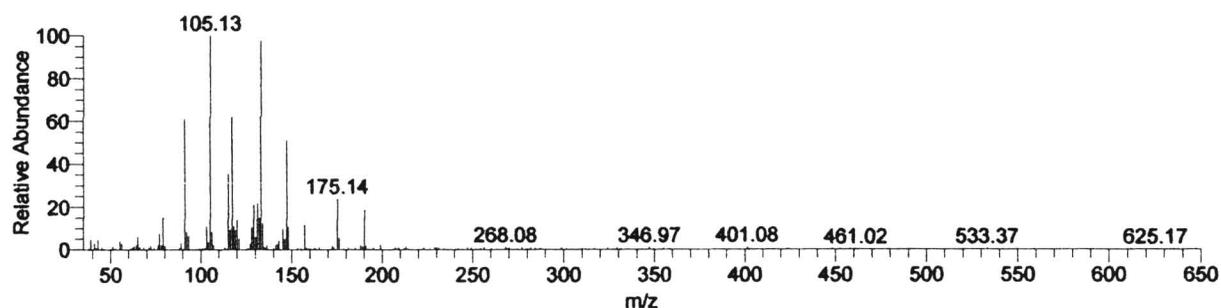
RT	Name	SI	Library	Formula
25.71	1,2,3-Propanetricarboxylic acid, 1-hydroxy-, trimethyl ester, (R*,S*)-(*)	265	mainlib	C9H14O7
25.71	1-Naphthalenemethyl monobromoacetate	279	mainlib	C13H11BrO2
25.71	2,3-Dimethyl-3-decanol	400	mainlib	C12H26O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริระอาดและคณะ 2552

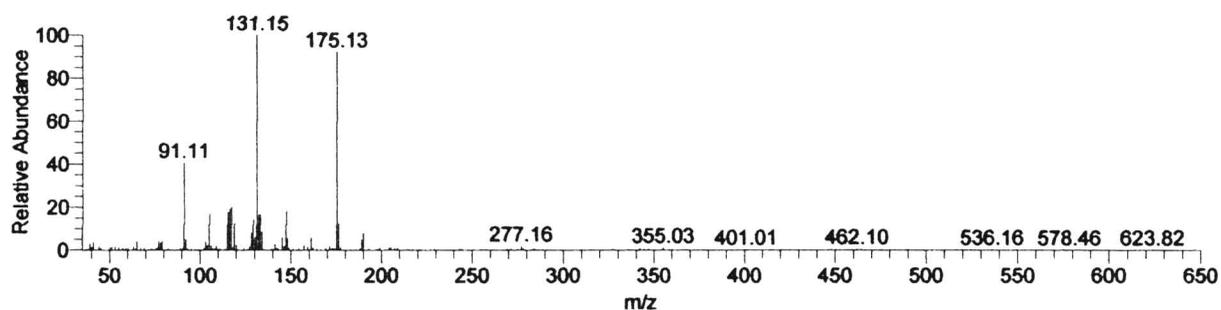
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
29.44	6-syn-(1-Hydroxy-1-methylallyl)-3,3-dimethylbicyclo[2.2.2]octan-2-one	207	mainlib	C14H22O2
29.44	cis-syn-6-tert-Butylperhydroazulen-4(1H)-one	275	mainlib	C14H24O
29.44	1-Oxaspiro[2.5]octane, 2,4,4-trimethyl-8-methylene-	352	replib	C11H18O



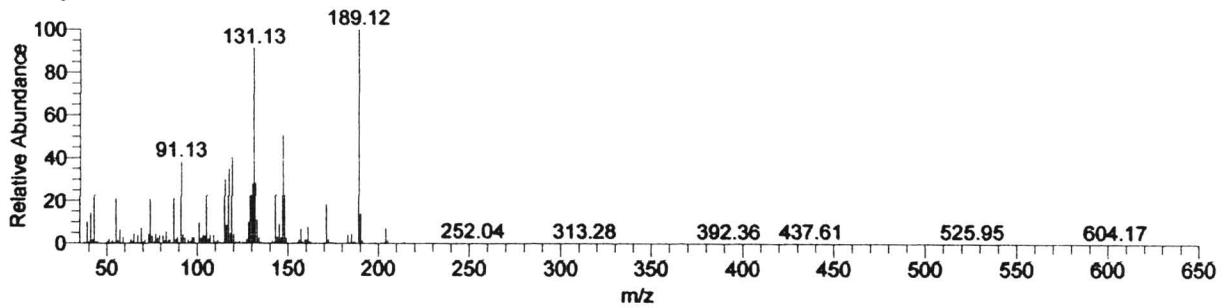
RT	Name	SI	Library	Formula
31.51	2,5-Octadiyne, 4,4-diethyl-	292	mainlib	C12H18
31.51	i-Ethyl-o-methoxy-i-methylbenzyl alcohol	296	mainlib	C11H16O2
31.51	3,4-Nonadien-6-yne, 5-ethyl-3-methyl-	324	mainlib	C12H18



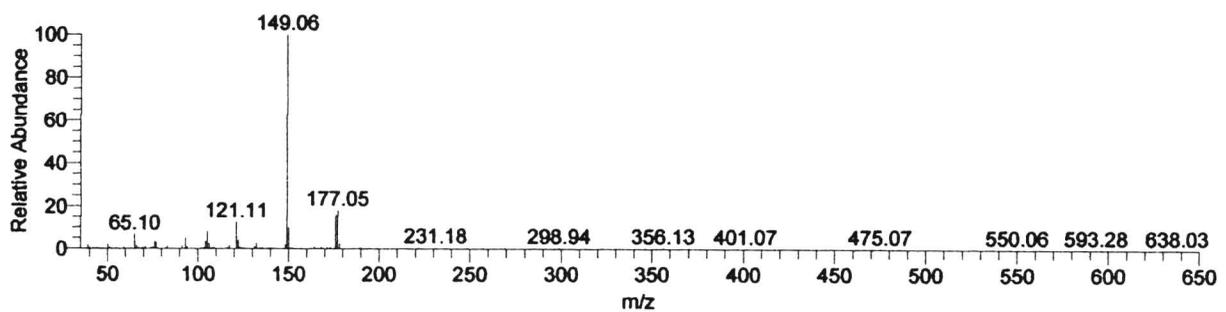
RT	Name	SI	Library	Formula
32.58	1-(p-Toluenesulfonyl)-2-pyrrolidinone	221	mainlib	C11H13NO3S
32.58	trans-2-Ethoxy-ii-methyl-ii-nitrostyrene	368	replib	C11H13NO3
32.58	Benzenepropanal, 4-(1,1-dimethylethyl)-	514	mainlib	C13H18O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

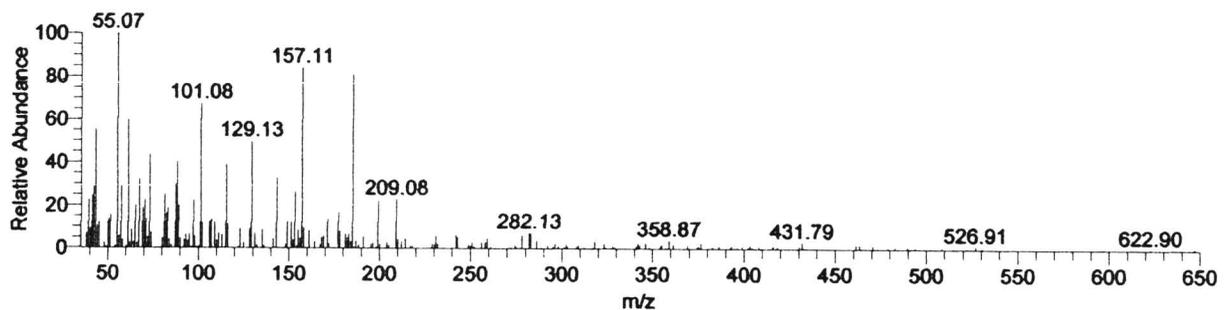
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
34.17	2-Amino-3,8-dimethylimidazo[4,5-f]quinoxaline	162	nist_msms	C11H11N5
34.17	Gly_Leu	221	nist_msms	C8H16N2O3
34.17	Lilial	677	replib	C14H20O



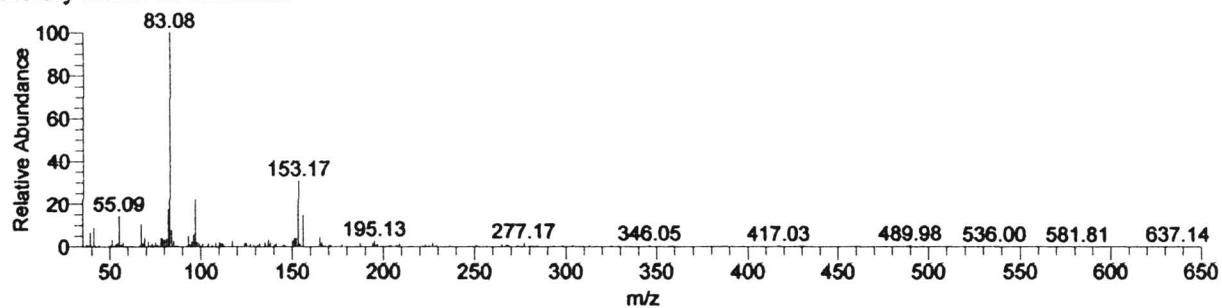
RT	Name	SI	Library	Formula
36.60	1-Methyl-3-ethyladamantane	570	mainlib	C13H22
36.60	1,3-Dioxolane-2-heptanenitrile, 1-methyl-2-oxo-2-phenyl-	590	mainlib	C17H21NO3
36.60	Diethyl Phthalate	653	replib	C12H14O4



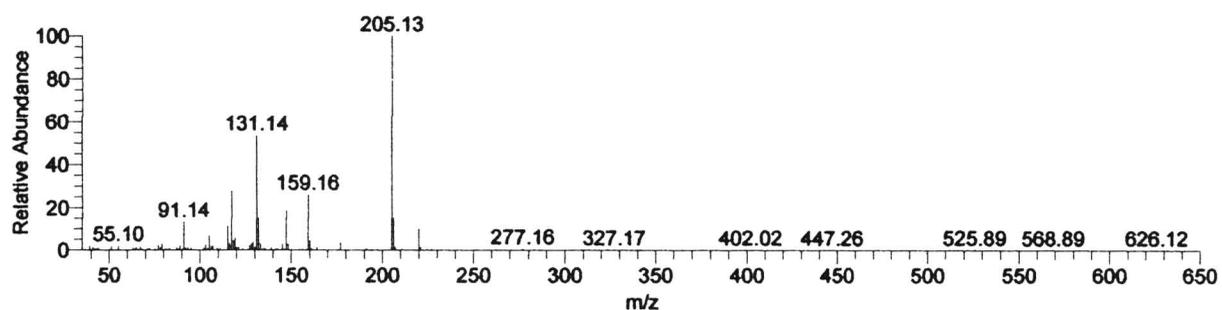
RT	Name	SI	Library	Formula
36.92	5,10-Pentadecadiyne, 1-chloro-	94	mainlib	C15H23Cl
36.92	5,10-Pentadecadiyn-1-ol	112	mainlib	C15H24O
36.92	2,6-Dimethyl-3-thioxo-5-oxo-2,3,4,5-tetrahydro-1,2,4-triazine	291	mainlib	C5H7N3OS

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขมันกบ พาดิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

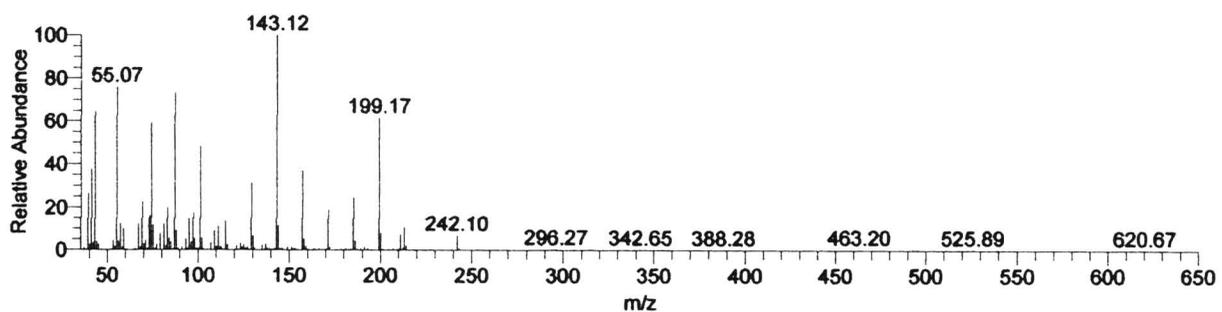
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
38.98	1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	189	mainlib	C12H23NO2
38.98	2-Methyl-3-(3-methyl-but-2-enyl)-2-(4-methyl-pent-3-enyl)-oxetane	190	mainlib	C15H26O
38.98	2,4,4-Trimethyl-3-hydroxymethyl-5a-(3-methyl-but-2-enyl)-cyclohexene	202	mainlib	C15H26O



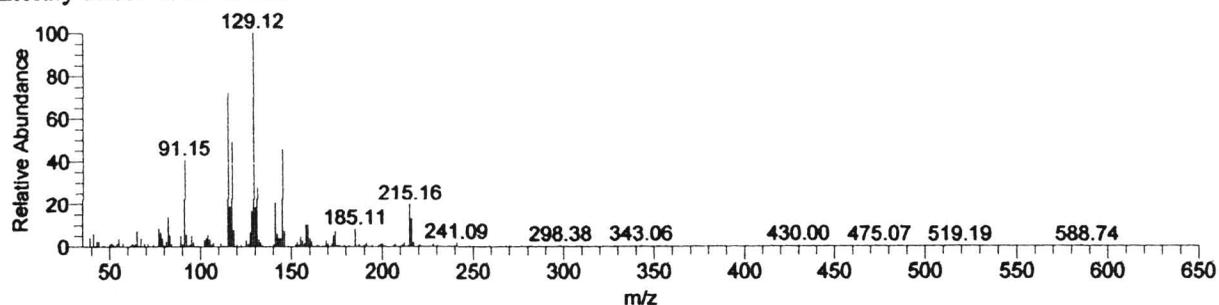
RT	Name	SI	Library	Formula
40.36	trans-2-Ethoxy- <i>o</i> -methyl- <i>o</i> -nitrostyrene	382	replib	C11H13NO3
40.36	trans-2-Ethoxy- <i>o</i> -methyl- <i>o</i> -nitrostyrene	401	mainlib	C11H13NO3
40.36	Propanoic acid, 2-methyl-3-[4- <i>t</i> -butyl]phenyl-	779	mainlib	C14H20O2



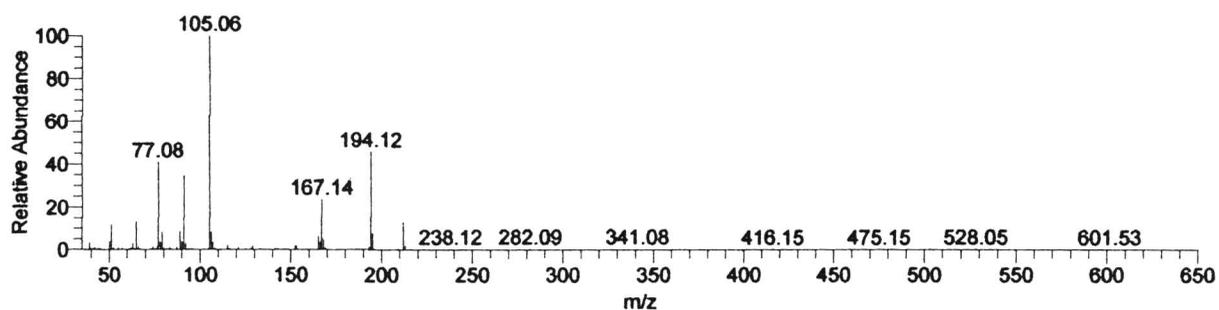
RT	Name	SI	Library	Formula
41.77	Butanamide, N-(1-naphthyl)-	332	mainlib	C14H15NO
41.77	Dimethyl 3,6-epoxytridecanedioate	341	mainlib	C15H26O5
41.77	Tridecanoic acid, 12-methyl-, methyl ester	728	mainlib	C15H30O2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขมันก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

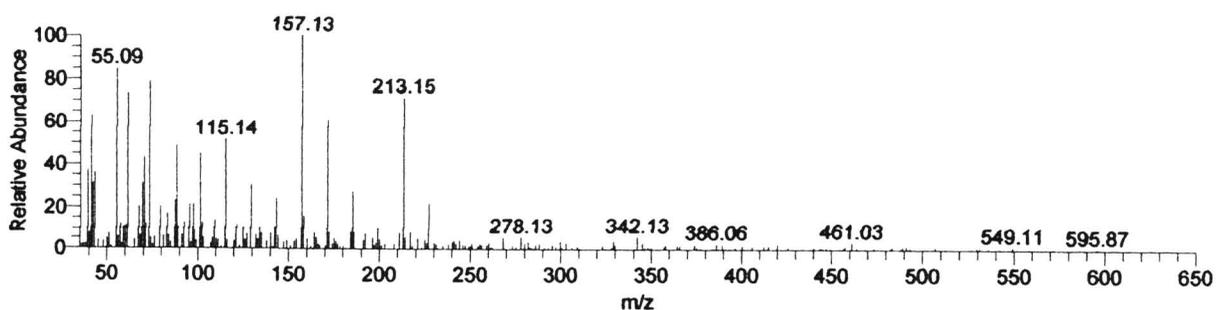
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
42.40	3,5-Methano-2,3,4,5(1H)-tetrahydrobenzo(b)azepine	378	mainlib	C11H13N
42.40	Octanal, 2-(phenylmethylene)-	730	replib	C15H20O
42.40	Octanal, 2-(phenylmethylene)-	733	replib	C15H20O



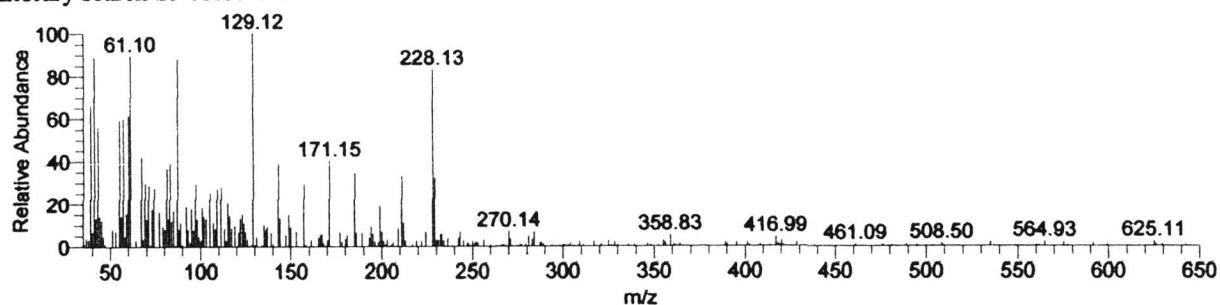
RT	Name	SI	Library	Formula
43.22	2-(Dibenzoylmethyl)-4-p-toluenesulfonylimino-1-naphthalenone	478	mainlib	C32H23NO5S
43.22	Benzyl Benzoate	712	NISTDEMO	C14H12O2
43.22	Benzyl Benzoate	712	mainlib	C14H12O2



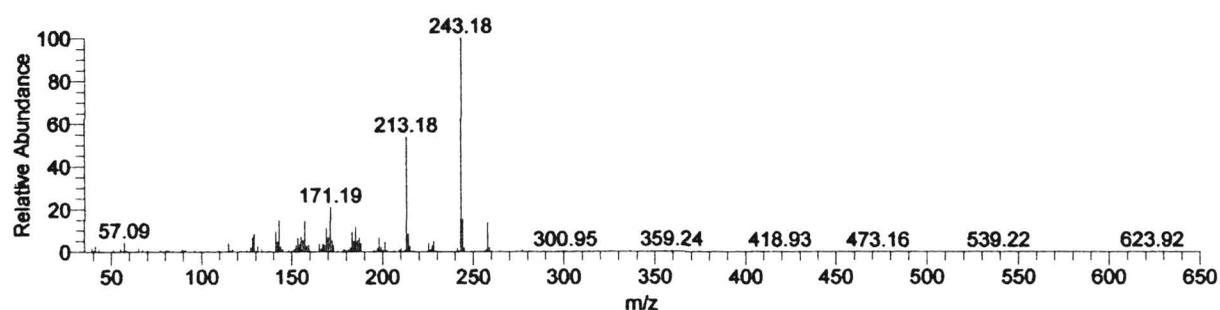
RT	Name	SI	Library	Formula
44.24	5,10-Pentadecadiyn-1-ol	90	mainlib	C15H24O
44.24	5,10-Pentadecadiyne, 1-chloro-	93	mainlib	C15H23Cl
44.24	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	102	mainlib	C10H14O6

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาณิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

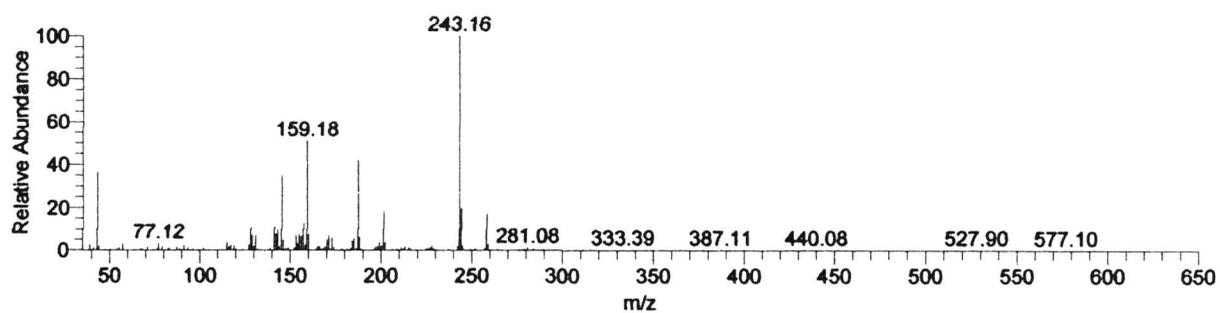
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
45.30	Heptanedioic acid, 3-methyl-, dimethyl ester	221	replib	C10H18O4
45.30	2-Butenoic acid, 2-methoxy-3-methyl-, methyl ester	283	mainlib	C7H12O3
45.30	6-Dodecanone, 5,8-diethyl-7-hydroxy-	335	mainlib	C16H32O2



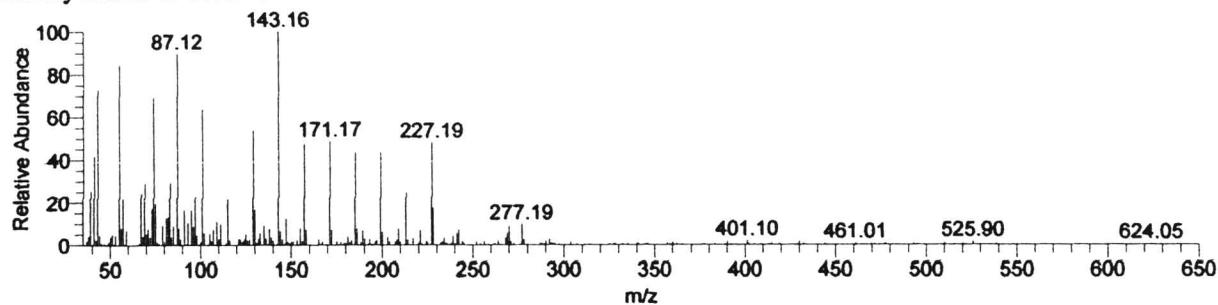
RT	Name	SI	Library	Formula
45.63	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	82	mainlib	C10H14O6
45.63	3-Phenyl-5-fluoro-2,1-benzisoxazole	256	mainlib	C13H8FNO
45.63	5(6H)-Benzocyclooctenone, 7,8-dihydro-8,8-dimethyl-	293	mainlib	C14H16O



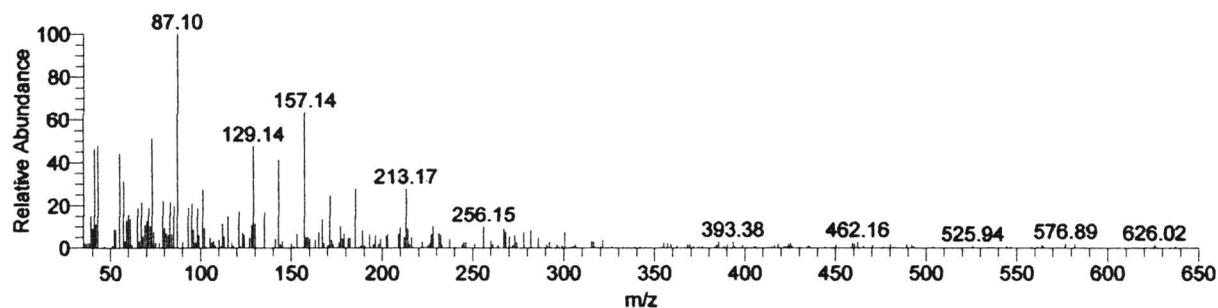
RT	Name	SI	Library	Formula
45.96	5-Isoxazolidinecarboxylic acid, 2-[2,3-O-(1-methylethylidene)-5-O-(triphenylmethyl)- α -D-ribofuranosyl]-, methyl ester, (S)-	267	mainlib	C32H35NO7
45.96	α -Alanine, N-hydroxy-N-[2,3-O-(1-methylethylidene)-5-O-(triphenylmethyl)- α -D-ribofuranosyl]-, methyl ester	285	replib	C31H35NO7
45.96	Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-3,5,5,6,8,8-hexamethyl-2-naphthalenyl)-	661	mainlib	C18H26O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขมันก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

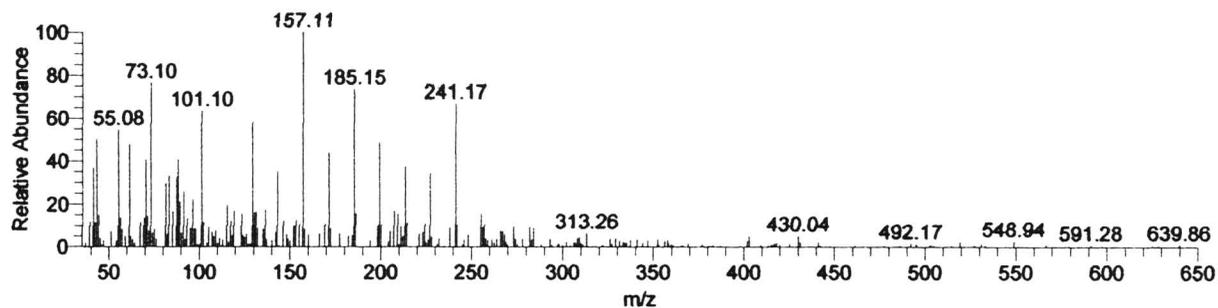
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
48.70	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	125	mainlib	C10H14O6
48.70	Octadecanoic acid, 11-methyl-, methyl ester	211	mainlib	C20H40O2
48.70	2(1H)-Phenanthrenone, 3,4,4a,9,10,10a-hexahydro-1,1,4a-trimethyl-	434	mainlib	C17H22O



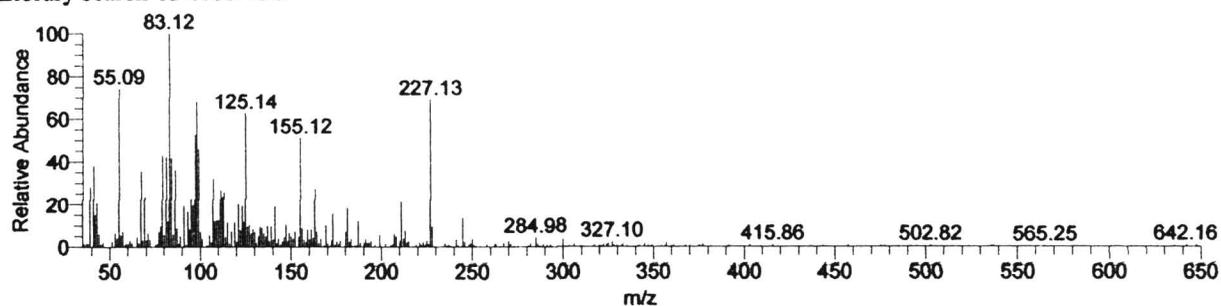
RT	Name	SI	Library	Formula
50.01	5(6H)-Benzocyclooctenone, 7,8-dihydro-8,8-dimethyl-	263	mainlib	C14H16O
50.01	17-Octadecene-9,11-diyonic acid, 8-hydroxy-, methyl ester	350	mainlib	C19H28O3
50.01	2H-Benz[e]inden-3-ol, 3,3a,4,5-tetrahydro-3a-methyl-, (3S-cis)-	356	mainlib	C14H16O



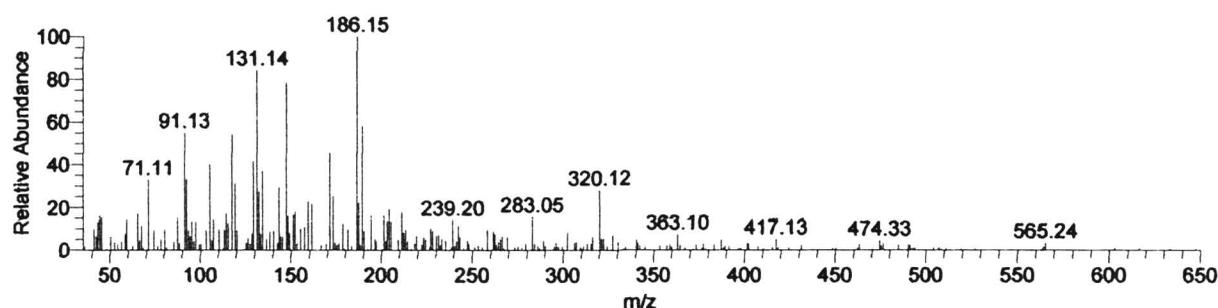
RT	Name	SI	Library	Formula
50.92	3,4-Nonadien-6-yne, 5-ethyl-3-methyl-	141	mainlib	C12H18
50.92	2,3-Dimethylamphetamine	267	mainlib	C11H17N
50.92	Verrucarol	539	mainlib	C15H22O4

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

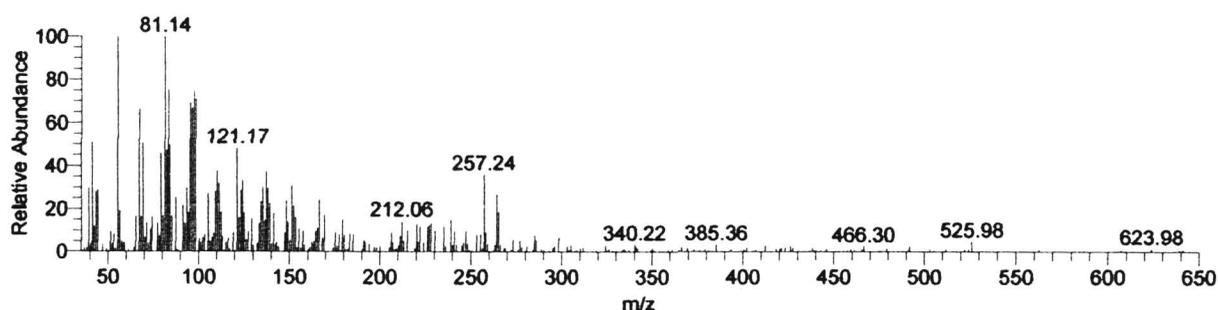
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
51.16	3-Methyl-4-(methoxycarbonyl)hexa-2,4-dienoic acid	195	mainlib	C9H12O4
51.16	1,2-Dioxin-3-acetic acid, 6-(8,10-dodecadienyl)-3,6-dihydro-6-methoxy-, methyl ester, [3,6,6(8E,10E)]-	293	mainlib	C20H32O5
51.16	1-Phenyl-3-[bis(methoxycarbonyl)methyl]hex-1-en-4-yne	320	mainlib	C17H18O4



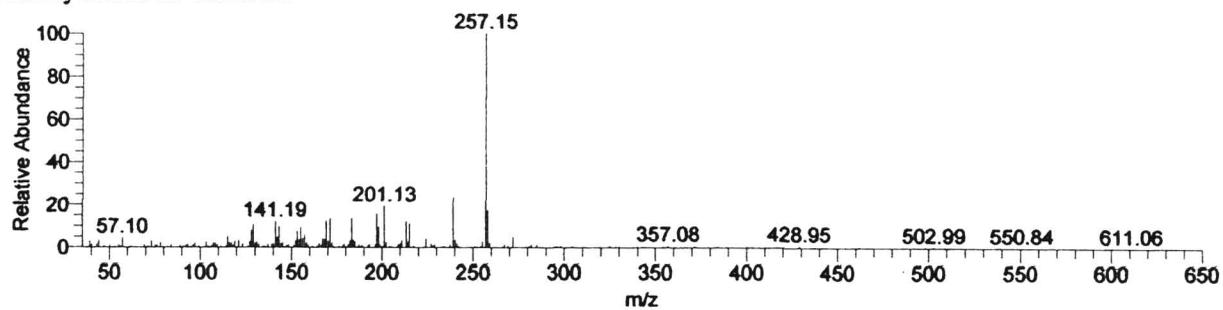
RT	Name	SI	Library	Formula
53.56	2-Amino-3-(methyl-d3)-8-methylimidazo[4,5-f]quinoxaline	61	nist_msms	C11H8D3N5
53.56	Gly_Leu	66	nist_msms	C8H16N2O3
53.56	2-Amino-3,8-dimethylimidazo[4,5-f]quinoxaline	75	nist_msms	C11H11N5



RT	Name	SI	Library	Formula
54.16	1-Methylene-2b-hydroxymethyl-3,3-dimethyl-4b-(3-methylbut-2-enyl)-cyclohexane	166	mainlib	C15H26O
54.16	Tricyclo[4.4.0.0(2,5)]dec-8-ene, 1,2,3,3,4,4,5,6-octafluoro-	176	mainlib	C10H6F8
54.16	2-Butenoic acid, 3-methyl-4-[tetrahydro-3,4-dihydroxy-5-[[3-(2-hydroxy-1-methylpropyl)oxiranyl]methyl]-2H-pyran-2-yl]-, ethyl ester, [2S-[2(E),3u,4u,5u(2R*,3R*(1R*,2R*))]]]-	185	mainlib	C19H32O7

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

GC MS Library search S3 cosolvent



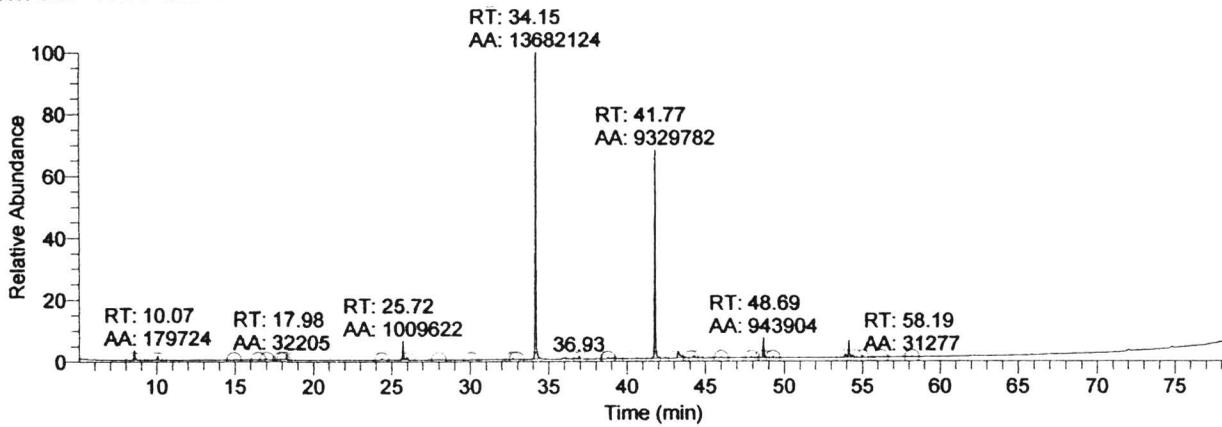
RT	Name	SI	Library	Formula
55.96	N-(3-Carboxyphenyl)anthranilic acid	340	mainlib	C ₁₄ H ₁₁ NO ₄
55.96	3-Methyl-1-phenyl-2-azafluorene	424	mainlib	C ₁₉ H ₁₅ N
55.96	1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-, methyl ester, [1S-(1,4a,10a)-]	524	mainlib	C ₁₈ H ₂₄ O ₂

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี้ ศิริสะอาดและคณะ 2552
 GC MS Library search S3 cosolvent

Library Search Report # 2

Data File: kabok_S3 Orig Data Path: kabok_S3.RAW
 Curr Data Path: C:\Xcalibur\Data\Ake\ Sample Type: Unknown
 Sample ID: 1 Sample Name:
 Operator: PolarisQ Acquisition Date: 02/26/10 21:05:20
 Run Time (min): 73.35 Comments: 3g_2BF_3MeOH
 Vial: 209 Inst Method: C:\Xcalibur\methods\jeab\scf_extract.meth
 Proc Method: C:\Xcalibur\methods\Ake\mint

RT: 5.00 - 78.35 SM: 15G



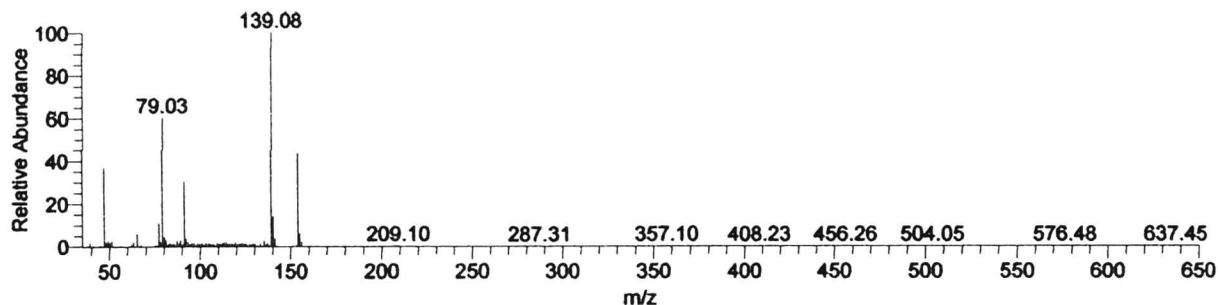
NL:
 3.36E6
 TIC F: + c
 Full ms [
 35.00-
 650.00]
 MS
 kabok_S3

RT	Peak Area	Area %	S/N
8.56	534201	1.80	79.68
10.07	179724	0.61	32.16
14.95	9443	0.03	3.31
16.49	9821	0.03	2.74
17.04	20756	0.07	3.47
17.98	32205	0.11	2.89
18.29	230662	0.78	35.46
24.36	64102	0.22	7.41
25.72	1009622	3.40	90.41
28.02	8386	0.03	2.07
30.06	20515	0.07	2.74
32.72	73831	0.25	19.19
32.94	7289	0.02	2.03
34.15	13682124	46.06	1960.04
36.93	282353	0.95	6.23
38.79	59279	0.20	4.48
39.17	395598	1.33	9.94
41.77	9329782	31.41	426.79
43.24	1129113	3.80	30.09
44.26	222916	0.75	10.14
45.99	61974	0.21	3.52
47.93	74519	0.25	5.32

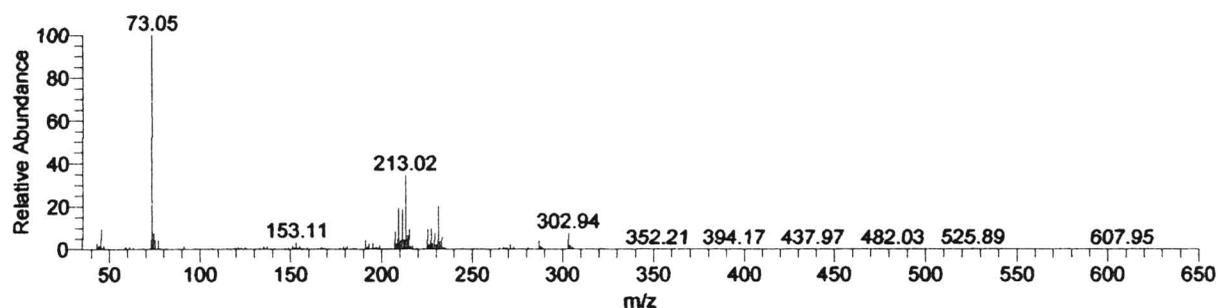
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาดิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

GC MS Library search S3 cosolvent

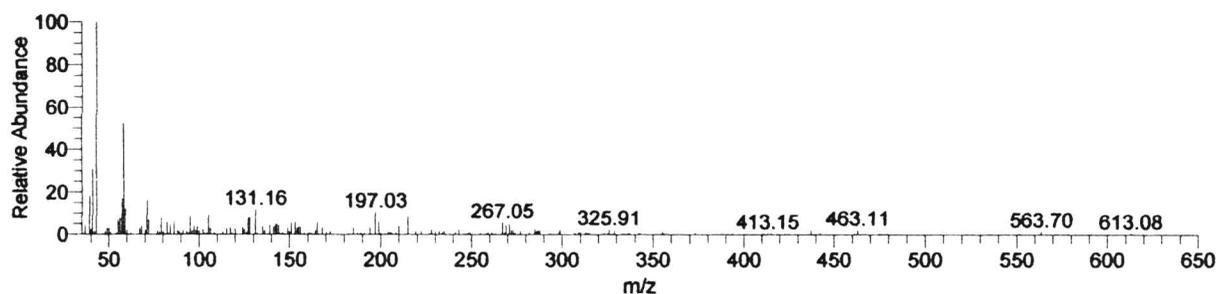
48.69	943904	3.18	75.61
49.30	50102	0.17	4.71
54.15	1134360	3.82	110.83
55.01	81558	0.27	8.88
56.17	24800	0.08	2.07
58.19	31277	0.11	5.46



RT	Name	SI	Library	Formula
8.56	2-Propanone, (1-methylethyl)(2-propenyl)hydrazone	474	mainlib	C9H18N2
8.56	3-Acetyl-2,5-dimethylthiophene	520	replib	C8H10OS
8.56	p-Toluenesulfinylamide	535	mainlib	C7H9NOS



RT	Name	SI	Library	Formula
10.07	Benzeneacetic acid, 2-methoxy-((trimethylsilyl)oxy)-, methyl ester	364	mainlib	C13H20O4Si
10.07	Phosphinic acid, (2-methylphenyl)phenyl-	367	mainlib	C13H13O2P
10.07	1-Butyl-3-methylimidazolium	441	nist_msms	C8H15N2

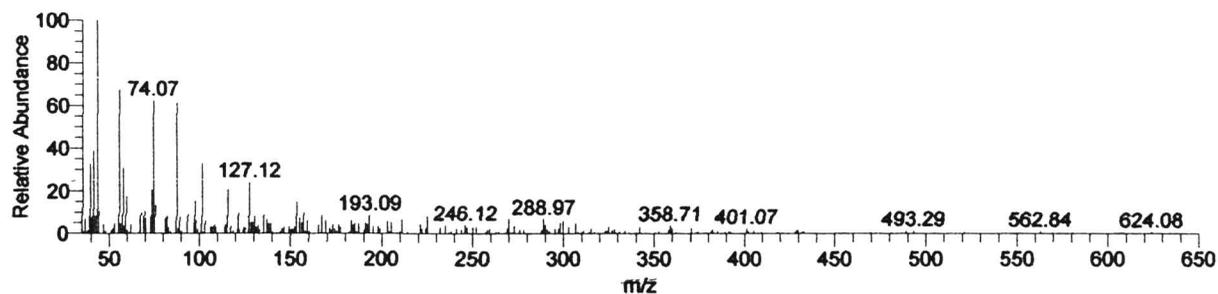


RT	Name	SI	Library	Formula
----	------	----	---------	---------

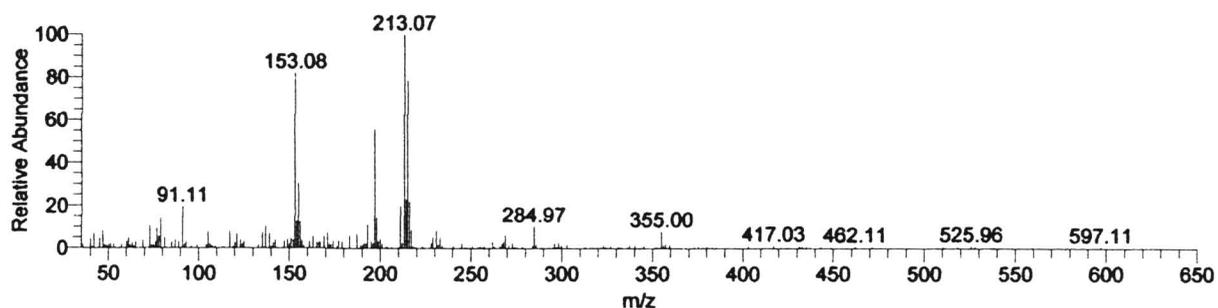
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

GC MS Library search S3 cosolvent

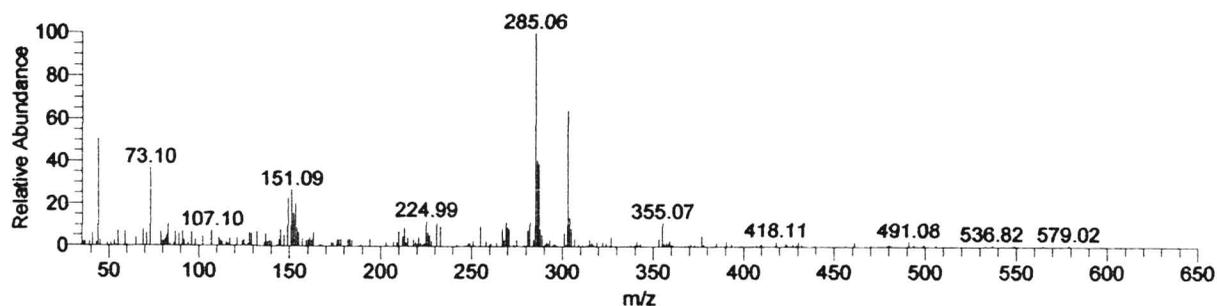
14.95	2-Methyl-2-[(1-E,3Z-E,5E)-4-methyl-6-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexenyl)-1,3,5-hexatrienyl]-1,3-dioxolane	229	mainlib	C20H30O2
14.95	Santolina alcohol	386	mainlib	C10H18O
14.95	Verrucarol	492	mainlib	C15H22O4



RT	Name	SI	Library	Formula
16.49	2,6-Dimethyl-3,5,7-octatriene-2-ol, Z,Z-	337	mainlib	C10H16O
16.49	Diazoprogesterone	347	mainlib	C21H30N4
16.49	8a(2H)-Phenanthrenol, 7-ethenyldodecahydro-1,1,4a,7-tetramethyl-, acetate, [4as-(4a,4bu,7u,8a,10au)]-	355	mainlib	C22H36O2



RT	Name	SI	Library	Formula
17.04	Dimethyl 3-hydroxy-6-oxo-2,4,5-trimethyltetrahydropyran-2,3-dicarboxylate	186	mainlib	C12H18O7
17.04	Cyclopropane, 1,1-dibromo-2-chloro-	283	mainlib	C3H3Br2Cl
17.04	Stannane, chlorotriethyl-	490	mainlib	C6H15ClSn

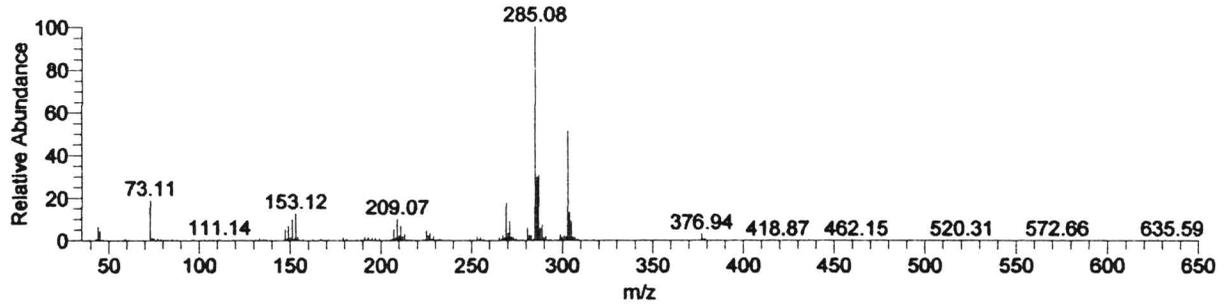


RT	Name	SI	Library	Formula
17.98	(5S,6R)-Thymidine glycol	67	nist_msms	C10H16N2O7

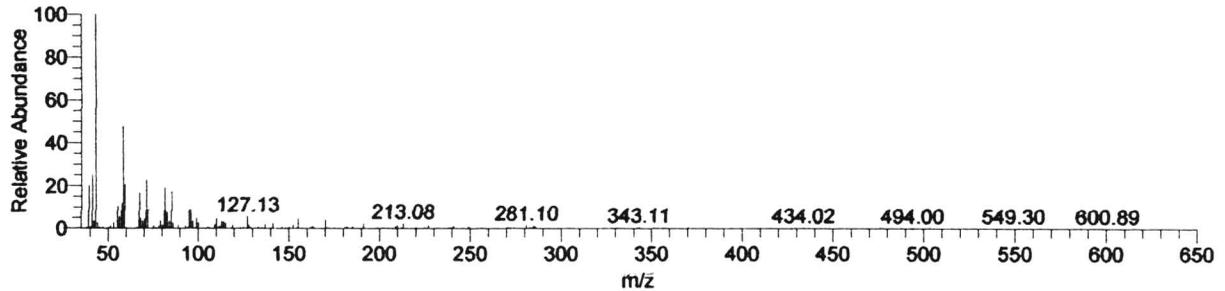
การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

GC MS Library search S3 cosolvent

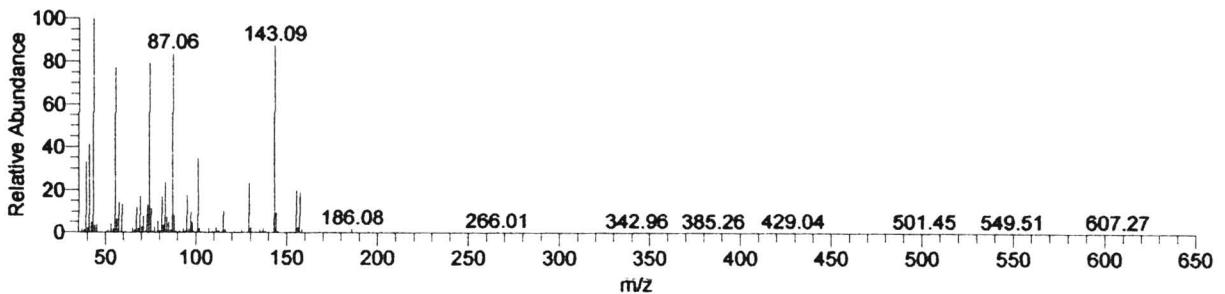
17.98	2-Amino-1-(o-hydroxyphenyl)propane	197	mainlib	C9H13NO
17.98	Benzyl alcohol, α -(1-aminoethyl)-m-hydroxy-, (-)-	266	replib	C9H13NO2



RT	Name	SI	Library	Formula
18.29	Diazepam	463	nist_msms	C16H13ClN2O
18.29	Diazepam	629	nist_msms	C16H13ClN2O
18.29	Oxazepam	647	nist_msms	C15H11ClN2O2



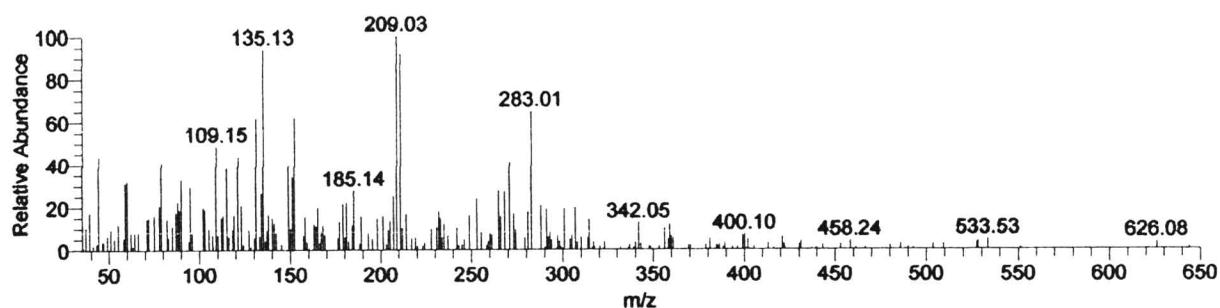
RT	Name	SI	Library	Formula
24.36	2-Amino-octadec-7-ene-1,3-diol butaneboronate	269	mainlib	C22H44BNO2
24.36	3-Methyl-3-hexen-2-ol	385	mainlib	C7H14O
24.36	1-Methylcyclooctanol	405	mainlib	C9H18O



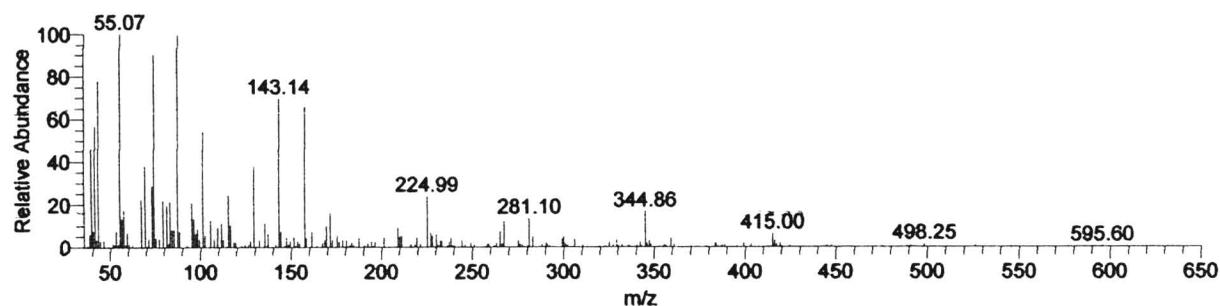
RT	Name	SI	Library	Formula
25.72	Decanoic acid, 2-methyl-	592	mainlib	C11H22O2
25.72	Undecanoic acid, 2-methyl-	674	mainlib	C12H24O2
25.72	Decanoic acid, methyl ester	698	replib	C11H22O2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาดิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

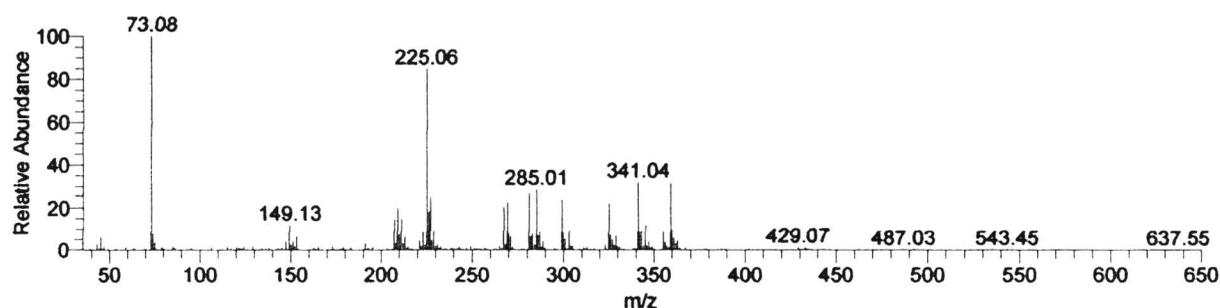
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
28.02	Phosphine, [[bis(pentafluorophenyl)phosphino]ethynyl]diphenyl-	160	mainlib	C ₂₆ H ₁₀ F ₁₀ P ₂
28.02	5'-O-(tert-butyldimethylsilyl)-thymidine	262	mainlib	C ₁₆ H ₂₈ N ₂ O ₅ Si
28.02	Ethyl phosphoric acid, di-TMS derivative	342	mainlib	C ₈ H ₂₃ O ₄ PSi ₂



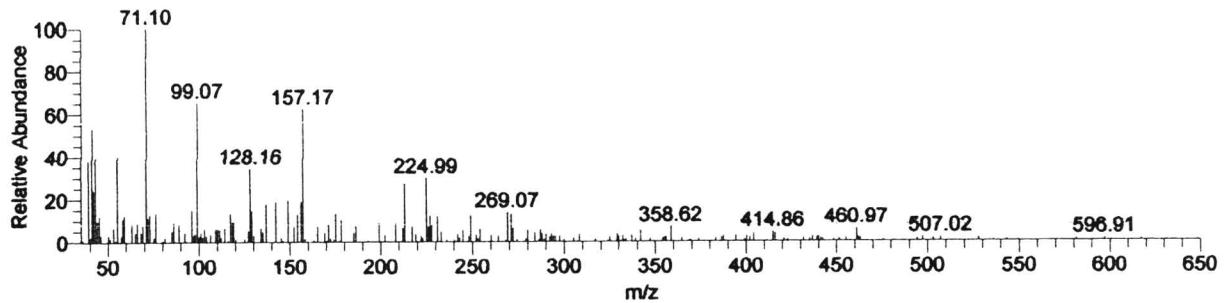
RT	Name	SI	Library	Formula
30.06	1-Naphthalenepropanol, 1-ethenyldecahydro-2,4-dihydroxy-, 4,5,8a-pentamethyl-, [1R-(1R*,2i,4i,4ai,8ai)]-	93	mainlib	C ₂₀ H ₃₆ O ₃
30.06	Oxireno[4,5]cyclopenta[1,2-c]pyran-2(1bH)-one, 1a,4,5,5a,6,6a-hexahydro-5a,6-dihydroxy-1a-methyl-, (1a,1b,5a,6i,6ai)-	118	mainlib	C ₉ H ₁₂ O ₅
30.06	Oxireno[4,5]cyclopenta[1,2-c]pyran-2(1aH)-one, hexahydro-5a,6-dihydroxy-1a-methyl-, (1a,1bu,5ai,6i,6ai)-	122	mainlib	C ₉ H ₁₂ O ₅



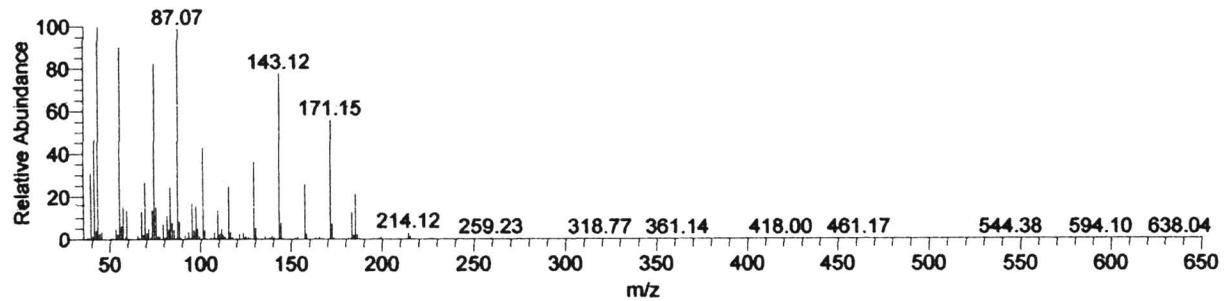
RT	Name	SI	Library	Formula
32.72	Cortisone	102	nist_msms	C ₂₁ H ₂₈ O ₅
32.72	1,1,1,5,7,7,7-Heptamethyl-3,3-bis(trimethylsiloxy)tetrasiloxane	275	mainlib	C ₁₃ H ₄₀ O ₅ Si ₆
32.72	1,1,1,3,5,7,9,11,11,11-Decamethyl-5-(trimethylsiloxy)hexasiloxane	306	mainlib	C ₁₃ H ₄₂ O ₆ Si ₇

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาดิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

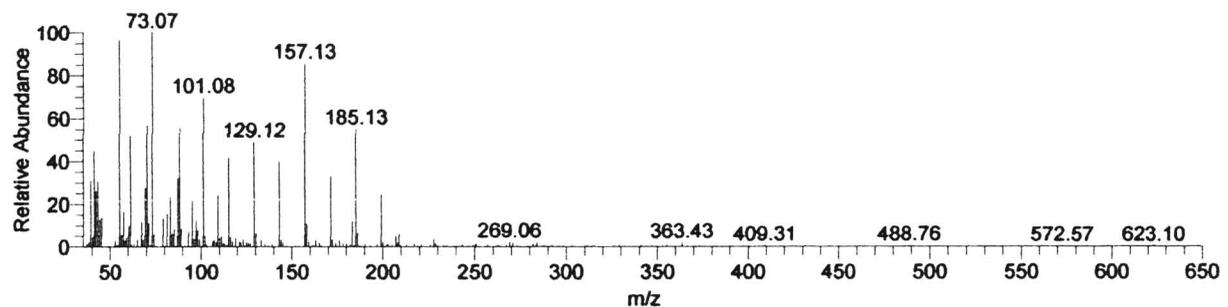
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
32.94	4,4'-Dicarboxybenzhydrol	298	mainlib	C15H12O5
32.94	Butane, 1-(benzyloxy)-2-[(benzyloxy)methyl]-4-chloro-	307	mainlib	C19H23ClO2
32.94	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	340	mainlib	C15H13N3O4



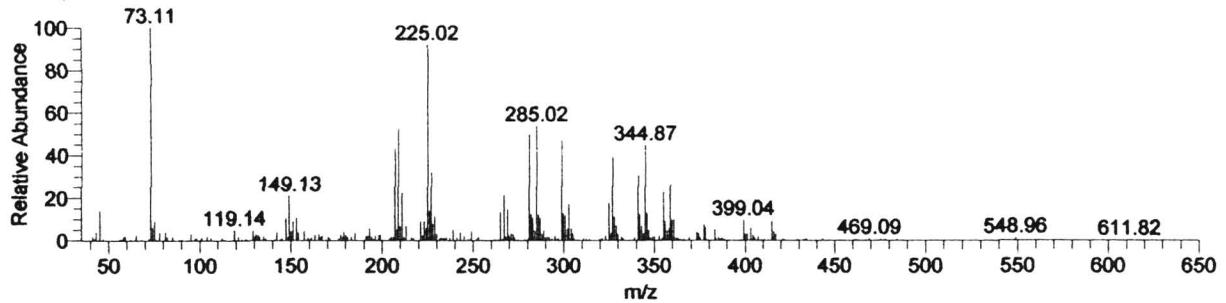
RT	Name	SI	Library	Formula
34.15	Octadecanoic acid, 11-methyl-, methyl ester	462	mainlib	C20H40O2
34.15	2,3-Dimethyl-3-decanol	550	mainlib	C12H26O
34.15	Undecanoic acid, 2-methyl-	670	mainlib	C12H24O2



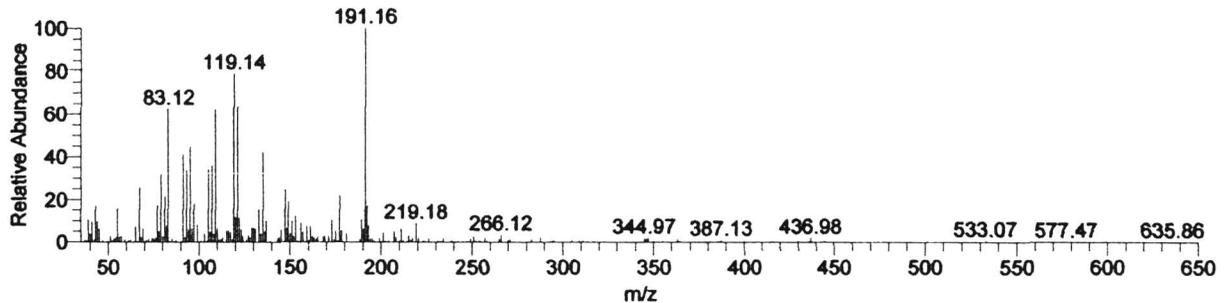
RT	Name	SI	Library	Formula
36.93	Phosphine, [[bis(pentafluorophenyl)phosphino]ethynyl]diphenyl-	206	mainlib	C26H10F10P2
36.93	Heptanoic acid, 2-ethyl-	332	mainlib	C9H18O2
36.93	Undecanoic acid, 2,8-dimethyl-, methyl ester	481	mainlib	C14H28O2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พาณิ ศิริสะอาดและคณะ 2552

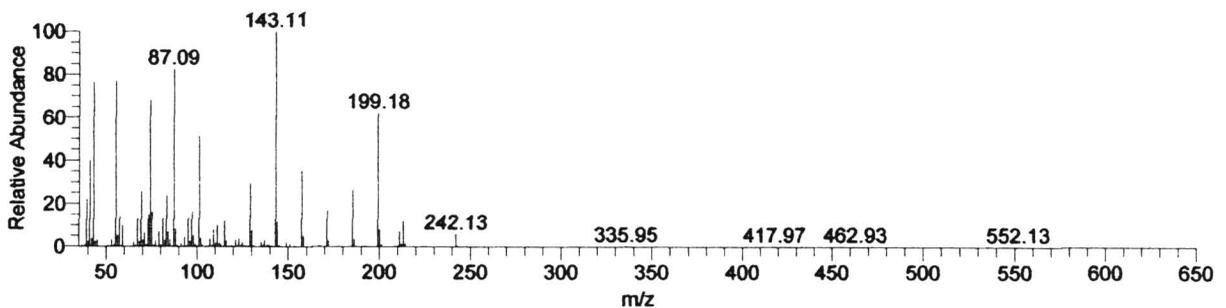
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
38.79	Proadifen	163	nist_msms	C23H31NO2
38.79	1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane	205	mainlib	C7H22O2Si3
38.79	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	299	mainlib	C15H13N3O4



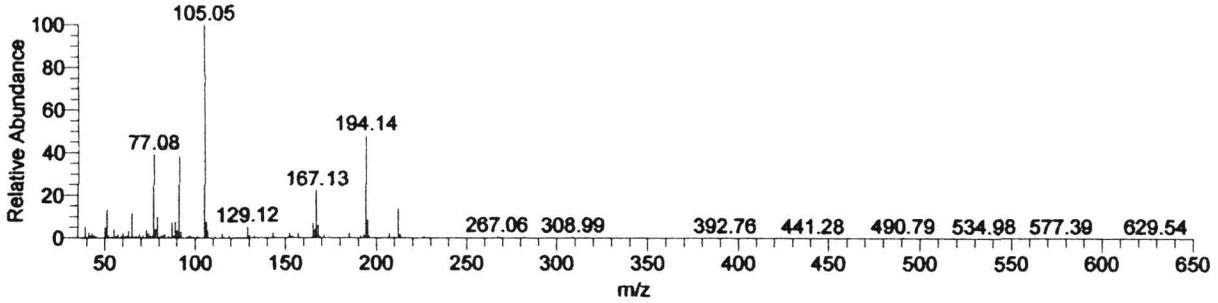
RT	Name	SI	Library	Formula
39.17	Iron, acetyldicarbonyl[(1,2,3,4,5-□)-1,2,3,4,5-pentamethyl-2,4-cyclopentadienyl]-	161	mainlib	C14H18FeO3
39.17	Diallylmethylchlorosilane	357	mainlib	C7H13ClSi
39.17	Spiro[4.5]dec-7-ene, 1,8-dimethyl-4-(1-methylethenyl)-, [1S-(1,4u,5o)]-	410	mainlib	C15H24



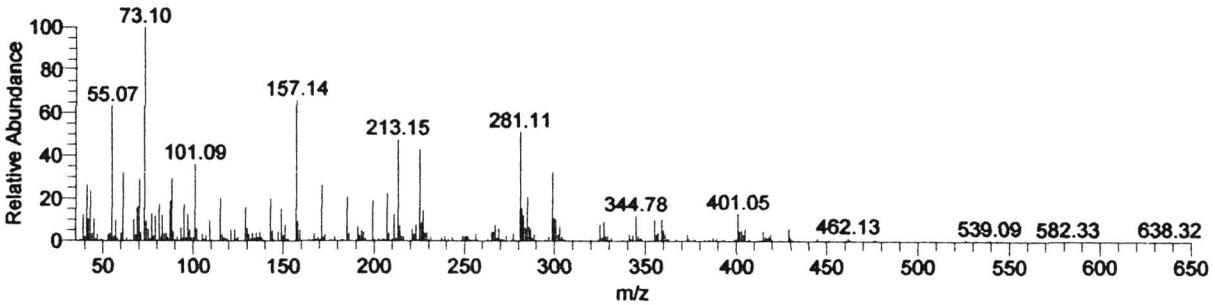
RT	Name	SI	Library	Formula
41.77	7-Tridecanol, 7-ethyl-	476	mainlib	C15H32O
41.77	Tetrabutylsilane	542	mainlib	C16H36Si
41.77	Tridecanoic acid, 12-methyl-, methyl ester	738	mainlib	C15H30O2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

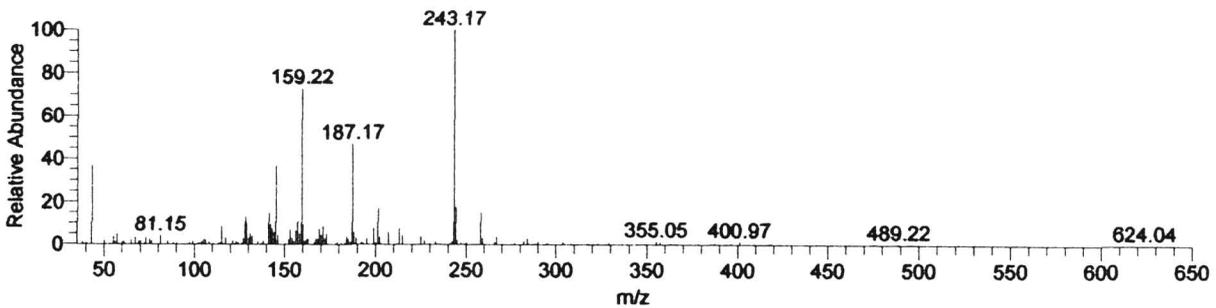
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
43.24	Orciprenaline	170	nist_msms	C11H17NO3
43.24	Isoprenaline	295	nist_msms	C11H17NO3
43.24	Benzyl Benzoate	628	NISTDEMO	C14H12O2



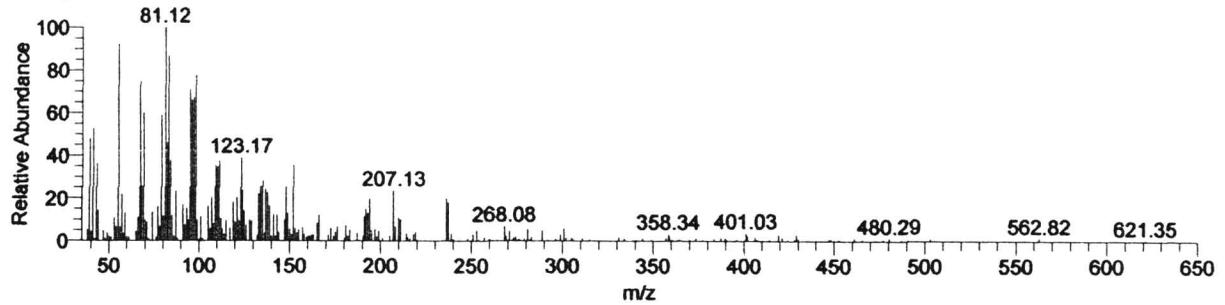
RT	Name	SI	Library	Formula
44.26	5'-O-(tert-butyl-dimethylsilyl)-thymidine	252	mainlib	C16H28N2O5Si
44.26	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	320	mainlib	C15H13N3O4
44.26	Tetrazepam	409	nist_msms	C16H17ClN2O



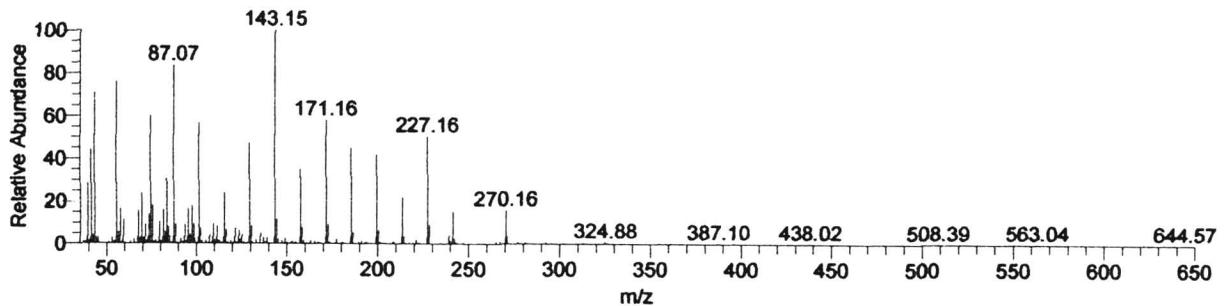
RT	Name	SI	Library	Formula
45.99	Ferrocene, [1-(hydroxyimino)ethyl]-, (Z)-	202	mainlib	C12H13FeNO
45.99	Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-3,5,5,6,8,8-hexamethyl-2-naphthalenyl)-	390	mainlib	C18H26O
45.99	Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-3,5,5,6,8,8-hexamethyl-2-naphthalenyl)-	467	mainlib	C18H26O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

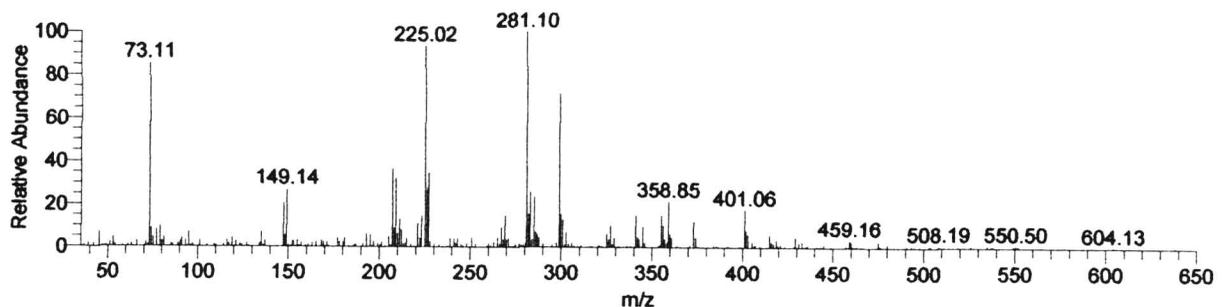
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
47.93	1,2-Dioxin-3-acetic acid, 6-(8,10-dodecadienyl)-3,6-dihydro-6-methoxy-, methyl ester, [3,6,6(8E,10E)]-	243	mainlib	C20H32O5
47.93	Ethyl 2-aza-3-oxatricyclo[3.3.3.0(1,5)]undecane-4-carboxylate	296	mainlib	C12H19NO3
47.93	Kauran-18-al, 17-(acetyloxy)-, (4u)-	422	mainlib	C22H34O3



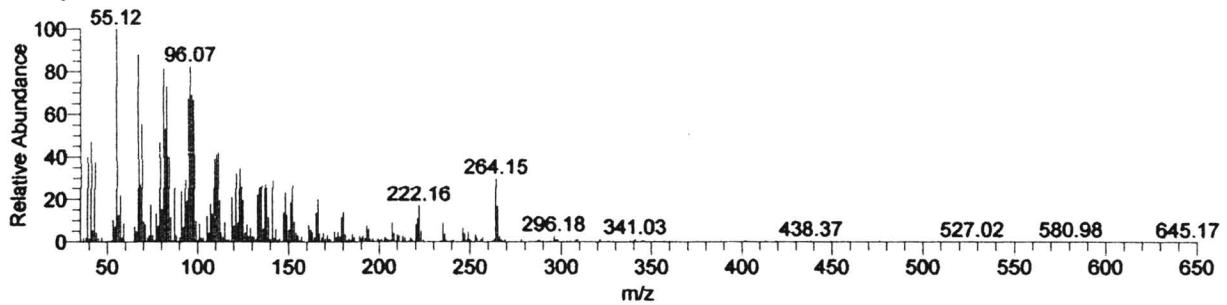
RT	Name	SI	Library	Formula
48.69	Dimethyl 2-carbethoxy-cyclopropane-1,1-dicarboxylate	189	mainlib	C10H14O6
48.69	Hexadecanoic acid, methyl ester	698	mainlib	C17H34O2
48.69	Hexadecanoic acid, methyl ester	701	replib	C17H34O2



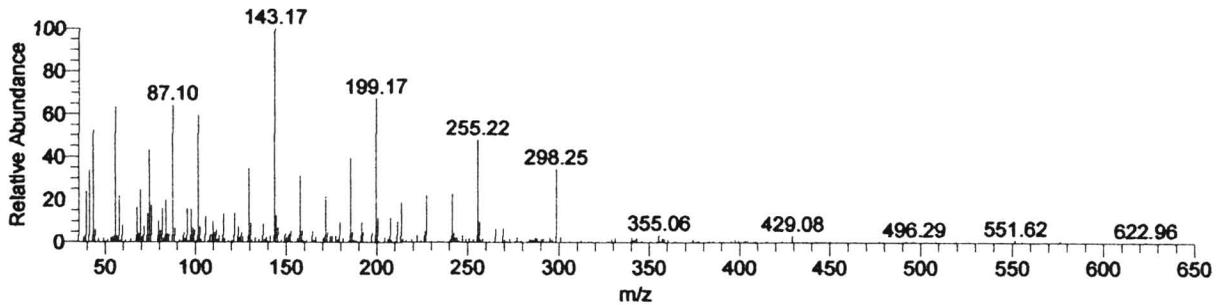
RT	Name	SI	Library	Formula
49.30	5'-O-(tert-butyl dimethylsilyl)-thymidine	268	mainlib	C16H28N2O5Si
49.30	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	325	mainlib	C15H13N3O4
49.30	Benzeneacetic acid, 4-methoxy-+-(trimethylsilyloxy)-, trimethylsilyl ester	343	mainlib	C15H26O4Si2

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552

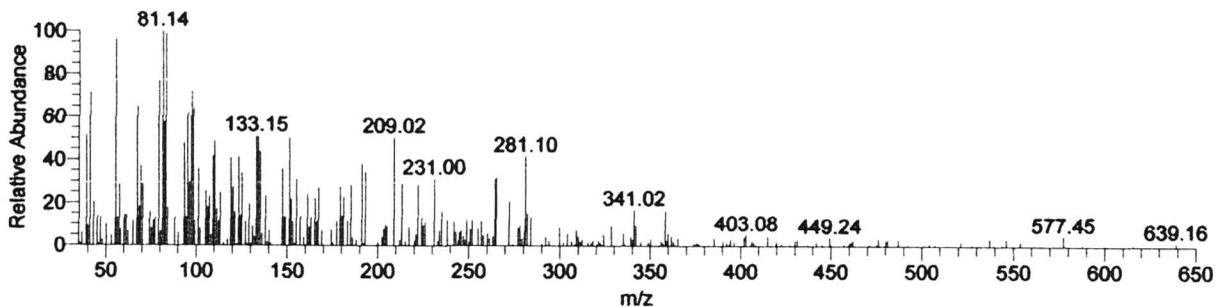
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
54.15	1,2-Dioxin-3-acetic acid, 6-(8,10-dodecadienyl)-3,6-dihydro-6-methoxy-, methyl ester, [3,6,6(8E,10E)]-	338	mainlib	C20H32O5
54.15	Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-pentyl-	363	mainlib	C12H22
54.15	Cyclohexaneethanol, μ -methylene-	367	mainlib	C9H16O

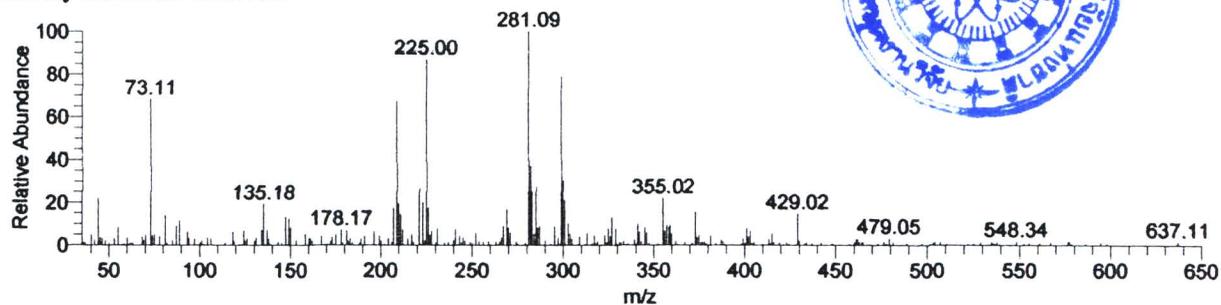


RT	Name	SI	Library	Formula
55.01	Proadifen	139	nist_msms	C23H31NO2
55.01	Benzeneacetic acid, 2-methoxy- <i>l</i> -[(trimethylsilyl)oxy]-, methyl ester	327	mainlib	C13H20O4Si
55.01	Octadecanoic acid, methyl ester	404	replib	C19H38O2



RT	Name	SI	Library	Formula
56.17	Proadifen	202	nist_msms	C23H31NO2
56.17	1-Ethyl-4-methoxy-9H-pyrido[3,4-b]indole	299	mainlib	C14H14N2O
56.17	Tetrazepam	391	nist_msms	C16H17ClN2O

การพัฒนาเครื่องสำอางบำรุงมือและเล็บ จากไขกะบก พานี ศิริสะอาดและคณะ 2552
GC MS Library search S3 cosolvent



RT	Name	SI	Library	Formula
58.19	5'-O-(<i>tert</i> -butyldimethylsilyl)-thymidine	258	mainlib	C ₁₆ H ₂₈ N ₂ O ₅ Si
58.19	2-Phenyl-4-ethoxycarbonyl-3H-imidazo[1,5-b]pyridazine-5,7-(6H)-dione	337	mainlib	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄
58.19	Tetrazepam	401	nist_msms	C ₁₆ H ₁₇ ClN ₂ O

