

Hanna Sell

Polyesteri-, polyamidi- ja juuttikuitujen tutkimus FTIR-laitteistolla sekä niiden poltossa muodostuvien savukaasujen kvalitatiivinen määrittäminen GC-MS-laitteistolla

Tekijä Otsikko Sivumäärä Aika	Hanna Sell Polyesteri-, polyamidi- ja juuttikuitujen tutkiminen FTIR-laitteistolla sekä niiden poltossa muodostuvien savukaasujen kvalitatiivinen määrittäminen GC-MS-laitteistolla 36 sivua + 7 liitettä 12.4.2012
Tutkinto	Insinööri (AMK)
Koulutusohjelma	Kemiantekniikka
Suuntautumisvaihtoehto	Prosessi- ja ympäristötekniikka
Ohjaajat	Laboratorioinsinööri Marja-Leena Åkerman Yliopettaja Pekka Lehtonen
<p>Insinööriyössä on tutkittu polyesteri-, polyamidi- sekä juuttikuituja, joista on pyritty selvittämään koostumus sekä puhtaus. Materiaaleja polttoleikataan ja siitä syntyviä savukaasuja on analysoitu.</p> <p>Materiaalien tunnistamisen käytettiin FTIR- ja DSC-laitteistoja sekä tehtiin polttokokeita. Juutille suoritettiin erillinen mikroskooppinen tutkimus. Savukaasujen analysoinnissa käytettiin massaselektiivisellä detektorilla varustettua kaasukromatografia (GC-MS-TD).</p> <p>IR-tekniikan avulla saatujen spektrien absorptiopiikkejä tutkimalla selvitettiin materiaaleissa olevia funktionaalisia ryhmiä. Niitä verrattiin kirjallisuudesta löytyviin materiaaleille ominaisiin funktionaalisiihin ryhmiin sekä vertailuspektreihin ja siten saatiin materiaalit tunnistettua. Kalorimetriset tutkimukset on tehty DSC-laitteistoa käyttäen. Materiaalien tunnistaminen niiden sulamistapahtuman perusteella saatiin vertailemalla tässä työssä saatuja tuloksia kirjallisuudesta löytyviin vastaaviin tutkimustuloksiin. Sulamisentalpian muutokset tukivat FTIR:n perusteella tehtyjä johtopäätöksiä.</p> <p>Polttokokeen tarkoituksena oli saada tietoa yksittäisen materiaalin käyttäytymisestä sitä poltettaessa. Polttokokeen avulla ei pystytä tunnistamaan materiaalia, mutta sen avulla voitiin huomata kullekin materiaalille ominaisia piirteitä, jotka tukevat muilla laitteilla saatuja tuloksia. Mikroskooppinen tutkimus tehtiin vain juutille.</p> <p>Savukaasuista on analysoitu GC-MS-TD-laitteistolla VOC-yhdisteiden koostumusta sekä selvitetty kirjallisuuden avulla niiden terveys- ja ympäristövaikutuksia.</p> <p>Insinööriyön alkuosassa on lyhyesti esitetty tietoa tutkittavista materiaaleista. Työ etenee koesuunnitelmasta itse tutkimuksiin. Käytetyt menetelmät periaatteineen on esitetty samassa luvussa kokeiden ja tulosten kanssa.</p>	
Avainsanat	FTIR, DSC, VOC-yhdisteet, polyesteri, polyamidi, juutti

Author Title Number of Pages Date	Hanna Sell Polyester-, polyamide- and jutefibre's study with FTIR-device and their flue gasses qualitative analysis with GC-MS-device 36 pages + 7 appendices 12 April 2012
Degree	Bachelor of Engineering
Degree Programme	Chemical Engineering
Specialisation option	Process and Environmental Engineering
Instructors	Marja-Leena Åkerman, Laboratory Engineer Pekka Lehtonen, Principal Lecturer
<p>This thesis deals with polyester, polyamide and jute. The aim of this study was to find out the purity and texture of those materials. In this project the materials were flame cutted and the flue gasses were analyzed.</p> <p>The devices for examining these materials were FTIR, DSC, flame test, and separated microscopic examination of the jute. Flue gasses were analyzed with a gas chromatography equipped with a mass selective detector (GC-MS TD).</p> <p>Infrared spectroscopy is an effective method when studying absorption peaks and in finding functional groups. From the data it was possible to identify the functional groups of the material, and by comparing the characteristic functional groups with those found in literature the materials of the samples were identified. Calorimetric studies were performed by using differential scanning calorimetric device. Identification of the materials was based on enthalpy changes; the changes were then compared to corresponding data found in the literature. The changes of enthalpy were supported by the conclusions drawn on the basis of FTIR studies.</p> <p>The purpose of the burn test was to get information about the material itself. Identification was not possible with the burn test but it supported the FTIR and DSC studies. A separate microscopic examination was made for jute.</p> <p>Flue gasses have been analyzed by a GC-MS-TD device. The effects of the flue gasses on humans and the environment were studied by means of literature review.</p> <p>At the beginning of the thesis, there is brief information about the materials studied. Then, the thesis proceeds from the test planning to the actual analyses. Each of the methods used with their principles and research aims are considered in the same chapter with experiments and test results.</p>	
Keywords	FTIR, DSC, VOCs, polyester, polyamide, jute

Sisällys

1	Johdanto	1
2	Tutkittavat materiaalit	2
2.1	Polyesteri	2
2.2	Polyamidi	2
2.3	Juutti	3
3	Koesuunnitelma	4
4	Tutkimukset FTIR-laitteistolla	5
4.1	IR-spektroskopia	5
4.2	Tutkimuksen tarkoitus	7
4.3	Tulokset	7
4.3.1	Polyesteri	7
4.3.2	Polyamidi	9
4.3.3	Juutti	11
5	Tutkimukset DSC-laitteistolla	12
5.1	Tietoa DSC-menetelmästä	12
5.2	Määrityksen tarkoitus	14
5.3	Määrityksen analyysit	14
5.3.1	Polyesteri	15
5.3.2	Polyamidi	16
5.3.3	Juutti	17
6	Polttokokeet	19
6.1	Analyysin tarkoitus	19
6.2	Analyysin tulokset	19
6.2.1	Polyesteri	19
6.2.2	Polyamidi	20
6.2.3	Juutti	21
7	Juutin tutkiminen mikroskoopilla	21
7.1	Analyysin tarkoitus	21

7.2	Tulokset	22
8	Savukaasujen analysointi GC-MS-TD-laitteistolla	23
8.1	GC-MS-TD-menetelmä	23
8.2	Analyysin tarkoitus	24
8.3	GC-MS-TD:n analysointi	24
8.4	Laboratorio-olosuhteissa otetut termodesorptionäytteet	25
8.4.1	Tulokset	26
8.4.2	Tulosten tulkinta	26
8.5	InSitu-näytteenotto	27
8.5.1	Tulokset	28
8.5.2	Tulosten tulkinta	29
8.6	Passiivinäytteenotto yrityksessä	29
8.6.1	Tulokset	30
8.6.2	Tulosten tulkinta	30
8.7	VOC-yhdisteiden vaarallisuusluokitus	31
9	Yhteenveto	32
	Lähteet	35
	Liitteet	
	Liite 1. IR-spektrit lukuun 4	
	Liite 2. Sulamiskäyrät lukuun 5	
	Liite 3. Vaarallisuusmerkit sekä S- ja R-lausekkeet lukuun 8	
	Liite 4. Kromatogrammit lukuun 8.4	
	Liite 5. Kromatogrammit lukuun 8.5	
	Liite 6. Kromatogrammit lukuun 8.6	
	Liite 7. Käytetyt laitteistot	

Lyhenteet ja käsitteet

Aaltoluku	Aallonpituuden λ käänteisyksikkö $1/\lambda$, yksikkönä cm^{-1} . Aaltoluku ilmoittaa yhden senttimetrin matkalle mahtuvien aaltojen lukumäärän.
Absorptio	Kaasun, nesteen tai jonkinlaisen energian imeytyminen aineeseen
Adsorbentti	Kromatografisessa analyysissä käytettävä kiinteä aine, joka adsorboi muita aineita pinnalleen.
Aromaattisuus	Yhdiste on aromaattinen, kun se sisältää vähintään yhden bentseenirenkaan.
DSC	Differentiaalinen pyyhkäisykalorimetria.
Endoterminen reaktio	Lämpöä sitova reaktio.
Entalpia	Aineen energiasisältö. Sulamisentalpia on sulamisessa tapahtuva entalpian muutos eli muutos aineen energiasisällössä.
Eksoterminen reaktio	Lämpöä vapauttava reaktio.
Funktionaalinen ryhmä	Molekyylin sisältämä atomi, sidos tai ryhmä. Esim. alkeenin kaksoissidos tai alkoholin hydroksyyli-ryhmä.
FTIR	<i>Fourier Transform Infrared Spectroscopy</i> . IR-spektroskopiassa käytettävä menetelmä, jossa Fourier-muunnin.
Kvantitatiivinen	Määrällinen tutkimus, joka tarkoittaa tutkimusta, jossa käytetään täsmällisiä ja laskennallisia menetelmiä.
Kvalitatiivinen	Laadullinen tutkimus, jota käytetään ihmistieteissä kvantitatiivisen tutkimuksen lisäksi. Laadullisessa tutkimuksessa pyritään ymmärtämään tutkittavaa ilmiötä.

Lämpökapasiteetti

Kuvaa, miten paljon lämpöenergiaa kappaleeseen sitoutuu lämpötilaeroa kohti.

PET

Polyetylenitereftalaatti. Käytetään tekstiileissä polyesterikuituina.

1 Johdanto

Tämä insinööritoiminta on tehty erään teollisuusyrityksen pyynnöstä. Lähtökohtana yritykselle on ollut saada tietoa yrityksen tuotteen valmistusprosessissa muodostuvien savukaasujen koostumuksesta. Lisäksi yritys on halunnut saada lisää tietoa muualta tulevien raaka-aineiden koostumuksesta ja puhtaudesta. Käytettävissä olevien analyysimenetelmien avulla on pyritty selvittämään polyesteristä, polyamidista ja juutista valmistetun narun rakennetta ja koostumusta.

Koostumuksen selvittämiseksi valittiin seuraavat laitteistot ja menetelmät: FTIR, DSC, liekkikoe sekä juutin mikroskooppinen tutkimus. FTIR-menetelmällä pystytään spektriin avulla tunnistamaan kyseessä oleva materiaali kirjallisuudesta löytyvien vertailuspektriin avulla. DSC-menetelmän avulla taas saadaan selville aineiden entalpiamuutokset ja niiden perusteella voidaan selvittää materiaalien puhtautta. Polttokokeen tarkoituksena on saada selville yksittäisen komponentin palamisprosessiin liittyvät tapahtumat ja verrata niitä kirjallisuudesta mahdollisesti löytyvään tietoon. Juuttia tutkittiin mikroskoopilla, tarkoituksena on tarkastella sen rakennetta hieman tarkemmin.

Tiettyssä vaiheessa yrityksen prosessia materiaalia polttoleikataan, ja syntyvät savukaasut imetään pois hengitysilma-alueesta kohdeimurin avulla. Kohdeimuri on sijoitettu polttoleikkurin yläpuolelle, josta se kuljettaa savukaasut ulkoilmaan. Polttoleikattavia materiaaleja on kolme laatua: komponenteista (polyesteri, polyamidi ja juutti) koostuvaa paksua ja ohutta narua sekä polyesteristä koostuvaa narua. Tehtävä oli tutkia näistä polttoleikattaessa syntyviä savukaasuja ja selvittää kirjallisuuden avulla niiden haitallisuus ihmiselle sekä ympäristölle. Ilmanäytteet otetaan aktiivi- ja passiivinäytteenotto-menelmiä käyttäen. Passiivinäytteiden avulla selvitetään savukaasujen kerääntymisen hengitysilmassa.

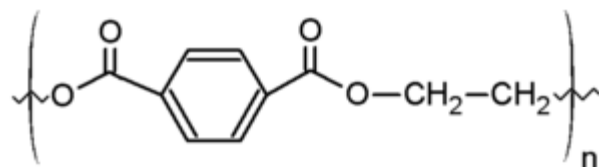
Savukaasujen tutkimisessa käytetään massaspektrometri-ilmaisimella (MS) varustettua kaasukromatografiaa (GC). Savukaasujen analyysi suoritetaan keräämällä näytteet pumpun avulla adsorbenttiputkeen. Tässä työssä käytettiin Tenax-tuubeja, jossa haihtuvat orgaaniset yhdisteet (VOC) pidättyvät adsorbenttiin. Tenaxia kuumentamalla analysoi-

tava yhdiste siirtyy "trappiin" ja sen jälkeen injektoidaan laitteeseen, ja kirjaspektrin avulla laite pystyy tunnistamaan savukaasuissa olevat yhdisteet. Polyesteri ja polyamidi ovat orgaanisia yhdisteitä ja juutti orgaanista materiaalia. On tärkeää tietää, mitä savukaasut pitävät sisällään, joten näytteitä otetaan suoraan savukaasuista. Yrityksellä on kohdeimureita savukaasujen poistamiseen, mutta varmistaakseen niiden riittävän tehon ovat myös passiivinäytteet tarpeen.

2 Tutkittavat materiaalit

2.1 Polyesteri

Polyesterit (lyhenne PE) ovat polymeerejä, joissa esteriryhmät sitovat monomeeriyksiköitä toisiinsa. Polyesterit soveltuvat moniin käyttötarkoituksiin, kuten vaatetukseen, sisustukseen sekä teknisiin käyttökohteisiin. Polyesteriä voidaan käyttää myös sekoitteina, joissa se lisää lujuutta, mitta- ja muotopysyvyyttä, oikenevuutta sekä helppohoitaisuutta. Sekoitteina käytetään yleensä villaa, puuvillaa, viskoosia sekä joitakin synteteesiä kuituja. Polyesteri kestää hyvin eri käyttöolosuhteita sekä erilaisia kemikaaleja, koska se on kemiallisesti stabiili ja rakenteeltaan tiivis. Polyesterit kestävät myös hyvin erilaisia kemikaaleja. [1, s. 355; 2]



Kuva 1. PET:n rakennekaava. [24]

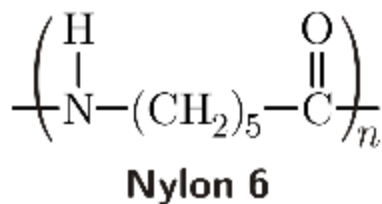
Polyeteenitereftalaattia (PET) käytetään tekstiileissä polyesterikuituina. Sen molekyylit ovat suoraketjuisia ja ne voidaan pienen reiän läpi pakottamalla saada asettumaan rinnakkain, jolloin ne voidaan kehretä langaksi. [1, s. 355]

2.2 Polyamidi

Kauppanimeltään nyloniksi (nailon) kutsuttu polyamidi (lyhenne PA) valmistetaan adiipiinihaposta ja diaminoheksaanista. Polyamidit voidaan jakaa kahteen ryhmään niiden

rakenteen perusteella. Jaottelu tapahtuu molekyyliketjujen perusteella, missä toisella molekyyliketjut muodostuvat vain yhdentyypisestä monomeeristä (PA 6, PA 11 ja PA12) ja toinen kahdentyypisestä monomeeristä (PA 66, PA 69 ja PA 610). Lyhenteen jäljessä oleva numero ilmaisee, kuinka monta hiiliatomia molekyyliketjussa sijaitseva monomeeri sisältää.

Polyamidit kestävät hyvin orgaanisia liuottimia, happoja ja emäksiä. Polyamidista valmistetaan muun muassa kuituja, köysiä ja erilaisia koneen osia.



Kuva 2. Nylon 6:n rakennekaava. [25]

Tässä insinööriyössä on tutkittu aromaattista polyamidia. Siinä jokainen rakenneyksikkö sisältää aromaattisen renkaan, joka tekee polyamidien rakenteesta vankan. Näistä valmistetuilla kuiduilla on erinomainen kemiallinen kestävyys, mekaaninen lujuus sekä lämmönkestävyys, ja vain muutama vahva happo vaikuttaa niihin. [9, s.227; 10]

2.3 Juutti

Kultaiseksi kuiduksi kutsuttu juutti on yksi luonnon vahvimmista kasvikuuduista. Lähes 85 % juutista kasvatetaan Ganges-joen suistossa Intiassa ja Bangladeshissa. Juutti on hyvä eristämään, sillä on korkea antistaattinen ominaisuus, sekä pieni lämmönjohtokyky. Kasvikuituna sitä käytetään kankaisiin, naruihin sekä moniin muihin käyttötarkoituksiin. [3]

Juutin viljelyssä käytetään kahta eri kasvilajia: *Chochorus capsularis* ja *Chorchocus olitorius*. Kuitua saadaan varren kuoresta, jossa se esiintyy pitkinä, kolmiomaisina kimppuina. Juuttikuidut koostuvat pääasiassa kasvien selluloosasta ja ligniinistä, eli juutti on osittain tekstiilikuitua ja osittain puuta.

3 Koesuunnitelma

Teollisuusritys halusi tämän tutkimuksen avulla selvittää yrityksessä käytettävien materiaalien koostumuksen ja puhtauden sekä polttoleikkauksen yhteydessä syntyneiden savukaasujen koostumuksen. Yrityksellä ei ole itsellään laitteistoja näiden selvittämiseksi, joten kokeet suoritettiin Vantaalla Metropolian (Leiritie 1) tiloissa.

Taulukko 1. Koesuunnitelma materiaalien koostumuksen ja puhtauden selvittämiseksi.

Käytettävät laitteistot/ menetelmät	Tutkittava materiaali	Näytteiden määrä
FTIR	Polyesteri	1
FTIR	Polyamidi	1
FTIR	Juutti	1
DSC	Polyesteri	2
DSC	Polyamidi	2
DSC	Juutti	2
Liekkikoe	Polyesteri	1
Liekkikoe	Polyamidi	1
Liekkikoe	Juutti	1
Mikroskoopilla tutkiminen	Juutti	1
	yhteensä	13

Taulukossa 1 on esitetty materiaalien koostumuksen ja puhtauden selvittämiseksi käytettyjen menetelmien mittaussuunnitelma. DSC-laitteistolla suoritetaan rinnakkaismitaukset.

Taulukko 2. Koesuunnitelma savukaasujen analysoimiseksi.

Näytteenottoaikka	Tutkittavat materiaalit	Näytteiden määrä
OffSitu	Polyesterinaru	2
OffSitu	Komposiiteista koostuva paksumpi naru	2
InSitu	Polyesterinaru	2
InSitu	Komposiiteista koostuva paksumpi naru	2
InSitu	Komposiiteista koostuva ohuempi naru	2
Passiivinäyte	Passiiviset savukaasut	2
Passiivinäyte	Passiiviset savukaasut	2
Passiivinäyte	Passiiviset savukaasut	2
	yhteensä	16

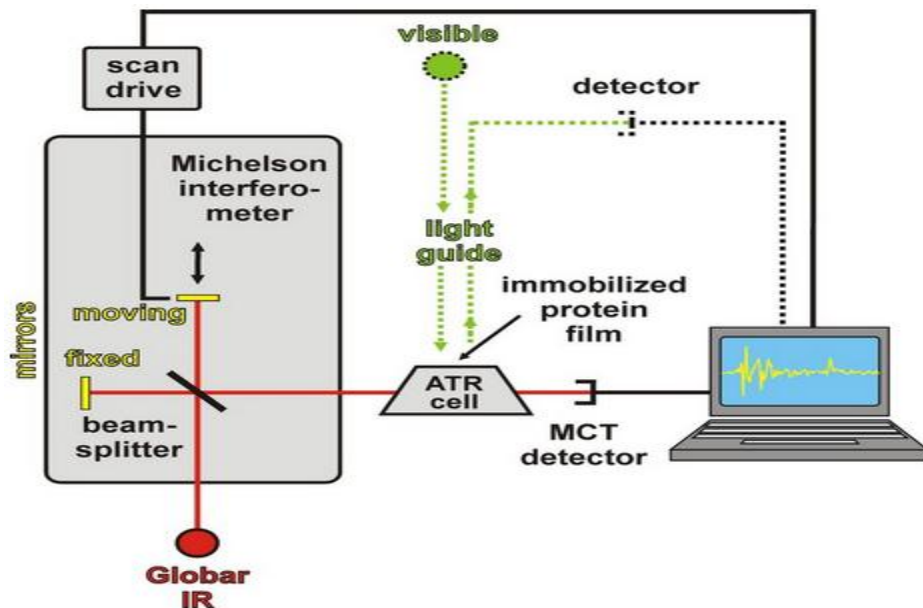
Taulukossa 2 on esitetty GC-MS-TD-laitteilla määritettävien savukaasujen mittaus-suunnitelma. OffSitu-näytteet kerätään Metropolian Leiritie 1:n tiloissa laboratorio-olosuhteissa. InSitu-näytteet kerätään yrityksen tiloissa todellisissa tuotannon olosuhteissa. Passiivinäytteet otetaan yrityksessä kolmelta eri etäisyydeltä polttoleikkurista katsottuna.

4 Tutkimukset FTIR-laitteistolla

4.1 IR-spektroskopia

IR-spektroskopiaa käytetään pääasiassa orgaanisten molekyylien tunnistamiseen, koska orgaaniset molekyylit absorboivat infrapunasäteilyä. FTIR-spektroskopiassa (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) näytteeseen kohdistetaan infrapunasäteilyä (IR). IR-säteily on lämpösäteilyä, jonka energia on suhteellisen pieni. Se aiheuttaa kemiallisten sidosten värähtelyä ja molekyylien rotaatiota. Värähtely voi olla venytystä tai taivutusta. IR-säteilyn energia johtuu sähkömagneettisesta säteilystä, jota kutsutaan infrapunasäteilyksi. Siinä aallonpituus jää näkyvän ja mikroaaltoalueen väliin. FTIR eroaa tavanomaisesta IR-tekniikasta Fourier-muunnoksella. Sillä saadaan koko spektri laajalta

aaltolukualueella yhdellä mittauksella. Aaltolukualue on tyypillisesti $5000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$. [4; 5, s.30]



Kuva 3. FTIR-laitteiston periaate. [14]

Ajoa suoritettaessa säteily jakautuu kahteen osaan. Toinen tai molemmat säteistä kulkevat näytteen läpi, mutta toinen säde kulkee pidemmän matkan. Säteiden matkaerosta johtuen ne joko vahvistavat tai sammuttavat toisiaan. Näyte absorboi osan säteilystä, ja läpäisevät säteet kerätään ilmaisimelle. Spektrit esitetään transmittanssimuodossa, jolloin vaaka-akselilla on aaltoluku. Planckin lain mukaan säteilyn energia on aaltoluvun suhteen suoraan verrannollinen. Säteilyn energia siis kasvaa aaltoluvun kasvaessa ja aallonpituuden pienetessä. IR-spektrissä ei näy kaksiatomisia alkuainekeasuja, mutta perusvärähtelyiden lisäksi voidaan havaita ylivärähdyksiä. Ylivärähdykset ovat perusvärähdysten monikertoja ja niiden intensiteetti on pieni. Molekyylien sidosten värähtely vaikuttaa seuraavan sidoksen värähtelyyn ja sitä seuraavaan jne. Tästä johtuen jokaisella molekyylillä on tunnusomaiset värähtelyt, ja näin ollen jokaisella molekyylillä on tunnusomainen spektri, jota käytetään aineen tunnistamiseen. Näyte tunnistetaan absorptiojuovien paikan, muodon ja intensiteetin perusteella. Tunnistettaessa on vaikeaa arvioida transmittanssin absoluuttisia arvoja, joten yleisesti käytetään seuraavia määritteitä: voimakas, s (strong); keskinkertainen, m (medium); heikko w (weak). [4; 5, s.30]

4.2 Tutkimuksen tarkoitus

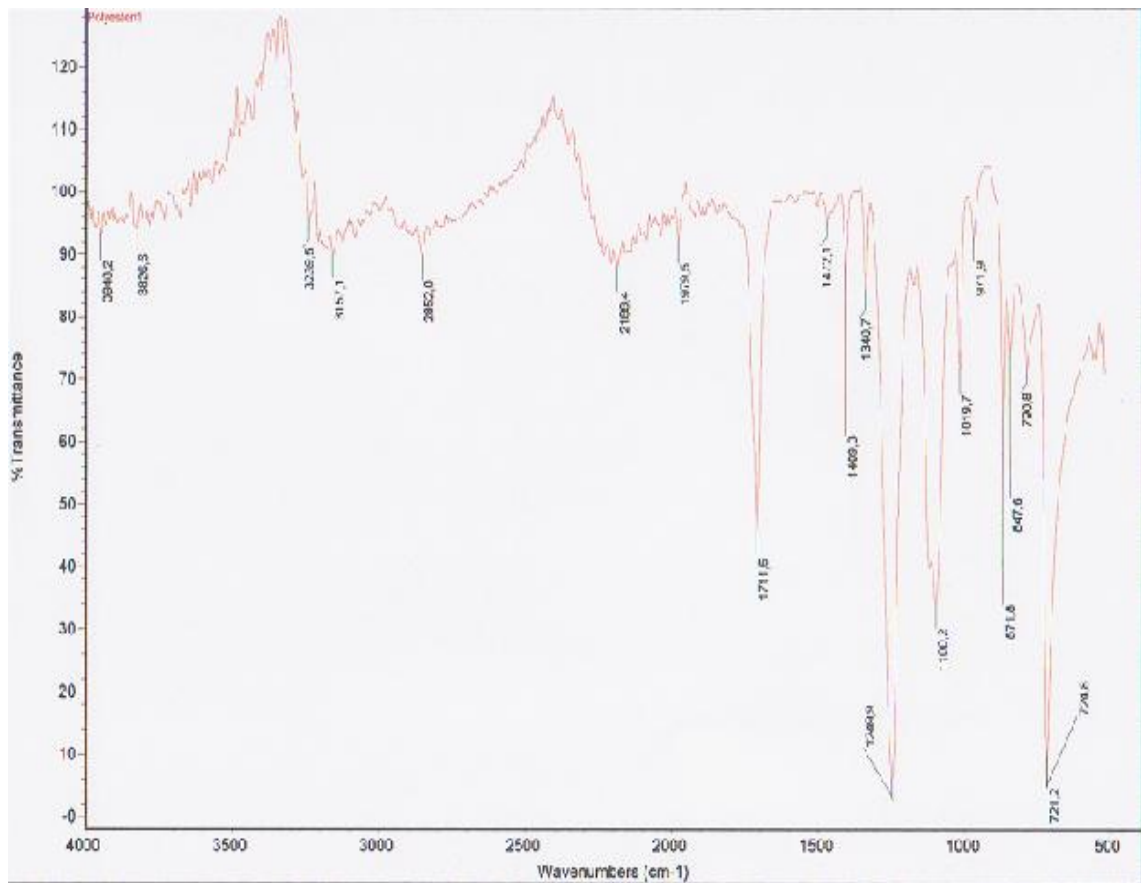
IR-tutkimuksen tarkoituksena on osoittaa polyesteri, polyamidi ja juutti vertailuspektriin avulla kyseisiksi materiaaleiksi. IR-spektri antaa tietoa kemiallisista sidoksista ja atomiryhmistä. Spektreistä pystytään myös päättämään, mitä atomiryhmiä siinä ei ole, koska tiettyjen funktionaalisten ryhmien absorptiopiikit esiintyvät aina tietyllä alueella. IR-laitteiston oma spektrikirjasto antaa näytettä lähimpänä olevat yhdisteet ja niiden vastaavuudet. Lähtötietona saadaan siis selville tutkittavana olevan yhdisteen spektrin yhteensopivuus spektrikirjastosta löytyvälle vertailuaineelle. Absorptiopiikkejä tutkimalla selvitetään materiaaleissa olevia funktionaalisia ryhmiä ja vertaillaan niitä kirjallisuudesta löytyviin materiaalille ominaisiin funktionaalsiin ryhmiin ja näin ollen pystytään tunnistamaan kyseessä oleva materiaali.

4.3 Tulokset

4.3.1 Polyesteri

FTIR-laitteiston oma spektrikirjasto antoi tutkittavalle polyesterille lukuarvoltaan 40,98 vastaavuuden polyetyleenitereftalaatin kanssa. Lukuarvo 100 kuvaa täydellistä vastaavuutta. Tämä tieto ei kuitenkaan riitä varmentamaan, mitä materiaalia aine on, joten on syytä etsiä kirjallisuudesta vertailuspektriä ja tutkia absorptiopiikkien perusteella materiaalille ominaisia sidostyyppisiä.

SDBS:n (Spectra Data Base System for organic compounds) spektrikirjastosta löytyi PET:n vertailuspektri tutkittavalle materiaalille. Tutkittavalla polyesterillä on aaltolualueella $2000\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ hyvin vähän absorptiopiikkejä verrattuna kirjallisuuden spektriin. Tutkittavassa spektrissä löytyy tuolla alueella vain hydroksyyliiryhmiä, kun taas kirjallisuudessa absorptiopiikit johtuvat joko aromaattisista heterosyklisistä ryhmistä, vetysidoksista tai hydroksyyliiryhmistä. Aaltolualueella $1800\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ löytyi hyvin paljon yhtäläisyyksiä piikeissä.



Kuva 4. FTIR-spektri polyesteristä.

Kuvassa 4 on nähtävissä tutkittavan polyesterin FTIR-spektri. Kirjallisuudesta löydetty vertailuspektri on esitetty liitteessä 1 sivulla 1.

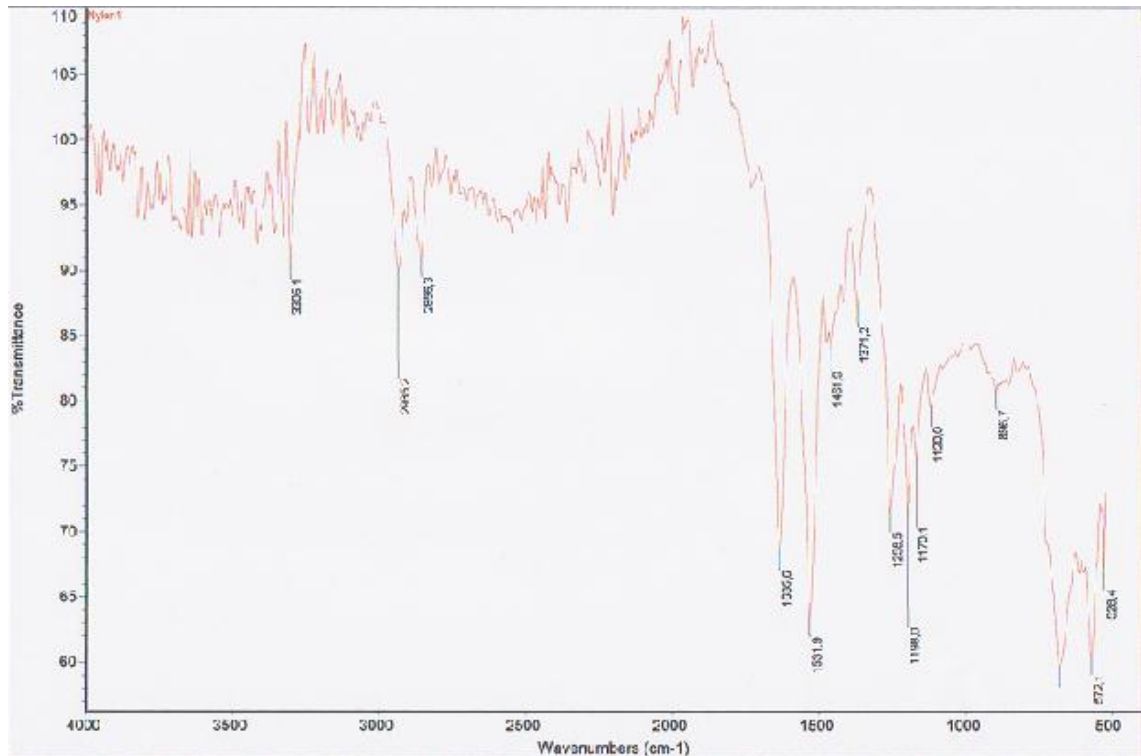
Taulukko 3. Absorptiopiikkien tulkinta polyesterinäytteestä.

sidostyyppi	Aaltoluku (cm ⁻¹)
C=O aldehydi	1711,5
C-H aromaattinen rengas	1409,3
Karboksyylihapon esteri	1340,7
C-O alkoholin eetteri	1250
O=C-O-C	1100,2 ja 1019,7
C=C	971,9
5 substioitunutta vetyä bentseenirenkaassa	871,8
2 vierekkäistä vetyä bentseenirenkaassa	847,6
C-H aromaattinen rengas	724

Taulukossa 3 on lueteltu näytteen tärkeimmät absorptiopiikkien sidostyyppit. Pääsidostyyppit näytteessä olivat aromaattiset renkaat, heterosyklinen aromaattinen rengas, esteri, alkoholi sekä aldehydi. PET:lle ominainen piikki on aromaattinen rengas aaltoluvulla 1409,3 cm⁻¹. Polyesterin tärkeimmät funktionaaliset ryhmät löytyvät myös vertailuspektristä. Vertailuspektrin yhteneväisyyden perusteella pystytään osoittamaan, että tutkittava materiaali on polyeteenitereftalaattia.

4.3.2 Polyamidi

Polyamidin FTIR-spektri antoi spektrikirjastosta yhteneväisyyden polyamidi 6:lle ja polyamidi 6,6:lle lukuarvoltaan 60,27 vastaavuuden. Pelkän polyamidin vastaavuus oli vain hieman alhaisempi 58,12. Tästä voidaan tehdä johtopäätös, että kyseinen materiaali ei ole puhdasta polyamidi 6:ta vaan siinä on myös hieman polyamidi 6,6:ta mukana. Lähdin kuitenkin etsimään vertailuspektriä polyamidi 6:sta, koska FTIR:n oman spektrikirjaston mukaan polyamidi 6,6:n vastaavuus materiaalista olisi noin 2.



Kuva 5. FTIR-spektri polyamidista.

Kuvassa 5 on nähtävissä tutkittavan polyamidin FTIR-spektri. Polyamidi 6:lla on monta eri kauppanimeä sekä valmistajien omia nimityksiä ko. materiaalille. Yksi näistä nimistä on polycarpolactam, jonka FTIR-kuvaaja löytyy liite 1:n sivulta 2.

Taulukko 4. Absorptiopiikkien tulkintaa polyamidista.

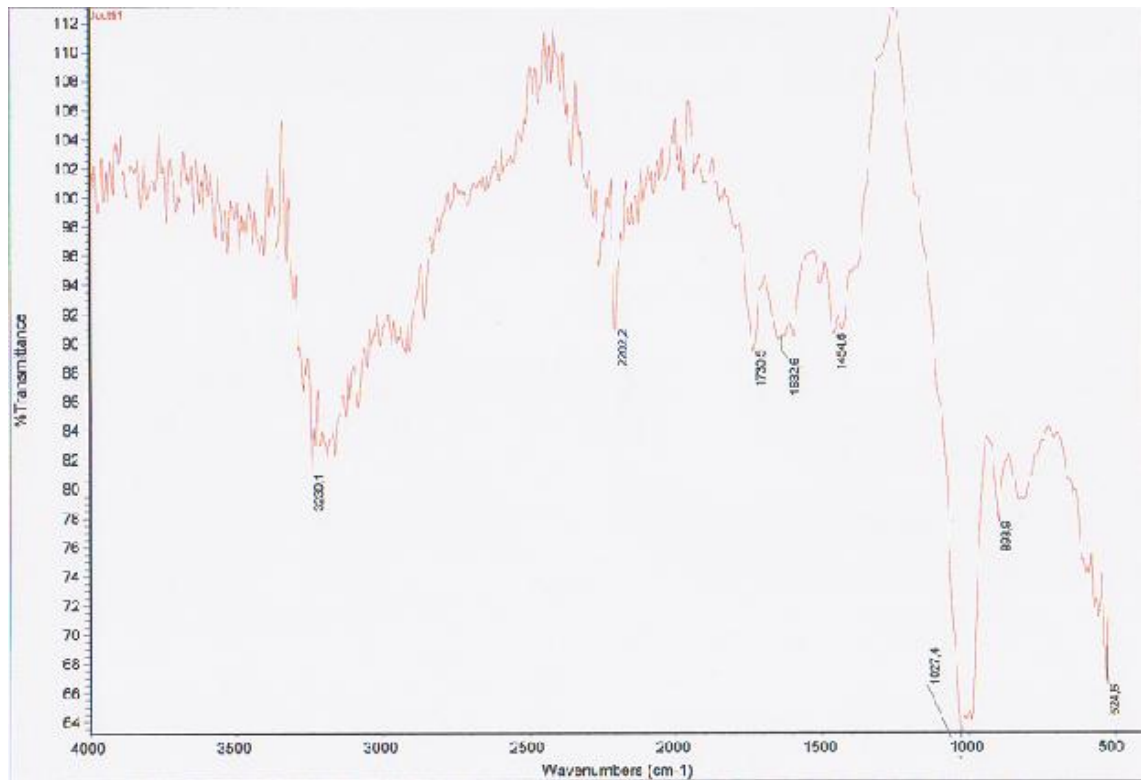
Sidostyyppi	Aaltoluku (cm ⁻¹)
C-H alkyynit (-C≡C-H)	3305
C-H alkaani	2935 ja 2856
C=C alkeeni	1635
C=C aromaattinen rengas	1532
C-N amidit	1258–1170

Taulukossa 4 on esitetty tutkittavan materiaalin keskeisimmät funktionaaliset ryhmät. Polyamidille tunnusmaisimmat piikit ovat amidien piikkejä. Aaltoluvulla 3305 cm⁻¹ olevan amidin absorptio on heikko, koska se on toissijainen amidi. Aaltoluvuilla 1170–1258

cm^{-1} löytyy ryhmä amideja, jotka ovat yhdisteen ensisijaisia amideja. Amidipiikit ovat polyamidille tunnusomaisia piikkejä. Absorptiopiikkien sijainteja vertaamalla vertailuspektriin huomataan niiden yhteneväisyys. Tämän perusteella pystytään osoittamaan yhdisteen olevan suurimmaksi osaksi polyamidi 6:ta.

4.3.3 Juutti

FTIR-laitteiston omasta spektrikirjastosta ei löytynyt juuttia vastaavaa vertailuspektriä. Laite kuitenkin näyttää aina spektrikirjastosta lähinnä materiaalia muistuttavan yhdisteen spektrin, mutta vastaavuudet olivat niin pieniä, ettei niillä ole tekemistä juutin kanssa.



Kuva 6. FTIR-spektri juutista.

Kuvassa 6 on esitetty tutkittavan juutin FTIR-spektri. Kirjallisuudesta otettu vertailuspektri juutille löytyy liitteenä 1 sivulta 3.

Taulukko 5. Absorptiopiikkien tulkintaa juutista.

sidostyyppi	Aaltoluku (cm ⁻¹)
Hydroksyyli ryhmä (-OH)	3239
C-O venytys	1730
C-H alkaani	1454
C-O-C	1027

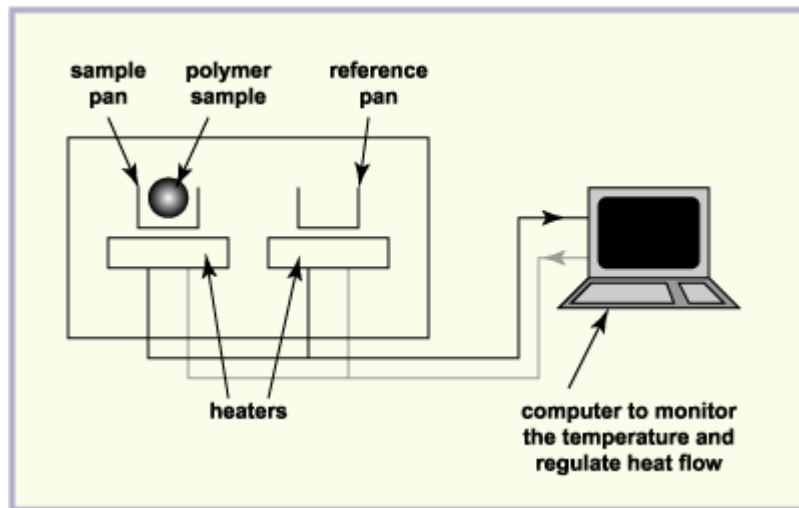
Taulukossa 5 on esitetty juutin keskeisimmät funktionaaliset ryhmät. Juutille tyypilliset funktionaaliset ryhmät kuten hydroksyyli ryhmä (-OH) sekä C-O-C ovat selkeästi erotettavissa myös vertailuspektrissä. Tutkittavan spektrin sekä vertailuspektrin välillä ei ole huomattavia eroja absorptiopiikkien sijainnissa. Näin ollen pystytään osoittamaan se, että kuitumateriaali on juuttia.

5 Tutkimukset DSC-laitteistolla

5.1 Tietoa DSC-menetelmästä

Differentiaalisen pyyhkäisykalorimetrin lyhenne tulee englannin kielen sanoista Differential Scanning Calorimetry (DSC). DSC on laajasti käytetty, ja se tarjoaa nopeasti ja helposti tietoa materiaalista sen käyttökohteesta riippumatta. DSC-laitteistoa käytetäänkin usein polymeereihin, muoveihin, ruokaan, lääketieteeseen, lasiin, keraamiikkaan yms. liittyvään tutkimukseen. Sitä käytetään mittaamaan energian muutoksia lämmitettäessä näytettä, kuten lämpövirtausta, sulamis- ja lasittumislämpötilaa. Lasittumislämpötilan alapuolella aineen amorfiset osat ovat kovia ja lasimaisia.

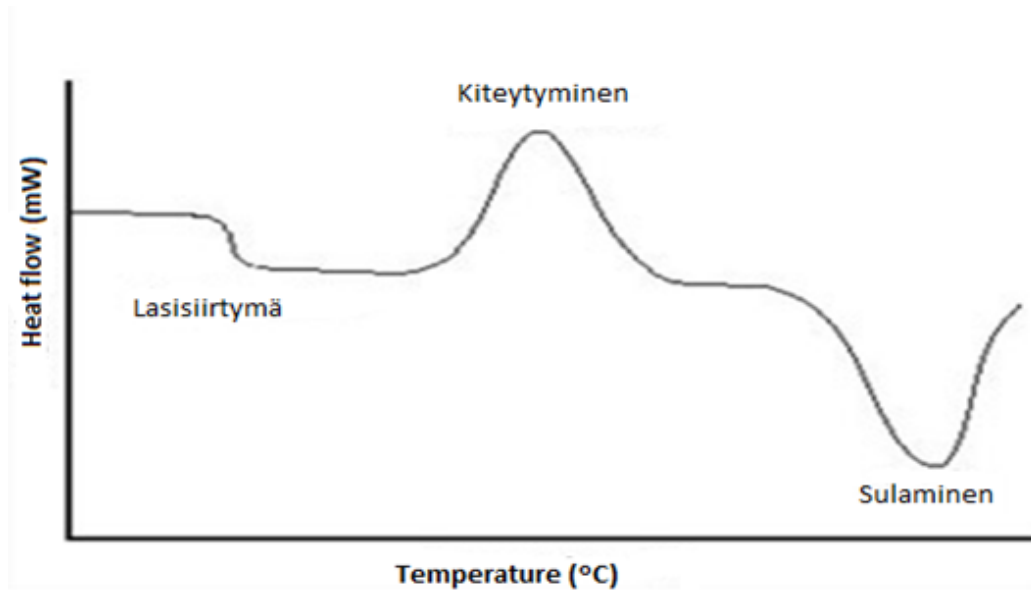
Lämpökapasiteetin muutokset lämpövirrassa tulevat näkyviin välittömästi, kun materiaalia lämmitetään tai jäähdytetään. Lämpötilan muutokset taltioituvat kuvaajaan, jonka avulla voidaan erottaa sekä endotermisiä että eksotermisiä reaktioita. Tärkeimpiä tutkittavia ominaisuuksia ovat lasittumis- ja sulamislämpötilat, kiteisyys, koostumus ja hapettumisilmiöt. [6, s.2-3, 47]



Kuva 7. Kuvassa on nähtävissä DSC- laitteiston periaate. [8]

Laitteistossa on uuni, joka sisältää paikat näytteelle sekä referenssille. Uuni on valmistettu metallista ja sen sisälle johdetaan lämpövirtaa suoraan näytteeseen. Näytettä laitetaan muutama milligramma alumiinista valmistettuun upokkaaseen, joka suljetaan puristamalla reunat yhteen prässäyslaitteen avulla. Referenssinäyte on aina tyhjä panna. Kun näytteessä alkaa tapahtua muutoksia, niin lämpötilamuutokset tapahtuvat näytteen ja referenssinäytteen välillä. Detektorit kirjaavat muutokset ja muuntavat signaalin lämpövirran ja lämpötilan funktioksi.

Sulaminen on endoterminen tapahtuma. Sulamisalue riippuu polymeerin rakenteesta, eli mitä suuremmat ovat polaariset vetovoimat (vetysidokset), sitä korkeammassa lämpötilassa sulaminen tapahtuu. Kiteytyminen on eksoterminen tapahtuma. Materiaalin kiteisyydellä on suuri vaikutus sen mekaanisiin ominaisuuksiin. Kiteisyyden kasvaessa kasvaa myös jäykkyys, lujuus, kovuus, haurasmurtuma sekä kemiallinen kestävyys, kun taas liukoisuus ja lisäaineiden sekoittuvuus pienenee. Kiteytymislämpötila on hyvin herkkä molekyyli­rakenteessa esiintyville muutoksille, joten sen avulla pystytään vertaamaan eri materiaaleja. Lasisiirtymä näkyy kuvaajalla selvänä tason muutoksena. Sen alapuolella aine on lasimaisen kovaa ja haurasta, yläpuolella kumimaisen sitkeää. Lasipisteessä muuttuu polymeerin elastisuus, tiheys, dielektrisyys, taitekerroin, mekaaninen vaimennus, ominaislämpö ja lämpölaajeneminen. Käyrä palaa aina pohjaviivalle, kun reaktio on saanut päätöksensä. [6, s.3, 47, 145]



Kuva 8. DSC-laitteiston muodostama kuvaaja. [7]

Kuvassa 8 on esitetty DSC-laitteiston kuvaaja, jossa on selvästi nähtävissä lasisiirtymä (T_g), kiteytyminen (T_c) ja sulaminen (T_m). Kuvaajan y-asteikko ilmoittaa eksotermisen tapahtuman ylöspäin kulkevana käyränä.

5.2 Määrityksen tarkoitus

DSC-määrityksen tarkoituksena on saada selville näytteissä tapahtuvat entalpiamuutokset. DSC-kuvaajaan ilmenneitä muutoksia verrataan kirjallisuudesta löytyviin vertailukäyriin. Tutkimalla materiaalille ominaisia sulamis-, kiteytymis- ja lasisiirtymäpisteitä voidaan saada selville, mitä tutkittava materiaali on.

5.3 Määrityksen analyysit

DSC-laitteistolla tutkittiin juutti, polyesteri sekä polyamidi. Kustakin näytteestä tutkittiin myös rinnakkaisnäyte. Suositusmäärä tutkittavaa näytettä on noin 10–20 mg, mutta näytteiden vähäisen massan ja suuren tilavuuden takia näytteitä ei saatu upokkaaseen mahtumaan kuin noin 5 mg. Tämä ei kuitenkaan vaikuta näytteessä ilmeneviin muutoksiin vaan piikkien korkeuteen, joka ei ole tässä tutkimuksessa olennaista. Polyamidin sekä polyesterin ajot suoritettiin ilman typpivirtausta. Juuttia tutkittaessa typpivirtaus oli kuitenkin käytössä, jottei näyte syttyisi palamaan. Laitteen toimintahäiriön takia ei lämpötila näytteen ajon jälkeen laskenut enää takaisin alkulämpötilaan, joten seuraava

ajo jouduttiin aloittamaan aina muutaman asteen korkeammalta. Tämä ei kuitenkaan vaikuttanut tuloksiin.

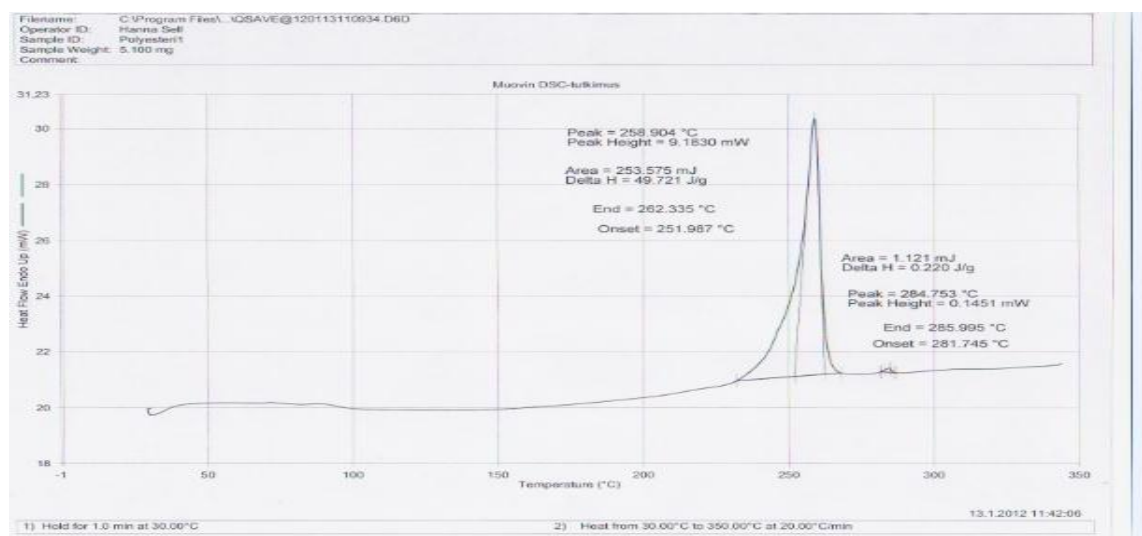
Taulukko 6. DSC-mittauksissa tapahtuneet entalpiamuutokset.

Materiaali	Massa (mg)	Lämpötiloja (°C)		Sulamispiste T _m
		Aloitustempötila	Kiteytymislämpötila T _c	
Polyesteri 1	5,1	30	-	258,9
Polyesteri 2	5,1	36	-	259,8
Polyamidi 1	5,4	39	210,1	223,2
Polyamidi 2	5,8	41	210,8	222,8
Juutti 1	5,6	20	-	97,7
Juutti 2	5,7	30	-	99

Taulukossa 6 on esitetty yhteenveto DSC-laitteistolla suoritettujen mittausten tuloksista.

5.3.1 Polyesteri

Pannuun punnittiin polyesteriä 5,1 mg molempiin määrityksiin. DSC-laitteistolla suoritettu ajo aloitettiin pitämällä lämpötila 1 minuutin ajan 30 °C:ssa, jonka jälkeen lämpötilaa nostettiin 20 °C/min aina 350 °C:seen asti. Rinnakkaisnäytteen ajo aloitettiin 36 °C:ssa.



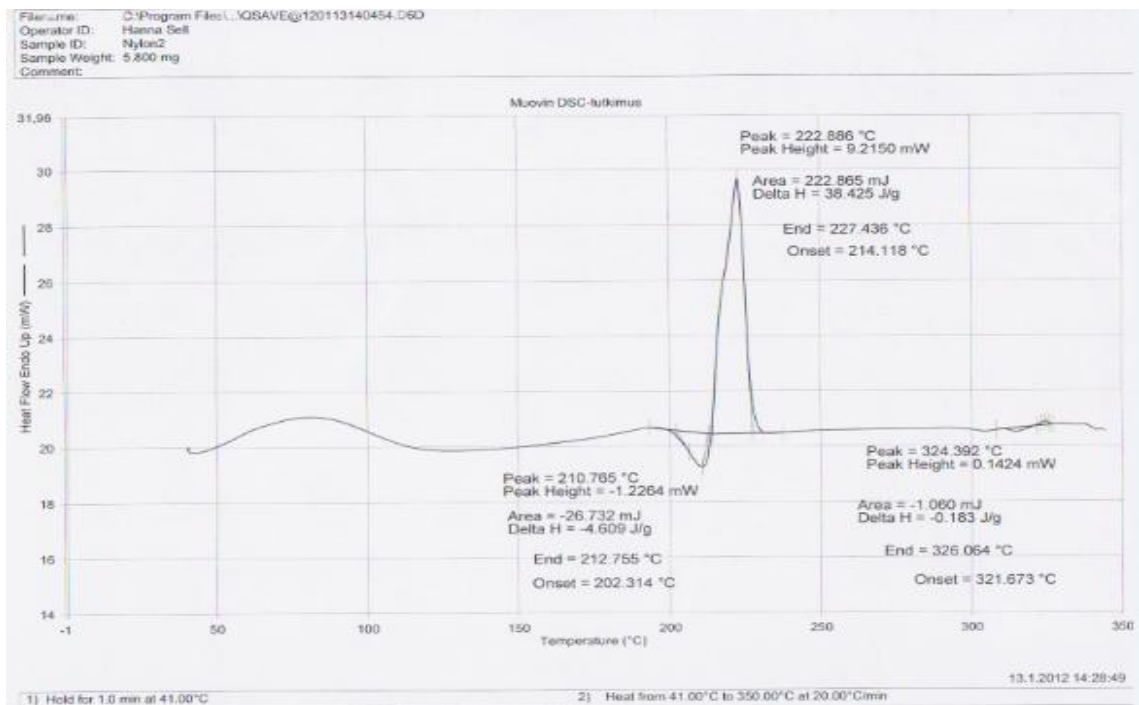
Kuva 9. Polyesterin DSC-kuvaaja.

DSC-kuvaajan y-akseli ilmoittaa endotermisen tapahtuman ylöspäin kulkevana käyränä. Polyesterillä tapahtuu sulaminen 252–262 °C lämpötilassa.

Sulamislämpötilan perusteella etsittiin vertailukelpoinen kuvaaja kirjallisuudesta. Liitteen 2 sivulla 1 on nähtävissä tutkittavalle materiaalille kirjallisuuden vertailukuvaaja. Kirjallisuuden DSC-kuvaajassa näkyy PET:n (polyetyleenitereftalaatin) muodostama kuvaaja, jossa sen sulamislämpötila on 254 °C. Tutkittavan materiaalin sulaminen tapahtuu 258 °C lämpötilassa, josta voidaan päätellä, että kyseessä on PET.

5.3.2 Polyamidi

Pannuun punnittiin 5,4 mg polyamidia ja rinnakkaisnäytettä varten 5,8 mg. Ajo lähdettiin suorittamaan pitämällä lämpötilaa aluksi 1 minuutin ajan 39 °C:ssa, jonka jälkeen lämpötilaa nostettiin 20 °C/min aina 350 °C:seen asti. Rinnakkaisnäytteen ajo aloitettiin 41 °C:ssa.



Kuva 10. Polyamidin DSC-kuvaaja.

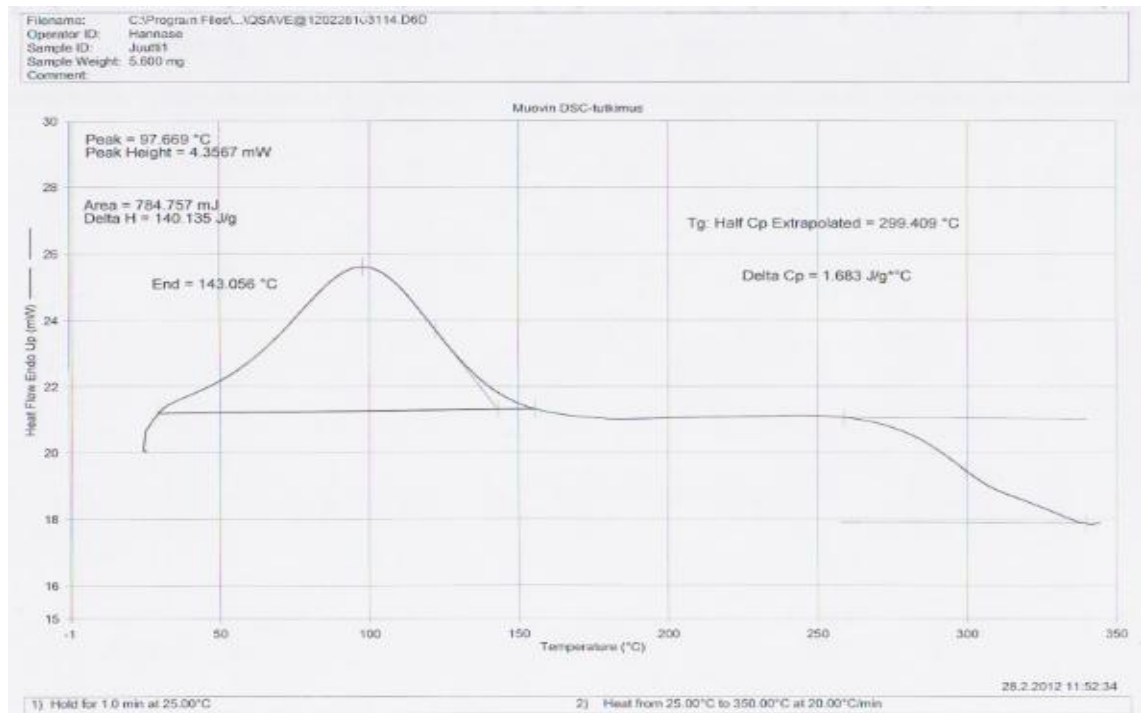
DSC-kuvaajan y-akseli ilmoittaa endotermisen tapahtuman ylöspäin kulkevana käyränä.

Polyamidilla alkaa höyrystymislämpötilassa 50–110 °C tapahtua hajoamista. Lämpötilassa 202–212 °C alkaa polyamidi kiteytyä kunnes lämpötila-alueella 214–227 °C se sulaa. Lämmityksen loppuvaiheessa 321–326 °C:ssa tapahtuu pientä uudelleenkiteytymistä ja sulamista.

Polyamidin DSC-kuvaajaa verrattaessa kirjallisuuden lähteisiin käy ilmi, ettei täysin vastaavaa vertailukohdetta löydy. Liitteen 2 sivulla 2 on näkyvissä polyamidi 6:n kirjallisuudesta löytynyt kuvaaja. Kuvaajia tarkasteltaessa voidaan huomata materiaalin olevan pääasiassa polyamidi 6:ta. Polyamidi 6:n sulaminen tapahtuu noin lämpötilassa 223 °C. Tämä ei pelkästään riitä toteamaan polyamidin olevan kyseistä materiaalia vaan on syytä lähteä tutkimaan muita polyamideja. Polyamidi 6,6:lle on tyypillistä noin 260 °C:ssa tapahtuva sulaminen. Tämä voidaan huomata tutkittavan materiaalin kuvaajaan loppupuolella tapahtuvasta uudelleen sulamisesta. Johtopäätöksenä voidaan siis todeta tutkittavan materiaalin sisältävän pääasiassa polyamidi 6:ta ja myös hieman polyamidi 6,6:sta. [17]

5.3.3 Juutti

Pannuun punnittiin juuttia 5,6 mg ja rinnakkaisnäytettä varten 5,7 mg. Juutin DSC-ajo aloitettiin pitämällä lähtölämpötila 1 minuutin ajan 25 °C:ssa, jonka jälkeen lämpötilaa nostettiin 20 °C/min aina 350 °C:seen asti. Rinnakkaisnäytteen ajon lähtölämpötila oli 30 °C.



Kuva 11. Juuttinäytteen DSC-kuvaaja.

DSC-kuvaajan y-akseli ilmoittaa endotermisen reaktion ylöspäin kulkevana käyränä. Juuttikuitu alkaa jo alhaisissa lämpötiloissa hajota. Hajoaminen tapahtuu lämpötila-alueella 35–145 °C, ja huippunsa se saavuttaa n. 98 °C. Lämmityksen lopussa (alkaen 260 °C:ssa) on nähtävissä selvä tason muutos. Kyseessä ei kuitenkaan ole lasisiirtymä-piste, koska kuvaaja esittää endotermisen reaktion ylöspäin menevällä käyrällä.

Liitteessä 2 sivulla 3 on nähtävissä kirjallisuudesta löytyvän juutin DSC-kuvaaja. Kirjalli-suudesta löytyneen juutin DSC-määrittys on tehty 500 °C:ssa, kun tässä työssä se mää-ritettiin 350 °C:ssa. Tämä ei kuitenkaan vaikuta tulosten tulkittamiseen, sillä juutin kuumennuksessa tapahtui sille ominaisia muutoksia alle 350 °C:n lämpötilassa. Kun verrataan näitä kahta kuvaajaa, voidaan huomata niiden olevan lähes identti-set. Yrityksen käyttämässä juuttimateriaalissa epäpuhtaudet olisivat ilmenneet kuvaaji-en eroavaisuudessa. Kirjallisuuden kuvaaja on käsittelemätöntä juuttia, joten DSC-kokeen perusteella pystytään tekemään johtopäätös, ettei juuttikuitu sisällä epäpuhta-uksia.

6 Polttokokeet

6.1 Analyysin tarkoitus

Tässä insinööriyössä haluttiin tutkia materiaalien puhtautta, ja polttokokeen tarkoituksena olikin selvittää yksittäisten materiaalien käyttäytyminen sitä poltettaessa. Komponenttien eli useammasta materiaalista koostuvan narun polttaminen voi piilottaa hajuja, jotka voivat liittyä materiaalien valmistuksessa käytettäviin epäpuhtauksiin, eikä siitä saa tarkkaa tietoa tuotteiden palamisesta. Polttokokeen avulla pystytään tutkimaan yksittäisen materiaalien synnyttämiä tunnusomaisia hajuja ja materiaalin käyttäytymistä sen palaessa. Polttokoe suoritettiin bunsenlampulla.

6.2 Analyysin tulokset

6.2.1 Polyesteri

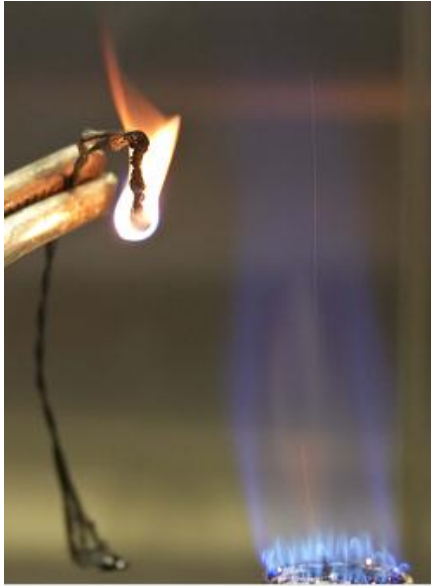


Kuva 12. Polyesterin palaminen.

Polyesteri on kuitumainen materiaali, joka sulii liekin kosketuksesta ja muuttui polyesterille tunnusomaiseksi paakuksi. Polyesterin ei kuuluisi sellaisenaan syttyä herkästi palamaan, sillä se sulaa kuumuuden vaikutuksesta ja siten pyrkii nopeasti pois sytytlähteestä. Ollessaan kosketuksessa liekin kanssa polyesteri kuitenkin syttyi palamaan melko nopeasti. Väriaineet ja muovien ominaiset lisä- ja viimeistelyaineet voivat häiritä

materiaalin sulamismekanismia nopeuttaen materiaalin syttymistä. Ohuet materiaalit saavuttavat kuitenkin nopeammin syttymislämpötilan. Jäähtyessään polyesteri muuttui kovaksi paakuksi. Haju oli mieto, eikä siitä ilmennyt tunnistettavissa olevia muita aromeja. [22]

6.2.2 Polyamidi



Kuva 13. Polyamidin palaminen.

Kuitumainen polyamidi syttyi palamaan polyesteriin verrattuna huonommin. Polyesterille ja polyamidille on tunnusomaista sulaminen kuumuuden vaikutuksesta sekä materiaalien pyrkimys pois syttymislähteestä. Polyamidi syttyi palamaan, kun se oli ollut liekin kanssa kosketuksessa noin 2-3 sekuntia. Tämä johtuu polyamidin suuresta sulamis- ja syttymislämpötilojen erosta. Polyamidi sulii yhdeksi paakuksi, joka oli hyvin venyvää lämpimänä. Haju oli mieto, eikä siinä ollut tunnistettavissa olevia muita aromeja. [22]

6.2.3 Juutti



Kuva 14. Juutin palaminen

Juutti on pääasiassa selluloosakuitua, joka syttyy helposti palamaan. Se ei sula liekin kosketuksesta vaan palaa kuiduille ominaisesti hiiltyen. Juuttikuitu on ohutta narua, joka syttyi erittäin helposti palamaan eikä pelkkä puhaltaminen riittänyt palamisen sammuttamiseen. Juutin haju palaessa oli odotetusti puumainen.

7 Juutin tutkiminen mikroskoopilla

7.1 Analyysin tarkoitus

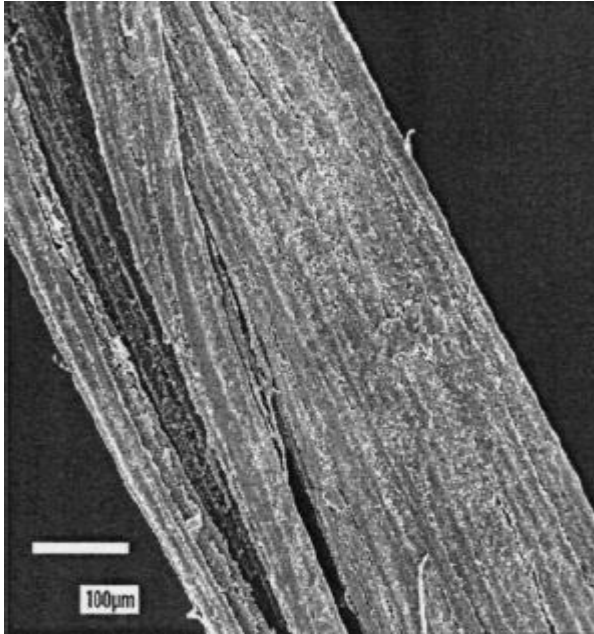
Juutin mikroskooppisen tutkimuksen tarkoituksena oli selvittää juutin pintarakenne. Käytetty mikroskooppi suurensi kohteen 10–63-kertaiseksi. Kuidun sisärakennetta ei kuitenkaan päästä tutkimaan, mutta mikroskoopilla nähdään paremmin kuidun pintarakenne. Kuitumateriaalin tulisi olla koostumukseltaan tasainen.

7.2 Tulokset



Kuva 15. Mikroskooppikuva juutista.

Kuvassa 15 on mikroskooppikuva tutkittavasta juutista. Käytetyllä mikroskoopilla ei saanut tarkempaa lähikuvaa, mutta tämäkin tarkkuus riittää. Juuttikuitu koostuu useista pienemmistä kuiduista, jotka ovat hyvin tasalaatuisia. Kirjallisuuden mikroskooppikuva juutista on esitetty kuvassa 16. Kirjallisuuden kuva juutista on otettu hieman tarkemmalla optiikalla, mutta verrattuna tutkittavaan juuttikuituun on huomattavissa molemmissa tasainen sekä hieman kiiltävä pinta. Laatu oli tasaista ja yhdenmukaista.



Kuva 16. Mikroskooppikuva käsittelemättömästä juutista. [13]

Kuva 16 on Wileyn Online Librarysta löydetty mikroskooppikuva käsittelemättömästä juutista.

8 Savukaasujen analysointi GC-MS-TD-laitteistolla

8.1 GC-MS-TD-menetelmä

GC-MS-TD on kaasukromatografi varustettuna massaselektiivisellä detektorilla. Kromatografiin yhdistetty massaspektrometri on niin sanottu kvadrupolianalysaattoriin perustuva massaspektrometri. Näytteensyöttöinjektiotekniikka perustuu termodesorptioon, jolla määritetään VOC-yhdisteitä. Termodesorption huonoihin puoliin lukeutuu se, että samaa näytettä ei voida tutkia uudelleen. Ellei näytteen analysoinnissa käytetä jako-optiota, näyte menetetään kerralla. [15; 16]

Ilmanäytteet kerätään imupumpun avulla adsorbenteilla täytettyihin Tenax-putkiin. Näytekaasu kulkee kuumennetun liitäntäyksikön läpi elektronipommitus-ionisaatiokammioon, jossa syntyviä ioneja kiihdytetään sopivalla jännitteellä ennen niiden joutumista kvadrupolianalysaattoriin. Kvadrupolianalysaattori koostuu neljästä samansuuntaisesta metallisauvasta. Metallisauvojen välille muodostunut sähkökenttä muuttaa ionien kuluradan niiden kulkiessa ionidetektoria kohti siten, että tietyillä jännitearvoilla vain tie-

tyn massan omaavat ionit voivat päästä detektorille. Ionit, jotka eivät päässeet detektorille, törmäävät kvadrupolianaalysaattorin metallisauvoihin eikä niitä havaita. [16]

8.2 Analyysin tarkoitus

Savukaasujen analysoinnin tarkoituksena oli saada selville polyesteristä, polyamidista ja juuttikuidusta kudotun narun polttoleikkauksen yhteydessä syntyvät savukaasut. Polttoleikkurin välittömässä läheisyydessä (noin 10 cm:n päässä) on kohdeimuri, joka poistaa savukaasuja hengitysilmosta, mutta sen 100-prosenttisesta imutehosta ei ollut tietoa. Materiaaleista syntyvien savukaasujen koostumusta ei tiedetty, joten työntekijöille vaarattoman hengitysilman takaamiseksi savukaasujen analysointi on tarpeen. Ensimmäinen savukaasujen analysointi suoritettiin laboratorio-olosuhteissa, sillä näytteet saatiin analysoidua heti. Savukaasunäytteitä otettiin myös yrityksen tiloissa. Yrityksen tiloissa (InSitu) otetuilla savukaasunäytteillä oli tarkoitus selvittää todellisten työskentelyolosuhteiden vallitessa syntyvät savukaasut.

8.3 GC-MS-TD:n analysointi

Näytteet analysoitiin GC-MS-TD-laitteistolla.

Taulukko 7. Näytteensyöttö

Esihuuhdeltu	1 min
Tenax-putken desorptio	10 min 300 °C
Trapin desorptio	20–300 °C; pidetään 3 min 300 °C

Taulussa 7 on esitetty näytteiden ajo-olosuhteet näytteen syötössä.

Taulukko 8. Laitteiston ajo-olosuhteet

Kolonne	HP-5MS 0,25 ml * 29,9 m *0,25µm
Uuni	Alkulämpötila 50 °C; Nopeus 10 °C/min; pidetään 5 min loppulämpötilassa 250 °C
Kantokaasu	Helium
Kantokaasun sisääntulo	Kokonaisvirtaus 45 mm/min; paine 28,9 psi

Taulukossa 8 on esitetty laitteiston asetukset näytteenajossa.

8.4 Laboratorio-olosuhteissa otetut termodesorptionäytteet

Savukaasujen analysointi aloitettiin tutkimalla niitä laboratoriossa. Savukaasuja tutkittiin komponenteista (polyesteristä, polyamidista ja juuttikuidusta) koostuvasta paksummasta narusta ja polyesterinarusta. Pyrin saamaan aluksi selville leikkuuterän lämpötilan merkityksen palamistuotteisiin. Leikkuria ei kuitenkaan yrityksessä käytetä puoliteholla, mutta puoliteholla mittaamisen tarkoituksena oli huomioida se, että työt aloitettaisiin liian aikaisin, eikä leikkurin terä ole ehtinyt vielä kuumentua tarpeeksi. Näin ollen voidaan aluksi tehdä oletus, että tuote palaisi epätäydellisesti, jonka seurauksena voi syntyä erilaisia savukaasuja kuin korkeammassa lämpötilassa. Tästä syystä kokeiltiin leikkuria kahdella eri lämpötilalla. Analyysit aloitettiin leikkurin puoliteholla, jolloin lämpötila vaihteli noin 340 °C:n ja 360 °C:n välillä. Toinen näytteenotto suoritettiin kuumemmalla terällä, jolloin terän lämpötila vaihteli noin 460 °C:n ja 480 °C:n välillä. Näytteenoton ajan materiaalia poltettiin yhtäjaksoisesti terää vasten. Savukaasut imettiin Tenax-putkeen noin 5 cm etäisyydeltä leikkurin terästä 1 minuutin ajan.

Taulukko 9. Laboratorio-olosuhteissa otetut näytteet.

Määrittäminen	Tenaxin koodi	Näyte	Leikkurinterän lämpötila (°C)	Imetty tilavuusvirta (l/min)
1	Mi 059782	PETmin	340–360	2
2	Mi 034850	KomPakTmin	340–360	2
3	Mi059768	PETmax	460–480	2
4	Mi059770	KomPakTmax	460–480	2

PETmin Polyesterinaru, jolloin lämpötila alhaisin

KompakTmin Komponenteista koostuva paksumpi naru, jolloin lämpötila alhaisin

PETmax Polyesterinaru, jolloin lämpötila suurin mahdollinen

KomPakTmax Komponenteista koostuva paksumpi naru, jolloin lämpötila suurin mahdollinen.

8.4.1 Tulokset

Näytteenotto ja ajot suoritettiin saman päivän aikana. Yhden näytteen ajo kesti 45 minuuttia. Liitteestä 4 löytyy kromatogrammit OffSitu-näytteenotosta.

Taulukko 10. Laboratorio-olosuhteissa kerättyjen savukaasunäytteiden tulokset.[23]

Näyte	Näytteenotto	Yhdiste	HTP-arvot mg/m ³
PETmin	noin 5 cm leikkurinterästä	Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-dophenyl-	-
KomPakTmin	noin 5 cm leikkurinterästä	Heptadecane	-
		Hexadecane	1100
		Nonadecane	1100
		2-furancarboxaldehyde,5-(hydroxymethyl)-	-
		Caprolactam	-
PETmax	noin 5 cm leikkurinterästä	Acetophenone	25
		1,2-Propanedione, 1-phenyl-	-
		Ethylbenzene	220
KomPakTmax	noin 5 cm leikkurinterästä	[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	-
		2-furancarboxaldehyde,5-(hydroxymethyl)-	-
		Caprolactam	-

Taulukossa 10 on esitetty laboratorio-olosuhteissa otettujen savukaasunäytteiden VOC-yhdisteet. Haitalliseksi tunnetut pitoisuudet eli HTP-arvot ovat näkyvissä niiden yhdisteiden kohdalla, joilla sellainen raja-arvo löytyi.

8.4.2 Tulosten tulkinta

Hexadecane ja nonadecane ovat yhdisteitä, joita syntyy muun muassa kumin valmistuksessa. Ne ovat biohajoavia, joten ne eivät ole ympäristöä kuormittavia tekijöitä. Toistuva altistuminen johtaa ihon kuivumiseen. Asetofenonia käytetään liuottimena muovien valmistamisessa. Altistuminen asetofenonille aiheuttaa silmien ja limakalvojen ärsytystä. Sen haitallisuus on kuitenkin lievää ihmiselle ja asetofenonin ollessa biohajoavaa se ei myöskään kuormita ympäristöä. Etylibentseeniä käytetään muovimateri-

aalien valmistuksessa. Sen haittavaikutuksia ovat ihon, silmien ja hengitysteiden ärsyntyminen. Toistuva ihokosketus etyylibentseeniin voi aiheuttaa ihotulehduksen. [26; 27]

Laboratorio-olosuhteissa tehtyjen mittauksien tavoitteena oli selvittää leikkurin terän lämpötilan vaikutus syntyviin VOC-yhdisteisiin. Erot alhaisemmalla ja korkeammalla terän lämpötilalla ovat selkeät. Verrattaessa saman materiaalin polttoleikkausta eri terän lämpötilassa voidaan huomata vaihtelua savukaasujen koostumuksessa. Passiivinäytteiden tuloksissa ei ilmennyt selkeitä vaikutuksia leikkurin terän lämpötilassa, joten tästä syystä ei voi varmuudella sanoa terän lämpötilalla olevan vaikutusta savukaasujen muodostumisen.

8.5 InSitu-näytteenotto

Savukaasujen määrittäminen tehtiin yrityksessä normaaleissa työskentelyolosuhteissa. Savukaasut määritettiin komponenteista koostuvasta paksummasta narusta, komponenteista koostuvasta ohuemmasta narusta sekä polyesterinarusta. Yrityksellä on kaksi polttoleikkauspistettä, leikkuri 1 ja leikkuri 2. Haluttiin selvittää näiden leikkureiden muodostamat savukaasut, joten savukaasut analysoitiin molemmille leikkureille. Näytteitä otettiin yhteensä 6 kappaletta. Tässä tapauksessa haluttiin nimenomaan saada selville savukaasujen koostumus, joten näyte otettiin leikkurin ja kohdeimurin välistä suoraan savukaasuista. Leikkurin lämpötila oli kaikissa kokeissa sama.

Taulukko 11. Yrityksessä otetut näytteet.

Määrittäminen	Tenaxin koodi	Näyte	Leikkurinterän lämpötila (°C)	Imetty tilavuusvirta (l/min)
1	Mi 059770	KomOhutLeik2	460–480	2
2	Mi 059782	KomPakLeik2	460–480	2
3	Mi 059786	PELeik2	460–480	2
4	Mi 059767	KomOhutLeik1	460–480	2
5	Mi 058984	KomPakLeik1	460–480	2
6	Mi 059768	PELeik1	460–480	2

KomOhutLeik2	Komponenteista koostuva ohuempi naru. Leikkuri 2:lla otettu näyte.
KomPakLeik2	Komponenteista koostuva paksumpi naru. Leikkuri 2:lla otettu näyte.
PELeik2	Polyesterinaru. Leikkuri 2:lla otettu näyte.
KomOhutLeik1	Komponenteista koostuva ohuempi naru. Leikkuri 1:llä otettu näyte.
KomPakLeik1	Komponenteista koostuva paksumpi naru. Leikkuri 1:llä otettu näyte.
PELeik1	Polyesterinaru. Leikkuri 1:llä otettu näyte.

8.5.1 Tulokset

Näytteenotto ja ajot suoritettiin samana päivänä. Yhden näytteen ajo kesti 45 minuuttia. Liitteestä 5 löytyy kromatogrammit InSitu-näytteenotosta.

Taulukko 12. Taulukossa on esitetty yrityksessä kerättyjen savukaasunäytteiden tulokset.

Näyte	Näytteenotto	Yhdiste	HTP-arvot (mg/m ³)
KomOhut Leik2	noin 5 cm leikkurinterästä	[1,1':3',1"-Terphenyl]-2'-ol	-
		Acetophenone	25
		Benzaldehyde	4,4
		Benzoyl bromide	-
		Triacetin	-
KomPak Leik2	noin 5 cm leikkurinterästä	Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-dophenyl-	-
		[1,1':3',1"-Terphenyl]-2'-ol	-
		2-furancarboxaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-	-
PELeik2	noin 5 cm leikkurinterästä	1,2-Propanedione, 1-phenyl-	-
		1,3,5,7-cyclooctatetraene	-
		[1,1':3',1"-Terphenyl]-2'-ol	-
		Acetophenone	25
KomOhut Leik1	noin 5 cm leikkurinterästä	Benzoic acid, butyl ester	-
		Phthalic acid, allyl ethyl ester	-
KomPak Leik1	noin 5 cm leikkurinterästä	[1,1':3',1"-Terphenyl]-4'-ol	-
		Caprolactam	-
		Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	-
		Cyclotrisiloxane, octamethyl-	-
PELeik1	noin 5 cm leikkurinterästä	Styrene	86
		Acetophenone	25
		Benzoic acid, butyl ester	-

Taulukossa 12 on esitetty yrityksessä otettujen savukaasunäytteiden VOC-yhdisteet. HTP-arvot ovat näkyvissä niiden yhdisteiden kohdalla, joille sellainen raja-arvo kirjallisuudesta löytyi.

8.5.2 Tulosten tulkinta

Asetonfenoni ärsyttää silmiä ja limakalvoja. Bentsaldehydi puolestaan aiheuttaa silmien ja ihon ärsytystä. Styreeniä käytetään muun muassa tyydyttymättömiä sidoksia sisältävien muovien valmistuksessa. Aine ärsyttää silmiä, ihoa ja hengitysteitä. Caprolactamilla ei ole haitalliseksi tunnettua pitoisuutta, mutta se on ärsyttävää ja lievästi myrkyllistä ainetta. Caprolactamia käytetään polyamidi 6:n valmistuksessa. [27; 28]

8.6 Passiivinäytteenotto yrityksessä

Tenax-putket jätettiin yritykseen 7 päivän ajaksi keräämään passiivinäytteitä. Tenax-putket sijoitettiin polttoleikkauspöytä 1:n välittömään läheisyyteen sekä hieman etäämmälle, jotta saataisiin tietoa savukaasujen leviämisestä työympäristössä. Passiivinäytteenottoa varten sijoitettiin Tenax-putkia yhteensä kolmeen eri kohtaan. Jokaiseen näytteenottopisteeseen sijoitettiin kaksi Tenax-putkea, jotta saatiin rinnakkaisnäytteet.

Taulukko 13. Passiivinäytteiden otto.

Määrittäminen	Tenax-putken koodi	Näyte
1	Mi 059785	Passiivinäyte1.1
2	Mi 034849	Passiivinäyte1.2
3	Mi 058988	Passiivinäyte2.1
4	Mi 058987	Passiivinäyte2.2
5	Mi 034850	Passiivinäyte3.1
6	Mi059765	Passiivinäyte3.2

Passiivinäyte1.1 ja passiivinäyte1.2 sijoitettiin noin 50 cm:n etäisyydelle leikkuri 1:stä 170 cm:n korkeuteen. Passiivinäyte2.1 ja passiivinäyte2.2 sijoitettiin 6 m:n etäisyydelle leikkuri 1:stä 160 cm:n korkeuteen. Passiivinäyte3.1 ja passiivinäyte3.2 sijoitettiin 9 m:n etäisyydelle leikkuri 1:stä 150 cm:n korkeuteen.

8.6.1 Tulokset

Passiivinäytteet analysoitiin seitsemäntenä päivänä GC-MS-TD:lla. Passiivinäytteiden kromatogrammit löytyvät liitteestä 6.

Taulukko 14. Passiivinäytteistä löydetty yhdisteet.

Näyte	Yhdiste	HTP-arvot
Passiivinäyte1.1	[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	-
	Octadecane	1100
	Pyridine,3-(1-methyl-2 pyridinyl)-, (Si)-	1
	Benzyl Alcohol	-
Passiivinäyte1.2	Acetophenone	25
	[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	1
Passiivinäyte2.1	Benzene, 1,2-dimethyl	440
Passiivinäyte2.2	-	-
Passiivinäyte3.1	2,5-cyclohexadien-1,-one, 4,4-diphenyl-	-
	Benzene, 1,3-dimethyl	440
	Acetophenone	25
Passiivinäyte3.2	2,5-cyclohexadien-1,-one, 4,4-diphenyl-	-
	cyclotrisiloxane, hexamethyl	-
	Benzaldehyde	4,4
	Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-dophenyl-	-

Taulukossa 14 on esitetty yrityksessä otettujen passiivinäytteiden VOC-yhdisteet. HTP-arvot ovat näkyvissä niiden yhdisteiden kohdalla, joille sellainen raja-arvo kirjallisuudesta löytyi.

8.6.2 Tulosten tulkinta

Passiivinäytteet analysoitiin kvalitatiivisesti, joten niistä ei määritetty pitoisuutta. Kvantitatiivisen (määrällisen) analyysin suorittamiseksi pitäisi olla tiedossa Tenax-putkeen imetyksen näytteen tilavuus. Passiivinäytteiden keruuputket olivat 7 päivän ajan huoneilmassa, joten kertyneen ilman tilavuutta ei tiedetty. Passiivinäytteiden osalta voitiin kuitenkin todeta, mitä yhdisteitä näytteistä löytyi.

Passiivinäytteiden tarkoituksena oli saada selville kohdeimureiden riittävä tehokkuus. Näytteistä löytyi samoja yhdisteitä kuin suoraan savukaasuista otetuista aktiivinäytteistä. Tämä tarkoittaa sitä, että kohdeimureiden teho ei ole 100-prosenttinen. Analyysien perusteella näyttää siltä, että tunnistettujen yhdisteiden pitoisuudet ovat hyvin pieniä, joten jatkotoimenpiteitä ei tarvitse tehdä savukaasujen poistamiseksi.

8.7 VOC-yhdisteiden vaarallisuusluokitus

Savukaasuissa oli muutamia yhdisteitä, joiden alkuperä ei todennäköisesti ole peräisin polttoleikkavista materiaaleista. Tällaiset yhdisteet on jätetty pois tulosten tarkastelusta. Esimerkiksi p-xyleenin esiintyminen tuloksissa johtui muovisista Tenax-putkien tulpista.

Taulukko 15. Materiaalien polttoleikkauksessa muodostuneiden savukaasujen sisältämien yhdisteiden vaarallisuusluokitukset.

Yhdiste	Vaarallisuusmerkintä	R-lauseet	S-lauseet
[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	Xi	36/37/38	26-36-37/39
1,2-Propanedione, 1-phenyl-	Xn, Xi	22-36/37/38	26-36
1,3,5,7-cyclooctatetraene	Xn, Xi	10-36/37/38-65	26-62
2-furancarboxaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-		36/37/38-52/53	26-36-24/25
Acetophenone	Xn, T, F	22-36-63-43- 36/37/38-23/24/25- 45-39/23/24/25-11	26-36/37-24/25- 23-53-45-16-7
Benzaldehyde	Xn	22	24
Ksyleeni (Benzene, 1,2-dimethyl- ja Benzene, 1,3-dimethyl-)	Xn, T, F	10-20/21-38- 39/23/24/25- 23/24/25-11-36/38	25-45-36/37-16-7
Benzoic acid, butyl ester	Xn, Xi	22-36/37/38	26-36
Benzoyl bromide	C	14-34-36/37	26-36/37/39-45
Benzyl alcohol	Xn, T	20/22-63-43- 36/37/38-	26-36/37-24/25- 23-53

		23/24/25-45-40	
Caprolactam	Xn	20/22-36/37/38	2
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	F, Xi	11-36/37/38	26
Ethylbenzene	F+,Xn,Xi,F, T	12-19-22-66-67-20- 11-48/20/22-40-38- 36/37/38-23/24/25- 46-45-39/23/24/25- 23/25	9-16-29-33- 24/25-36/37-36- 45-36/37/39- 26-23-53-7-24
Heptadecane	Xn, Xi	65-36/37/38	62-36-26
Hexadecane	Xi	38	23-24/25
Nonadecane	Xn,C,F	66-65-34-11	22-24/25-45- 36/37/39-26-16
Octadecane	Xi	36/37/38	26-36
Styrene		10-20-36/38	(2-)-23
Triacetin			23-24/25

Taulukossa 15 on esitetty polttoleikkauksessa muodostuneiden savukaasujen sisältämien yhdisteiden vaarallisuusmerkinnät sekä R- ja S-lausekkeet. R-lausekkeet ovat yhdisteiden vaaraa osoittavia standardilausekkeita ja S-lausekkeet ovat yhdisteiden turvallisuustoimenpiteitä osoittavia standardilausekkeita. Näiden merkintöjen selostukset löytyvät liitteestä 3.

Löydetyt yhdisteet ovat pääsääntöisesti ihoa, silmiä ja hengitysteitä ärsyttäviä aineita, joiden haittavaikutuksina ovat ihon kuivuminen, ihottumat, silmien kirvely, huimaus sekä päänsärky. Varotoimenpiteenä on suositeltavaa käyttää suojakäsineitä. Kohdeimurin ollessa poissa päältä on suositeltavaa käyttää suojalaseja sekä hengityssuojainta.

9 Yhteenveto

Tässä insinööriyössä tutkittiin polyesteriä, polyamidia ja juuttia sekä niistä koostuvien komponenttien savukaasujen koostumuksia. Materiaalien koostumuksen selvittämiseksi käytettiin FTIR- ja DSC-laitteistoja. Polttokokeen ja juutin erillisen mikroskoopilla suoritettavan tutkimuksen tarkoituksena oli varmentaa FTIR- ja DSC-laitteistoilla saatuja

tuloksia. VOC-yhdisteiden analysoinnissa käytettiin GC-MS-TD-laitteistoa. Menetelmät olivat sopivia ja saadut tulokset tukivat toinen toisiaan.

Käytetyt menetelmät soveltuivat polyesterin tunnistamiseen, sillä niiden avulla pystyttiin osoittamaan polyesterin olevan polyetyleenitereftalaattia (PET). PET:n sulamislämpötila-alueen määrittäminen DSC:llä osoitti myös sen, että materiaalin valmistuksessa ei ole käytetty ainakaan suurempia määriä lisä- tai apuaineita, sillä ne olisi havaittu sulamislämpötila-alueen eroavaisuutena kirjallisuusrvoon verrattaessa. Polttokokeen avulla saatiin tietoa polyesterin käyttäytymisestä sitä poltettaessa, eikä kokeen tuloksissa ollut poikkeavuuksia PET:n tunnusomaiselle palamiselle.

Polyamidin absorptiopiikkejä tutkimalla pystyttiin osoittamaan tutkittava materiaali polyamidi 6:ksi, joka sisältää hieman polyamidi 6,6:ta. Polyamidin DSC-laitteistolla suoritettut tutkimukset tukevat tätä päätelmää, sillä sulamislämpötilan avulla huomattiin materiaalissa polyamidi 6:n ja polyamidi 6,6:n tunnusomaisia eksotermisiä sekä endotermisiä tapahtumia. Polttokokeen avulla tehdyt tutkimukset olivat ominaisia polyamidille, joten tämäkin koe tukee FTIR- sekä DSC-kokeiden tuloksia. Materiaalin voidaan varmuudella sanoa olevan polyamidi 6:sta, joka sisältää hieman polyamidi 6,6:sta.

FTIR:n ja DSC:n avulla pystyttiin osoittamaan tutkittava materiaali juutiksi. DSC-menetelmällä suoritettujen tutkimusten avulla pystyttiin myös osoittamaan, ettei juutti sisällä epäpuhtauksia. Polttokokeen avulla tehtyjen havaintojen perusteella ei materiaalissa ollut kuiduille poikkeavia piirteitä. Mikroskoopilla suoritettujen tutkimusten tarkoituksena oli tarkastella juuttikuidun pintarakennetta tarkemmin. Juuttikuidun kuiturakenteessa ei havaittu poikkeavuuksia verrattaessa tuloksia kirjallisuudesta löydettyihin tuloksiin.

Komponenteista muodostuvan narun ja polyesterinarun polttoleikkauksessa syntyviä savukaasuja analysoitiin laboratorio-olosuhteissa, yrityksessä otetuilla savukaasunäytteillä ja passiivinäytteillä. Laboratorio-olosuhteissa tehdyllä näytteenotolla vertailtiin leikkurin terän lämpötilan vaikutusta syntyviin VOC-yhdisteisiin. Leikkurin terän lämpötilan muutoksella ei ollut suurta vaikutusta syntyviin savukaasuihin. Yrityksessä otetuilla näytteillä pyrittiin saamaan tietoa savukaasujen VOC-yhdisteistä. Passiivinäytteiden tarkoituksena oli saada tietoa savukaasujen leviämisestä työympäristössä. Passiivinäyt-

teistä löytyi hyvin vähän savukaasunäytteiden kanssa yhtäläisiä yhdisteitä, joten on syytä uskoa, että kohdeimurit polttoleikkureiden yläpuolella ovat riittävän tehokkaita.

VOC-yhdisteiden pitoisuudet olivat suuria sekä OffSitu- että InSitu-näytteenotoissa. Tämä johtuu siitä, että näytteet otettiin suoraan savukaasuista. HTP-arvoja ei ollut kirjallisuudesta saatavilla kaikille löydetyille yhdisteille. Tämä ei välttämättä tarkoita sitä, ettei yhdisteistä olisi terveydelle tai ympäristölle vaaraa, mutta niillä ei ainakaan toistaiseksi ole havaittu olevan haittavaikutuksia. HTP-arvot on esitetty pitkäaikaisaltistumiselle 8 tunnin aikana.

Savukaasuista löydetty yhdisteet ovat haitallisia ihmiselle, joten työntekijöiden tulisi kiinnittää huomiota oman työturvallisuutensa parantamiseen. Keinoja välttää pitkäaikaisen altistumisen riskejä ovat suojakäsineiden käyttö sekä tilanteen vaatiessa suojalasien ja hengityssuojaimen käyttö. Savukaasut voivat aiheuttaa suoraan hengitettynä päänsärkyä tai huimausta, joten työntekijöiden tulisi välttää työskentelyä, jos kohdeimurit ovat pois päältä. Lyhytaikaisia haittavaikutuksia ovat ihoa, silmiä ja limakalvoja kuivattavat ominaisuudet.

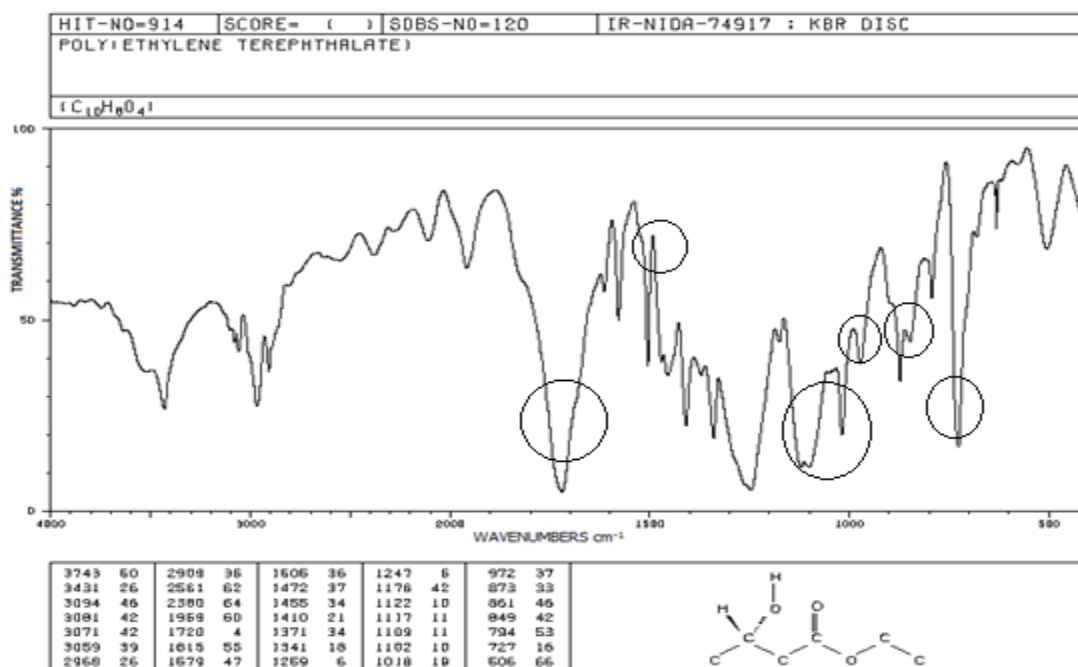
Lähteet

- 1 Mortimer, Charles E. 1997. Kemia. Kääntänyt suomalaisen ammatilliseen koulutukseen soveltanut Marjatta Hakkarainen. Opetushallitus.
- 2 Kuidut ja langat. Virtuaali Ammattikorkeakoulu. Verkkodokumentti. <<http://www.amk.fi/opintojaksot/030507/1086702266491/1146637870052/1150092963963/1150093349041.html>>. Luettu 27.2.2012
- 3 Natural fibres 2009. Verkkodokumentti. <<http://www.naturalfibres2009.org/en/fibres/jute.html>>. Luettu 27.2.2012
- 4 Toivonen, Jukka. 2011. IR. Analyyttisen kemian opintomateriaali. Metropolia.
- 5 Williams, Dudley H. & Fleming Ian. 1995: Spectroscopic Methods in Organic Chemistry 5th edition. Berkshire, England: McGraw-Hill International (UK) Limited.
- 6 Gabbott, Paul 2008; Principles and applications of thermal analysis: Blackwell Publishing Ltd.
- 7 Polymer Testing & Consultancy. Fleming. Verkkodokumentti. <<http://www.flemingptc.co.uk/our-services/dsc-tga/>>. Luettu 6.3.2012.
- 8 DSC. University of Bolton. Verkkodokumentti. <http://www.ami.ac.uk/courses/topics/0140_pl/index.html>. Luettu 9.3.2012.
- 9 Lehtonen, Pekka ja Paula 2008. Teknisten alojen kemia. WSOY Oppimateriaalit Oy, Helsinki.
- 10 Valuatlas. Verkkodokumentti. <http://www.valuatlas.fi/tietomat/docs/plastics_PA_FI.pdf>. Luettu 12.3.2012
- 11 National Institute Of Advanced Industrial Science and Technology. Verkkodokumentti. <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi>. Luettu 12.3.2012.
- 12 SciVerse, ScienceDirect. Verkkodokumentti. <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433211015030>>. Luettu 27.3.2012.
- 13 Wiley, Online Library. Verkkodokumentti. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/app.10460/pdf>>. Luettu 13.3.2012.
- 14 With friendship.com. Verkkodokumentti. <<http://withfriendship.com/user/sathvi/ftir.php>>. Luettu 21.3.2012.

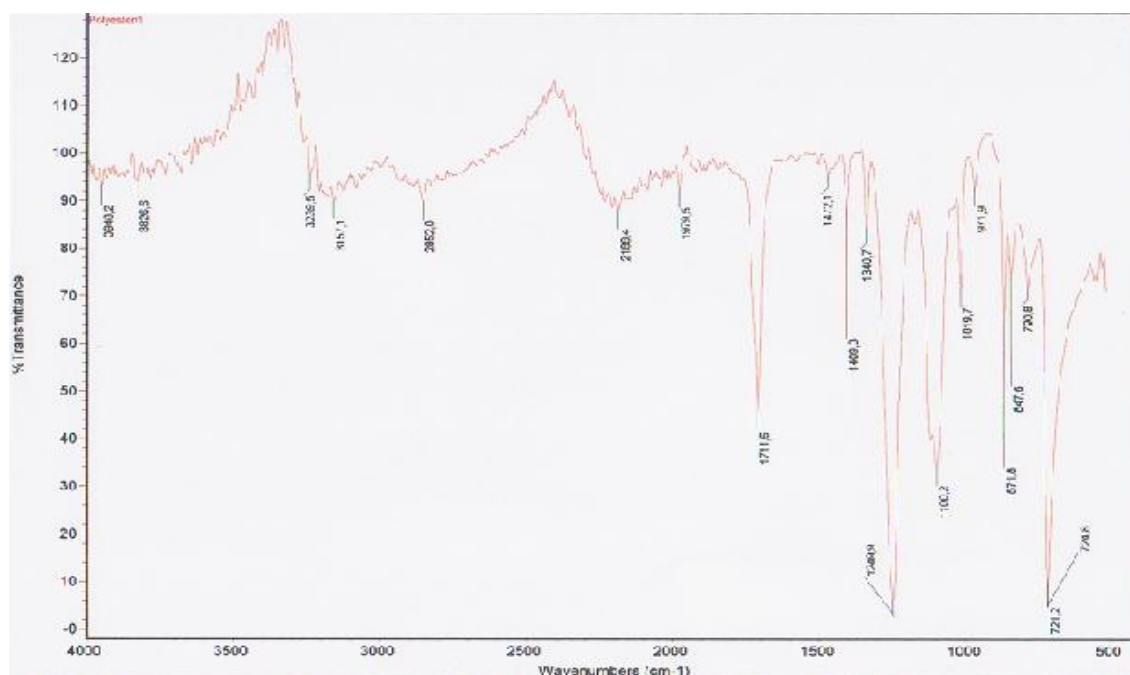
- 15 GC-MS. Oulun Yliopisto. Verkkodokumentti.
<<http://www oulu.fi/pyolam/laitteistot.html>>. Luettu 15.3.2012
- 16 GC-MS. Teknillinen korkeakoulu. Verkkodokumentti.
<<http://www.chemistry.hut.fi/eokem/analytical/teaching/downloadstudent/35.1500/Handouts/AKEM-2007.doc>>. Luettu 25.3.2012.
- 17 Embrittlement of Nylon Couplings. Verkkodokumentti.
<<http://products.asmininternational.org/fach/data/fullDisplay.do?database=faco&record=853&search=>>>. Luettu 26.3.2012.
- 18 Sciverse, ScienceDirect. Verkkodokumentti.
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032386198001815>>. Luettu 26.3.2012.
- 19 Vertest Laboratories. Verkkodokumentti. <<http://vartest.com/1694/polyester-fiber-and-polyester-fiber-generic-subclass-testing-capability-enhanced/polyesters-overlay-pdf/>>. Luettu 26.3.2012.
- 20 SciVerse, ScienceDirect. Verkkodokumentti.
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141391008003200>>. Luettu 28.3.2012.
- 21 Chemicalbook. Verkkodokumentti.
<<http://www.chemicalbook.com/RiskAndSafety.htm#Risk>>. Luettu 28.3.2012.
- 22 Palosuojatut tekstiilit. Verkkodokumentti. VTT.
<<http://www.vtt.fi/inf/pdf/tiedotteet/2001/T2116.pdf>>. Luettu 28.3.2012.
- 23 HTP-arvot 2009. Verkkodokumentti.
<http://www.stm.fi/c/document_library/get_file?folderId=39503&name=DLFE-9853.pdf>. Luettu 28.3.2012.
- 24 PET. Wikipedia. Verkkodokumentti.
<<http://fi.wikipedia.org/wiki/Polyetyleenitereftalaatti>>. Luettu 8.4.2012.
- 25 Polyamidi. Wikipedia. Verkkodokumentti. <<http://it.wikipedia.org/wiki/File:PA6-PA66.png>>. Luettu 8.4.2012.
- 26 n-heksadecane. Verkkodokumentti. PubChem compounds.
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=11006&loc=ec_rcs#x50>. Luettu. 11.4.2012.
- 27 Kansainväliset kemikaalikortit. Verkkodokumentti.
<<http://kappa.ttl.fi/kemikaalikortit/index.php?page=Advanced.php>>. Luettu 28.3.2012.
- 28 Caprolactam. Verkkodokumentti. Wikipedia.
<<http://en.wikipedia.org/wiki/Caprolactam>>. Luettu. 28.3.2012.

IR-spektrit lukuun 4

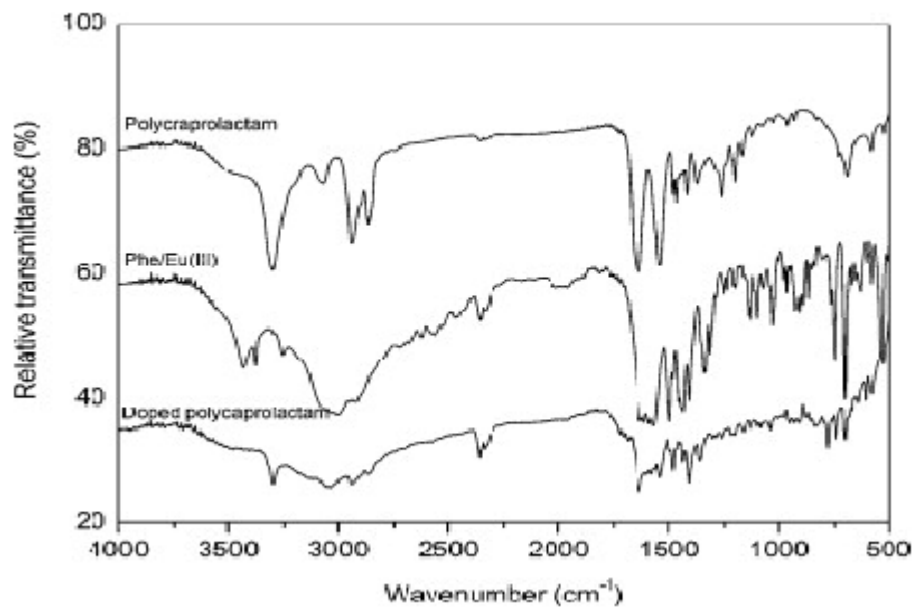
Kuvaajat tutkittavasta materiaalista sekä kirjallisuudesta



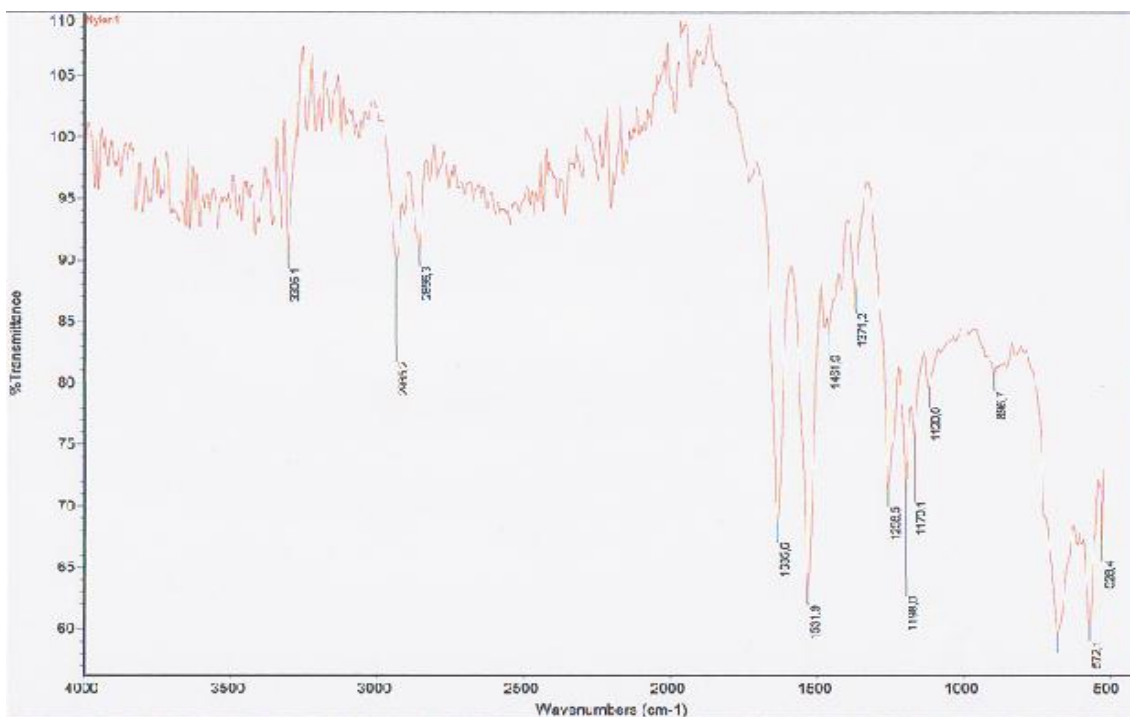
Kuva 17. SDBS:n IR-spektri polyetylenitereftalaatista (PET). [11]



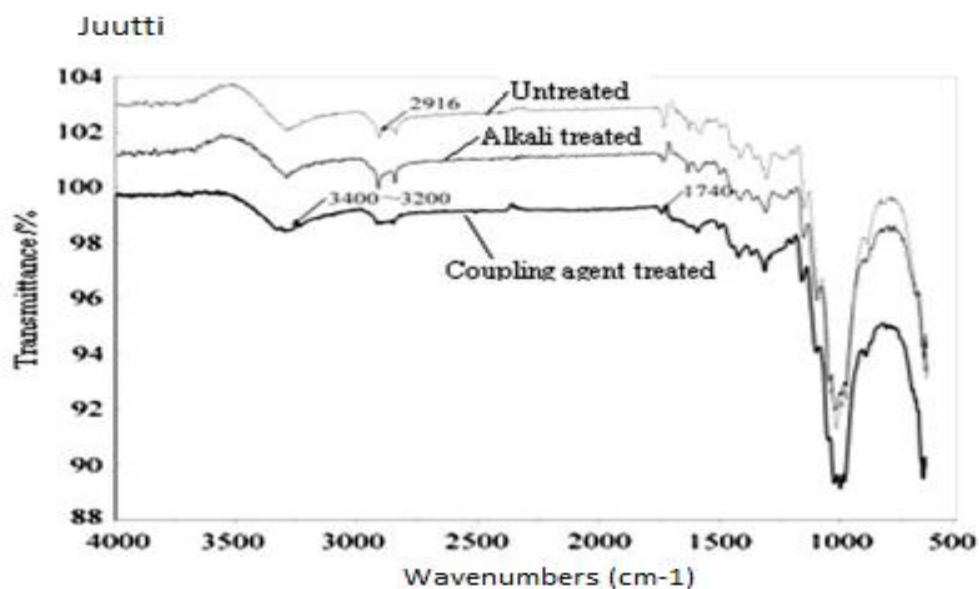
Kuva 18. FTIR-spektri tutkittavasta polyesteristä.



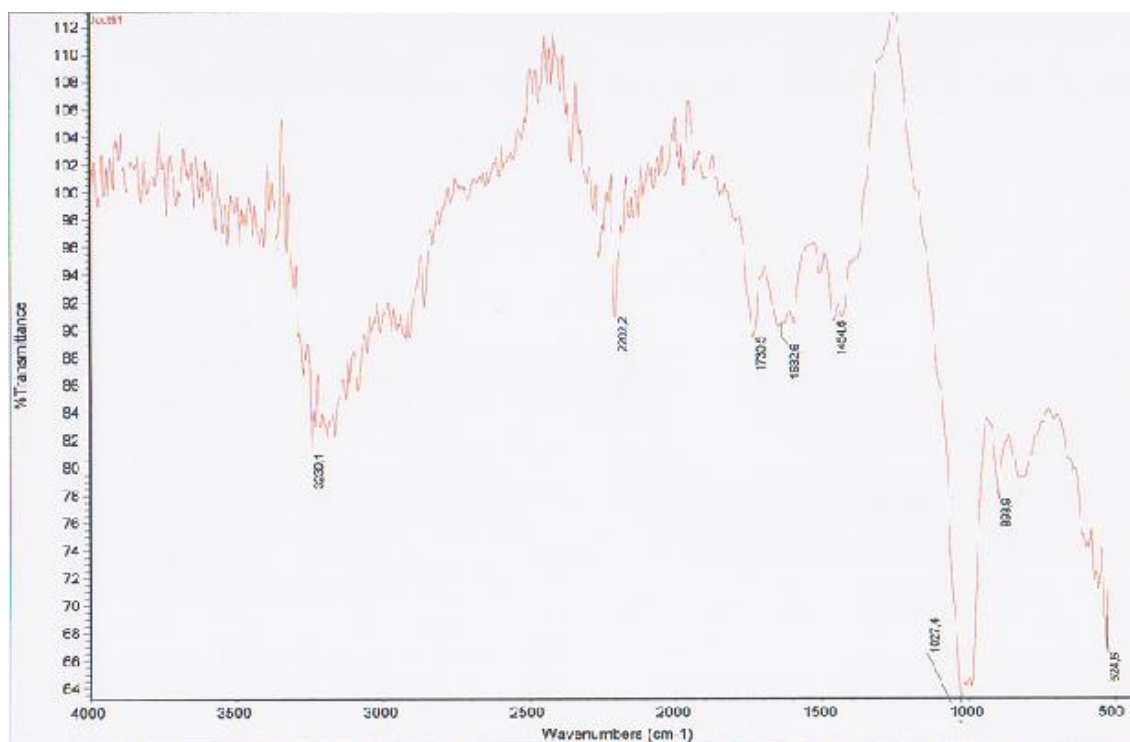
Kuva 19. Polycaprolactamin (Polyamidi 6) FTIR-spektri ylläpäällä. SciVerse, ScienceDirect. [12]



Kuva 20. FTIR-spektri tutkittavasta polyamidista



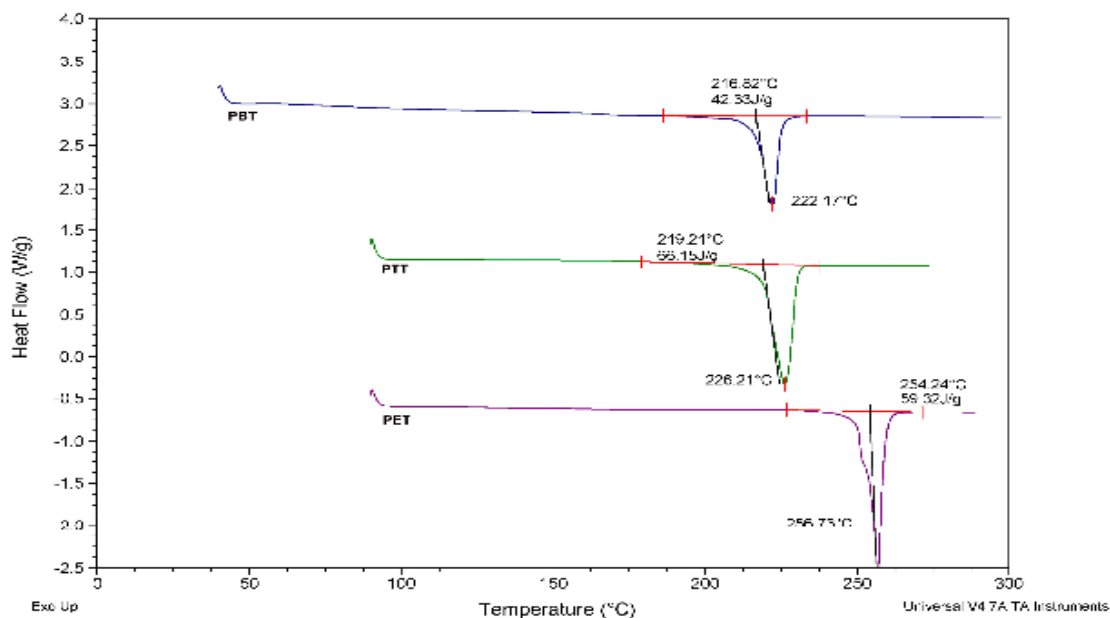
Kuva 21. FTIR-spektri juutista. Käsittelemätön juuttikuitu on kuvassa ylimpänä. [20]



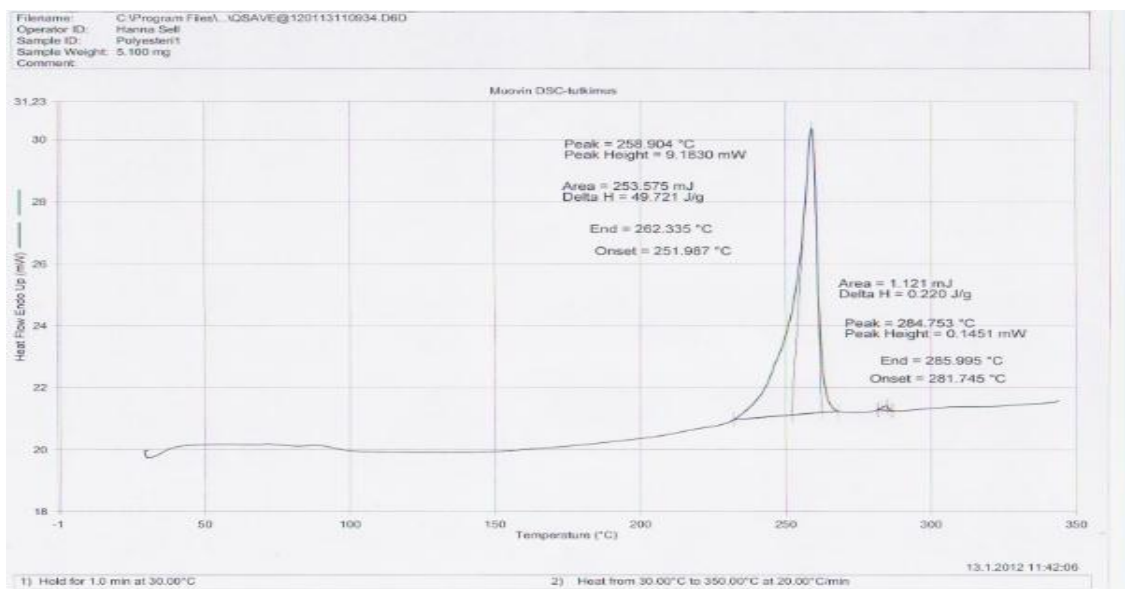
Kuva 22. FTIR-spektri tutkittavasta juutista.

Sulamiskäyrät lukuun 5

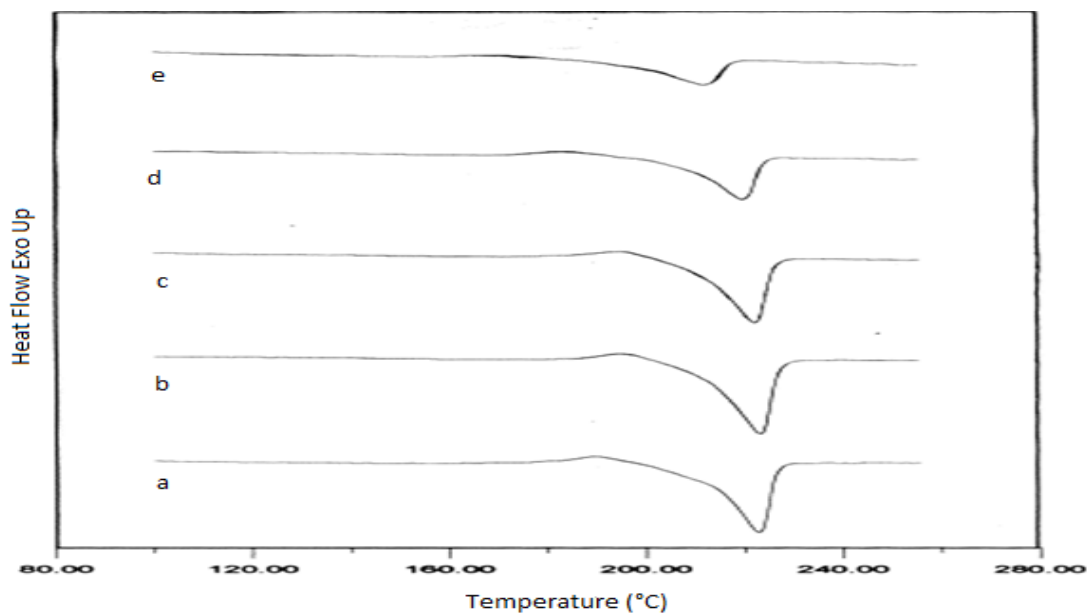
Kuvaajat ovat kirjallisuudesta sekä tutkittavasta materiaalista. Kirjallisuuden kuvaajissa endoterminen prosessi näkyy y-akselilla alaspäin kulkevalla käyrällä.



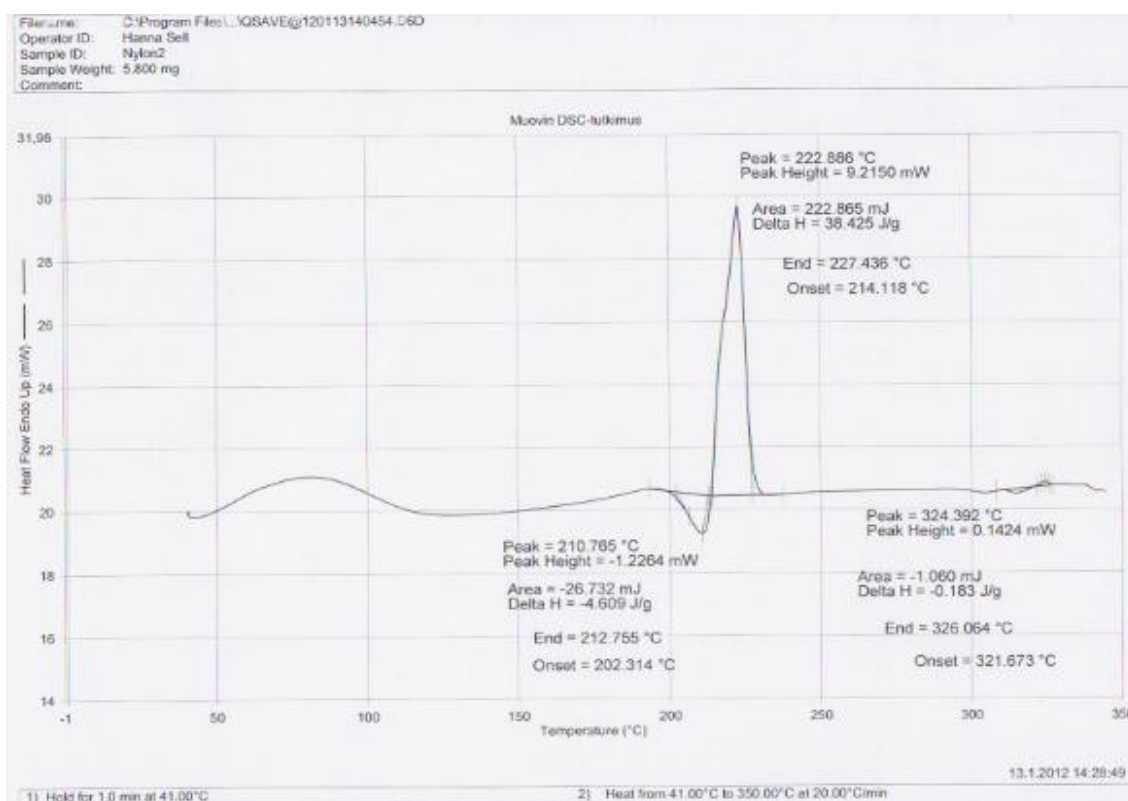
Kuva 23. Kuvaajassa näkyy alimmaisella käyrällä PET:n DSC-kuvaaja. Sulamispiste 254 °C. [19]



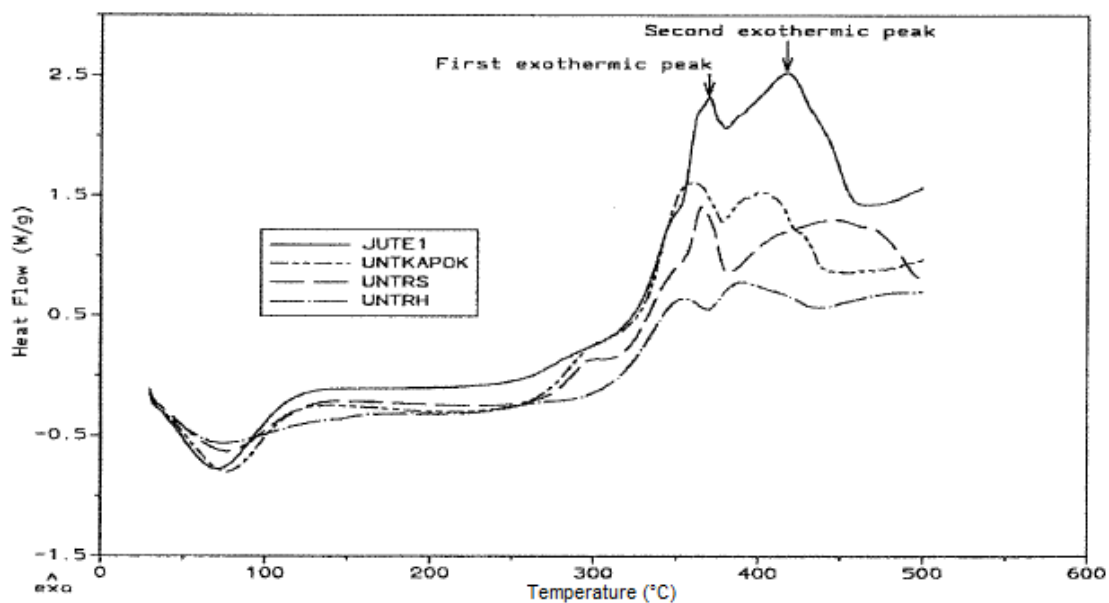
Kuva 24. Tutkittavan polyesterin DSC-kuvaaja.



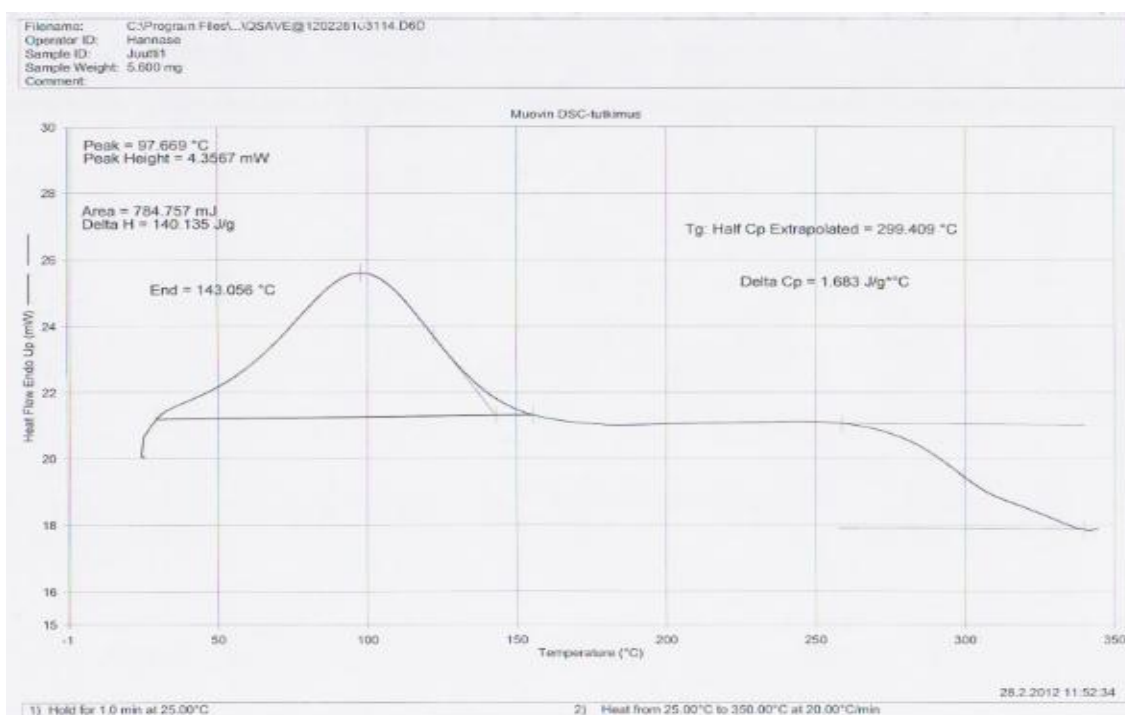
Kuva 25. Kuvaajassa näkyy käyrällä a käsittelemättömän polyamidi 6:n DSC-kuvaaja. [18]



Kuva 26. Tutkittavan polyamidin DSC-kuvaaja.



Kuva 27. DSC-kuvaaja käsittelemättömästä juutista (JUTE1).[13]












Kuva 28. Tutkittavan juutin DSC-kuvaaja.

Vaarallisuusmerkit sekä S- ja R-lausekkeet.

Alla on esitetty taulukkomuodoissa vaarallisuusmerkit sekä S- ja R-lausekkeet ja niiden yhdistetyt lausekkeet.

Taulukko 16. Taulukossa on esitetty yleisimmät vaarallisuuden merkit. [21]

PICTOGRAMS AND HAZARD CODES					
	B Biohazard		F Highly Flammable F+ Extremely Flammable		O Oxidizing
	C Corrosive		Xn Harmful Xi Irritant		R Radioactive
	E Explosive		N Dangerous for the environment		T Toxic T+ Very Toxic

Taulukko 17. Taulukossa on esitetty riskien sekä yhdistettyjen riskien luokitus.[21]

Risk Phrases

Indication of Particular Risks

- | | |
|--|--|
| R1: Explosive when dry | 35: Causes severe burns |
| 2: Risk of explosion by shock, friction, fire or other sources of ignition | 36: Irritating to the eyes |
| 3: Extreme risk of explosion by shock, friction, fire or other sources of ignition | 37: Irritating to the respiratory system |
| 4: Forms very sensitive explosive metallic compounds | 38: Irritating to the skin |
| 5: Heating may cause an explosion | 39: Danger of very serious irreversible effects |
| 6: Explosive with or without contact with air | 40: Limited evidence of a carcinogenic effect |
| 7: May cause fire | 41: Risk of serious damage to eyes |
| 8: Contact with combustible material may cause fire | 42: May cause sensitization by inhalation |
| 9: Explosive when mixed with combustible material | 43: May cause sensitization by skin contact |
| 10: Flammable | 44: Risk of explosion if heated under confinement |
| 11: Highly Flammable | 45: May cause cancer |
| 12: Extremely Flammable | 46: May cause heritable genetic damage |
| 14: Reacts violently with water | 48: Danger of serious damage to health by prolonged exposure |
| 15: Contact with water liberates extremely flammable gases | 49: May cause cancer by inhalation |
| 16: Explosive when mixed with oxidizing substances | 50: Very Toxic to aquatic organisms |
| 17: Spontaneously flammable in air | 51: Toxic to aquatic organisms |
| 18: In use may form flammable/explosive vapor-air mixture | 52: Harmful to aquatic organisms |
| 19: May form explosive peroxides | 53: May cause long-term adverse effects in the aquatic environment |
| 20: Harmful by inhalation | 54: Toxic to flora |
| 21: Harmful in contact with skin | 55: Toxic to fauna |
| 22: Harmful if swallowed | 56: Toxic to soil organisms |
| 23: Toxic by inhalation | 57: Toxic to bees |
| 24: Toxic in contact with skin | 58: May cause long-term adverse effects in the environment |
| 25: Toxic if swallowed | 59: Dangerous for the ozone layer |
| 26: Very Toxic by inhalation | 60: May impair fertility |
| 27: Very Toxic in contact with skin | 61: May cause harm to the unborn child |
| 28: Very Toxic if swallowed | 62: Possible risk of impaired fertility |
| 29: Contact with water liberates toxic gas | 63: Possible risk of harm to the unborn child |
| 30: Can become highly flammable in use | 64: May cause harm to breast-fed babies |
| 31: Contact with acids liberates toxic gas | 65: Harmful: May cause lung damage if swallowed |
| 32: Contact with acids liberates very toxic gas | 66: Repeated exposure may cause skin dryness or cracking |
| 33: Danger of cumulative effects | 67: Vapors may cause drowsiness and dizziness |
| 34: Causes burns | 68: Possible risk of irreversible effects |

Combination of Particular Risks

14/15: Reacts violently with water, liberating extremely flammable gases	48/20: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation
15/29: Contact with water liberates toxic, extremely flammable gas	48/20/21: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation and in contact with skin
20/21: Harmful by inhalation and in contact with skin	48/20/21/22: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation, and in contact with skin and if swallowed
20/21/22: Harmful by inhalation, in contact with skin and if swallowed	48/20/22: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation and if swallowed
20/22: Harmful by inhalation and if swallowed	48/21: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure in contact with skin
21/22: Harmful in contact with skin and if swallowed	48/21/22: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure in contact with skin and if swallowed
23/24: Toxic by inhalation and in contact with skin	48/22: Harmful: danger of serious damage to health by prolonged exposure if swallowed
23/24/25: Toxic by inhalation, in contact with skin and if swallowed	48/23: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation
23/25: Toxic by inhalation and if swallowed	48/23/24: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation and in contact with skin
24/25: Toxic in contact with skin and if swallowed	48/23/24/25: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation, in contact with skin and if swallowed
26/27: Very Toxic by inhalation and in contact with skin	48/23/25: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure through inhalation and if swallowed
26/27/28: Very Toxic by inhalation, in contact with skin and if swallowed	48/24: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure in contact with skin
26/28: Very Toxic by inhalation and if swallowed	48/24/25: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure in contact with skin and if swallowed
27/28: Very Toxic in contact with skin and if swallowed	48/25: Toxic: danger of serious damage to health by prolonged exposure if swallowed
36/37: Irritating to eyes and respiratory system	50/53: Very Toxic to aquatic organisms, may cause long-term adverse effects in the aquatic environment
36/37/38: Irritating to eyes, respiratory system and skin	51/53: Toxic to aquatic organisms, may cause long-term adverse effects in the aquatic environment
36/38: Irritating to eyes and skin	52/53: Harmful to aquatic organisms, may cause long-term adverse effects in the aquatic environment
37/38: Irritating to respiratory system and skin	68/20: Harmful: possible risk of irreversible effects through inhalation
39/23: Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation	68/20/21: Harmful: possible risk of irreversible effects through inhalation and in contact with skin
39/23/24: Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation in contact with skin	68/20/21/22: Harmful: possible risk of irreversible effects through inhalation, in contact with skin and if swallowed
39/23/24/25: Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation, in contact with skin and if swallowed	68/20/22: Harmful: possible risk of irreversible effects through inhalation and if swallowed
39/23/25: Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation and if swallowed	68/22: Harmful: possible risk of irreversible effects if swallowed
39/24: Toxic: danger of very serious irreversible effects in contact with skin	68/21: Harmful: possible risk of irreversible effects in contact with skin
39/24/25: Toxic: danger of very serious irreversible effects in contact with skin and if swallowed	68/21/22: Harmful: possible risk of irreversible effects in contact with skin and if swallowed
39/25: Toxic: danger of very serious irreversible effects if swallowed	68/22: Harmful: possible risk of irreversible effects if swallowed
39/26: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation	
39/26/27: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation and in contact with skin	
39/26/27/28: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation, in contact with skin and if swallowed	
39/26/28: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects through inhalation and if swallowed	
39/27: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects in contact with skin	
39/27/28: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects in contact with skin and if swallowed	
39/28: Very Toxic: danger of very serious irreversible effects if swallowed	
42/43: May cause sensitization by inhalation and skin contact	

Taulukko 18. Taulukossa on esitetty turvallisuus luokitukset. [21]

Safety Phrases

Indication of Safety Precautions

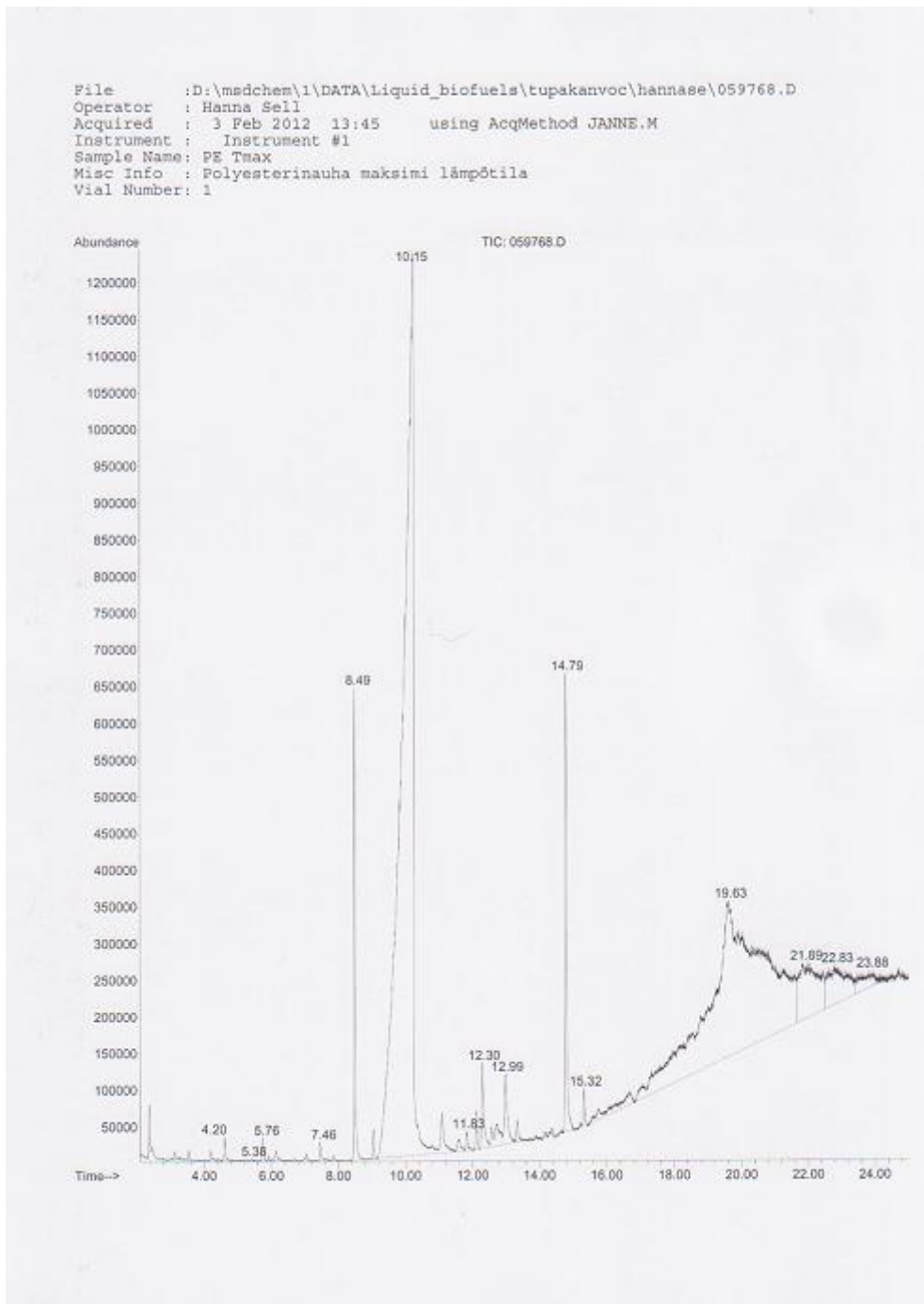
- | | |
|--|---|
| S1: Keep locked up | 37: Wear suitable gloves |
| 2: Keep out of the reach of children | 38: In case of insufficient ventilation, wear suitable respiratory equipment |
| 3: Keep in a cool place | 39: Wear eye/face protection |
| 4: Keep away from living quarters | 40: To clean the floor and all objects contaminated by this material use ... (to be specified by the manufacturer) |
| 5: Keep contents under ... (appropriate liquid to be specified by the manufacturer) | 41: In case of fire and/or explosion do not breathe fumes |
| 6: Keep under ... (inert gas to be specified by the manufacturer) | 42: During fumigation/spraying wear suitable respiratory equipment (appropriate wording to be specified) |
| 7: Keep container tightly closed | 43: In case of fire, use ... (indicate in the space the precise type of fire-fighting equipment. If water increases the risk add - Never use water) |
| 8: Keep container dry | 45: In case of accident or if you feel unwell, seek medical advice immediately (show label where possible) |
| 9: Keep container in a well-ventilated place | 46: If swallowed, seek medical advice immediately and show this container or label |
| 12: Do not keep the container sealed | 47: Keep at temperature not exceeding ... E C (to be specified by the manufacturer) |
| 13: Keep away from food, drink and animal feeding stuffs | 48: Keep wetted with ... (appropriate material to be specified by the manufacturer) |
| 14: Keep away from ... (incompatible materials to be indicated by the manufacturer) | 49: Keep only in the original container |
| 15: Keep away from heat | 50: Do not mix with ... (to be specified by the manufacturer) |
| 16: Keep away from sources of ignition - No smoking | 51: Use only in well-ventilated areas |
| 17: Keep away from combustible material | 52: Not recommended for interior use on large surface areas |
| 18: Handle and open container with care | 53: Avoid exposure - obtain special instruction before use |
| 20: When using, do not eat or drink | 56: Dispose of this material and its container to hazardous or special waste collection point |
| 21: When using, do not smoke | 57: Use appropriate container to avoid environmental contamination |
| 22: Do not breathe dust | 59: Refer to manufacturer/supplier for information on recovery/recycling |
| 23: Do not breathe gas/fumes/vapor/spray (appropriate wording to be specified by the manufacturer) | 60: This material and/or its container must be disposed of as hazardous waste |
| 24: Avoid contact with skin | 61: Avoid release to the environment. Refer to special instructions safety data sheet |
| 25: Avoid contact with eyes | 62: If swallowed, do not induce vomiting: seek medical |
| 26: In case of contact with eyes, rinse immediately with plenty of water and seek medical advice | |
| 27: Take off immediately all contaminated clothing | |
| 28: After contact with skin, wash immediately with plenty of ... (to be specified by the manufacturer) | |
| 29: Do not empty into drains | |
| 30: Never add water to this product | |
| 33: Take precautionary measures against static | |

Combination of Safety Precautions

- | | |
|---|--|
| 1/2: Keep locked up and out of the reach of children | 24/25: Avoid contact with skin and eyes |
| 3/7: Keep container tightly closed in a cool place | 27/28: After contact with skin, take off immediately all contaminated clothing and wash immediately with plenty of.... (to be specified by the manufacturer) |
| 3/9/14: Keep in a cool well-ventilated place away from ... (incompatible materials to be indicated by manufacturer) | 29/35: Do not empty into drains, dispose of this container and it's material in a safe way |
| 3/9/14/49: Keep only in the original container in a cool well-ventilated place away from ... (incompatible materials to be indicated by manufacturer) | 29/56: Do not empty into drains, dispose of this material and its container to hazardous or special waste-collection point |
| 3/9/49: Keep only in the original container in a cool well-ventilated place | 36/37: Wear suitable protective clothing and gloves |
| 3/14: Keep in a cool place away from ... (incompatible materials to be indicated by the manufacturer) | 36/37/39: Wear suitable protective clothing, gloves and eye/face protection |
| 7/8: Keep container tightly closed and dry | 36/39: Wear suitable protective clothing and eye/face protection |
| 7/9: Keep container tightly closed and in a well-ventilated place | 37/39: Wear suitable gloves and eye/face protection |
| 7/47: Keep container tightly closed and at a temperature not exceeding ... °C (to be specified by manufacturer) | 47/49: Keep only in the original container at temperature not exceeding ... °C (to be specified by manufacturer) |
| 20/21: When using, do not eat, drink or smoke | |

Kromatogrammit lukuun 8.4

Kromatogrammit OffSitu näytteenotosta.



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 059768.D
 Acq On : 3 Feb 2012 13:45
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PE Tmax
 Misc : Polyesterinauha maksimi lämpötila
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.20	0.25	D:\DATABASE\NBS75K.L Ethylbenzene Ethylbenzene Ethylbenzene	63694 63692 63690	000100-41-4 000100-41-4 000100-41-4	72 64 64
2	5.38	0.02	D:\DATABASE\NBS75K.L .alpha.-Methylstyrene Phenprobamate Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	64470 17436 3597	000098-83-9 000673-31-4 000622-97-9	49 47 38
3	5.76	0.32	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzaldehyde Benzaldehyde Benzaldehyde	63686 63689 63685	000100-52-7 000100-52-7 000100-52-7	90 90 90
4	7.46	0.28	D:\DATABASE\NBS75K.L Acetophenone Acetophenone Acetophenone	64533 3752 64537	000098-86-2 000098-86-2 000098-86-2	90 86 86
5	8.49	2.93	D:\DATABASE\NBS75K.L 1,2-Propanedione, 1-phenyl- Benzoyl isothiocyanate Benzeneacetic acid, .alpha.-oxo-, methyl ester	9265 13116 67796	000579-07-7 000532-55-8 015206-55-0	90 83 78
6	10.15	44.77	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	3903 64651 64650	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	91 91 91
7	11.83	0.15	D:\DATABASE\NBS75K.L 1H-Inden-1-ol, 2-bromo-2,3-dihydro Ethanone, 1-(4-ethylphenyl)- Ethanone, 1-(4-ethylphenyl)-	25717 9330 66589	005400-80-6 000937-30-4 000937-30-4	64 64 64
8	12.30	1.74	D:\DATABASE\NBS75K.L Biphenyl Naphthalene, 2-ethenyl- Biphenyl	67195 67202 67193	000092-52-4 000827-54-3 000092-52-4	55 55 49
9	12.99	1.20	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic acid, cyclohexyl ester Benzoic acid, butyl ester 1,5-Pentanediol, monobenzoate	23850 68609 24877	002412-73-9 000136-60-7 055162-82-8	72 72 56
10	14.79	3.35	D:\DATABASE\NBS75K.L 2-Propenal, 3-[4-(dimethylamino)ph enyl]- 4-Methyl-2,6-dihydroxyquinoline Borinic acid, diethyl-, 2-acetylph	16488 16455 23826	006203-18-5 034982-01-9 074663-95-9	38 37 25


```

enyl ester
11 15.32 0.30 D:\DATABASE\NBS75K.L
Ethyl 4-acetylbenzoate 20691 038430-55-6 50
3H-1,2,4-Triazole-3-thione, 1,2-d1 16860 003414-94-6 50
hydro-5-phenyl-
1-Indolinecarboxaldehyde, 2-hydrox 16905 013303-69-0 40
y-5-methyl-
12 19.63 36.27 D:\DATABASE\NBS75K.L
1,1'-Biphenyl, phenoxy- 33143 028984-89-6 53
[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol 33147 006093-03-4 52
Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6- 33141 013304-07-9 46
diphenyl-
13 21.89 4.45 D:\DATABASE\NBS75K.L
1H-Naphtho[2,1-b]pyran, 4a,5,6,6a, 36338 005159-92-4 22
7,8,9,10,10a,10b-decahydro-3,4a,7,
7,10a-pentamethyl-, [4aR-(4a.alpha
.,6a.beta.,10a.alpha.,10b.beta.)]-
Androstan-17-one, 3-hydroxy-, (3.a 41261 000053-42-9 10
lpha.,5.beta.)=
1,2-Diborane(4)diamine, N,N',N'- 36612 019127-90-3 9
tetramethyl-1,2-diphenyl-
14 22.83 2.96 D:\DATABASE\NBS75K.L
2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphe 71338 013304-12-6 25
nyl-
7,14-Methano-4H,6H-dipyrido[1,2-a: 33113 035611-60-0 22
1',2'-e][1,5]diazocin-4-one, 1,2,3
,7,9,10,11,13,14,14a-decahydro-, [
7S-(7.alpha.,14.alpha.,14a.alpha.)
]-
1,1'-Biphenyl, 2-phenoxy- 71339 006738-04-1 22
15 23.88 1.02 D:\DATABASE\NBS75K.L
Oxazole, 2,5-dihydro-4-(4-methylph 31316 052939-89-6 12
enyl)-5-phenyl-
Stannane, tributylethyl- 45575 019411-60-0 11
5,6-Dihydro-2-(4-tolyl)-4H-1,3-oxa 20072 077580-69-9 10
zin-5-one

```

PAH16.M Thu Mar 08 11:41:17 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 059768.D
 Acq On : 3 Feb 2012 13:45
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PE Tmax
 Misc : Polyesterinauha maksimi lämpötila
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

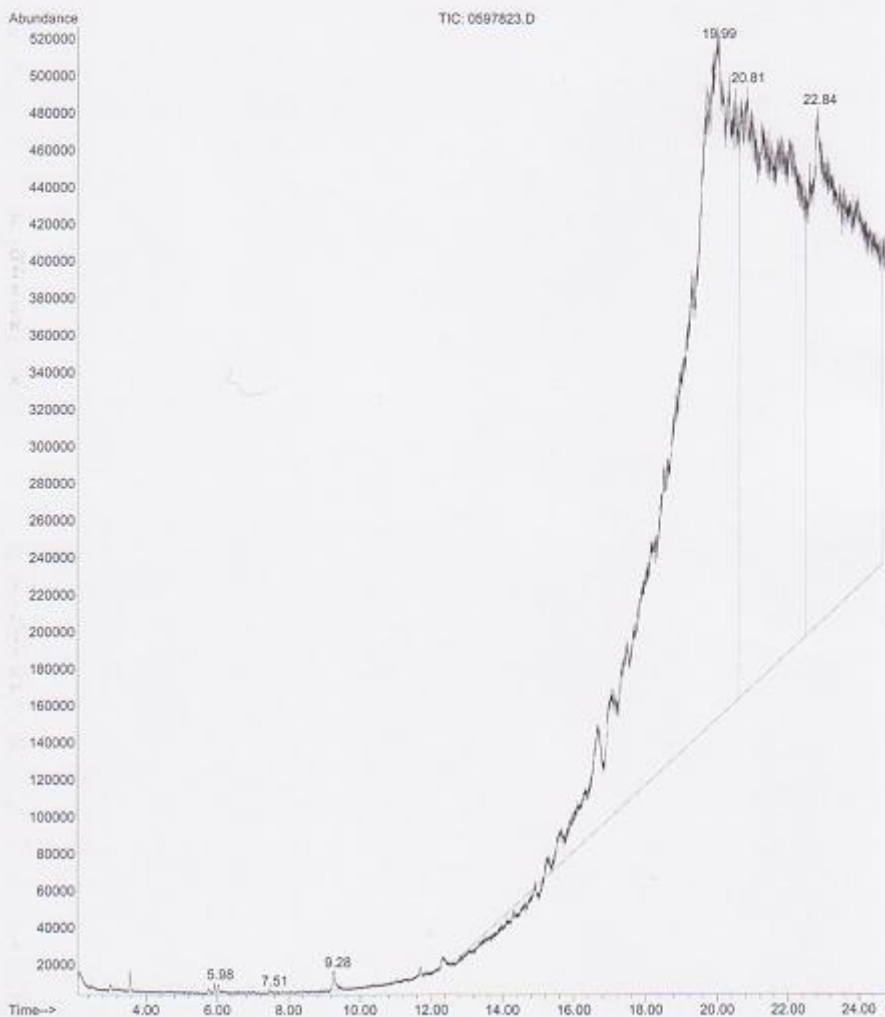
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	4.198	615	743	1136	PV 5	5350	1623384	0.56%	0.249%
2	5.380	1136	1160	1243	VV 5	1594	104451	0.04%	0.016%
3	5.763	1243	1295	1667	PV 4	18019	2081601	0.71%	0.319%
4	7.462	1667	1894	2138	VV 4	12080	1827261	0.62%	0.280%
5	8.491	2138	2257	2485	PV	374675	19152592	6.55%	2.932%
6	10.147	2485	2841	3406	VV 4	1053528	292447675	100.00%	44.771%
7	11.825	3406	3433	3481	VV 4	17985	1012382	0.35%	0.155%
8	12.299	3481	3600	3807	PV 9	79011	11387946	3.89%	1.743%
9	12.993	3807	3845	4067	VV 4	67376	7816974	2.67%	1.197%
10	14.786	4067	4477	4581	PV 3	412220	21851709	7.47%	3.345%
11	15.319	4581	4665	4715	PV 4	31241	1932515	0.66%	0.296%
12	19.631	4715	6186	6905	PV 7	202363	236883954	81.00%	36.265%
13	21.894	6905	6984	7199	VV 7	66028	29085597	9.95%	4.453%
14	22.827	7199	7313	7515	VV 7	45043	19347146	6.62%	2.962%
15	23.882	7515	7685	7836	VV 7	14664	6647231	2.27%	1.018%

Sum of corrected areas: 653202416

PAH16.M Thu Mar 08 12:06:57 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\0597823.
...
Operator : Hanna Sell
Instrument : Instrument #1
Acquired : 3 Feb 2012 11:52 using AcqMethod JANNE.M
Sample Name: PE Tmin 3
Misc Info : sama tenax udestaan pitäisi olla nyt puhdas



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 0597823.D
 Acq On : 3 Feb 2012 11:52
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PE Tmin 3
 Misc : sama tenax uudestaan pitaisi olla nyt puhdas
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	5.98	0.06	D:\DATABASE\NBS75K.L Silane, ethylmethyl[[5-methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-2-propenyl-, (1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)- Oxazole, 5-bromo-2-methyl-4-phenyl Cyclobutane, 1-bromo-2-chloro-	37389 31211 14334	074841-60-4 020662-93-5 055887-83-7	37 25 25
2	7.51	0.01	D:\DATABASE\NBS75K.L Uridine, 2',3'-O-(phenylmethylene) Allyl phenoxycetate Chlorpropham	47129 20692 70295	003257-71-4 007493-74-5 000101-21-3	9 7 7
3	9.28	0.05	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	64649 64647 64648	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	72 64 64
4	19.99	42.83	D:\DATABASE\NBS75K.L 5-Bromo-2-aminobenzophenone hydrazone trans-5,6-Dihydro-11-methylbenz(A)anthracene-5,6-diol 2-(2,4-Dinitrostyryl)-1-naphthol	40980 38862 47682	000000-00-0 082735-48-6 000000-00-0	35 30 14
5	20.81	30.27	D:\DATABASE\NBS75K.L 2-Chloro-5-methoxypyrimidine Benzenepropanenitrile, .beta.-imino- 8-Isoquinolinamine	8255 8466 8485	022536-65-8 016187-90-9 023687-27-6	10 10 9
6	22.84	26.78	D:\DATABASE\NBS75K.L Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-diphenyl- [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol [1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33141 33145 33147	013304-07-9 002432-11-3 006093-03-4	83 64 64

PAH16.M Thu Mar 08 11:40:30 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 0597823.D
 Acq On : 3 Feb 2012 11:52
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PE Tmin 3
 Misc : sama tenax uudestaan pitäisi olla nyt puhdas
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

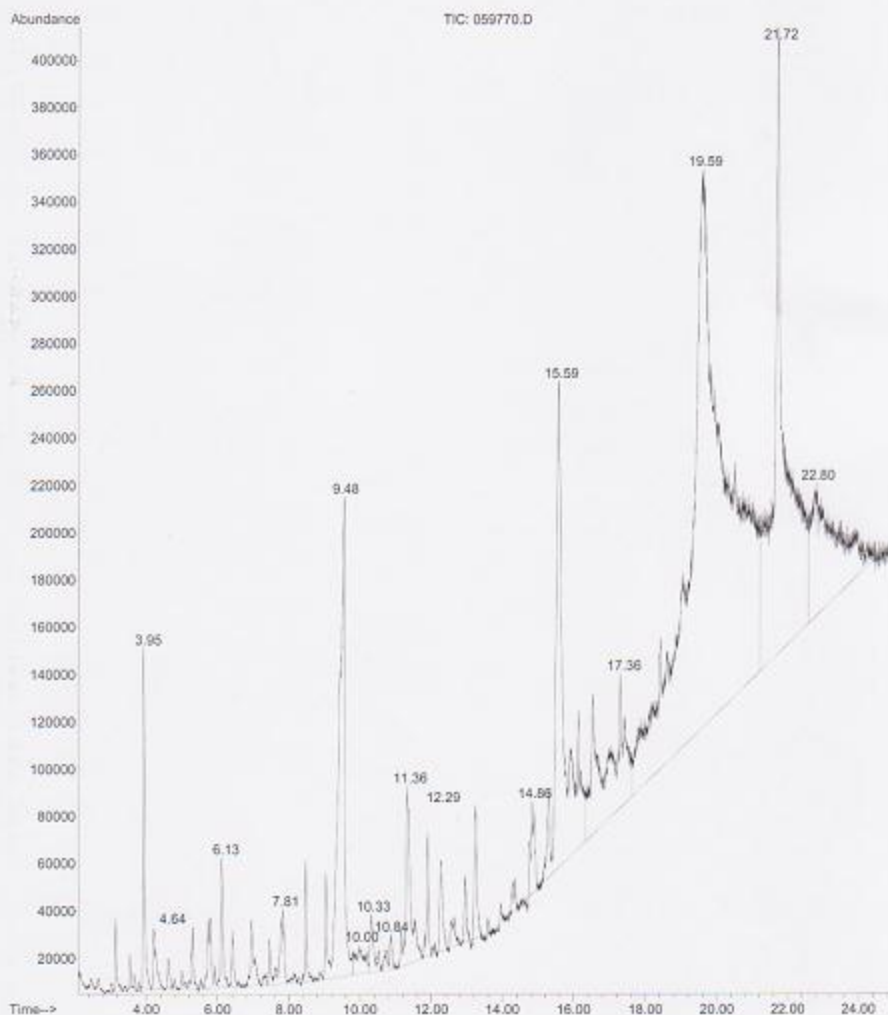
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	5.981	1234	1372	1822	PV	1768	609503	0.14%	0.059%
2	7.506	1822	1910	2141	PV	797	110456	0.02%	0.011%
3	9.275	2141	2534	2667	PV 6	7645	556564	0.13%	0.054%
4	19.988	3702	6312	6531	PV 6	365449	443744370	100.00%	42.827%
5	20.813	6531	6603	7197	VV 6	316964	313620276	70.68%	30.268%
6	22.840	7197	7318	7959	VBA6	270714	277499865	62.54%	26.782%

Sum of corrected areas: 1036141035

PAH16.M Thu Mar 08 12:07:24 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\059770.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 3 Feb 2012 14:27 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: KomPak Tmax
Misc Info : kompotiiteista koostuva nauha, paksu max T
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 059770.D
 Acq On : 3 Feb 2012 14:27
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPak Tmax
 Misc : kompotiiteista koostuva nauha, paksu max T
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.95	1.72	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Furan, 2,5-dimethyl-	63114	000625-86-5	9
			2-Furancarboxaldehyde	63104	000098-01-1	9
			2-Furancarboxaldehyde	63103	000098-01-1	9
2	4.64	0.55	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,2-Propanediol, 3-(methylthio)-	3876	022551-26-4	9
			5-Nonenal, (E)-	7469	002277-18-1	9
			1H-Imidazole, 2,4-dimethyl-	1075	000930-62-1	9
3	6.13	2.07	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzonitrile	63598	000100-47-0	18
			4(1H)-Pyrimidinone, 2-methyl-	2265	019875-04-8	17
			Benzene, isocyano-	1841	000931-54-4	14
4	7.81	1.04	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Ethanone, 1-(1-cyclohexen-1-yl)-	64789	000932-66-1	27
			Cyclohexanol, 2-(1-methylethyl)-	8034	000096-07-1	25
			1,3-Hexadiene, 3-ethyl-2-methyl-, (Z)-	4269	074752-97-9	25
5	9.48	6.73	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64648	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	91
6	10.00	0.54	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzofuran, 2,3-dihydro-	64532	000496-16-2	18
			Benzene, (ethenyloxy)-	64551	000766-94-9	14
			N-Benzylglycine ethyl ester	20956	006436-90-4	14
7	10.32	0.52	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-	64861	000067-47-0	80
			2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-	4421	000067-47-0	72
			2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-	64860	000067-47-0	52
8	10.84	0.33	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, 4-methyl-	6472	000099-94-5	35
			3-Methoxybenzylamine	6761	005071-96-5	35
			Benzoic acid, 3-methyl-	6488	000099-04-7	35
9	11.36	2.58	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Caprolactam	64076	000105-60-2	80
			Caprolactam	2777	000105-60-2	72
			Aminocaproic Acid	5617	000060-32-2	50
10	12.29	1.96	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Naphthalene, 2-ethenyl-	67202	000827-54-3	53
			Naphthalene, 2-ethenyl-	11097	000827-54-3	53
			Biphenyl	67195	000092-52-4	43

Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 059770.D
 Acq On : 3 Feb 2012 14:27
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Kompak Tmax
 Misc : kompotiiteista koostuva nauha, paksu max T
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
11	14.86	0.96	D:\DATABASE\NBS75K.L 2,3,5,6-Tetrafluoroanisole	17590	002324-98-3	59
			4-Methyl-2,5-dimethoxybenzaldehyde	17698	000000-00-0	50
			2,5-Dimethoxy-4-ethylamphetamine	28385	000000-00-0	47
12	15.59	8.85	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, 1-ethenyl-3-nitro-	9442	000586-39-0	56
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, dipr opyl ester	71450	000131-16-8	50
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, dipr opyl ester	71449	000131-16-8	45
13	17.36	5.17	D:\DATABASE\NBS75K.L Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6- diphenyl-	33141	013304-07-9	46
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	35
			Benzenamine, 2,3,4,5-tetrachloro-6 -methoxy-	35638	042138-72-7	11
14	19.59	43.43	D:\DATABASE\NBS75K.L [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	87
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	87
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6- diphenyl-	33141	013304-07-9	87
15	21.72	16.35	D:\DATABASE\NBS75K.L Quinoline, 1-benzoyldecahydro-, tr ans-	32552	022218-33-3	59
			1,2-Propanedione, 1-phenyl-	66562	000579-07-7	59
			.beta.-D-Ribofuranose, 1-acetate 2 ,3,5-tribenzoate	59067	006974-32-9	45
16	22.80	7.23	D:\DATABASE\NBS75K.L Azuleno[4,5-b]furan-2,7-dione, 3,3 a,4,5,9a,9b-hexahydro-3,6,9-trimet hyl-, [3R-(3.alpha.,3a.beta.,9a.be ta.,9b.alpha.)]-	33103	005956-04-7	18
			Benzenamine, 4-[(4-nitrophenyl)thi o]-	32987	000101-59-7	14
			Benzenamine, 2,4,6-tris[1,1-dimeth ylethyl]-	36083	000961-38-6	12

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 059770.D
 Acq On : 3 Feb 2012 14:27
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPak Tmax
 Misc : kompotiiteista koostuva nauha, paksu max T
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

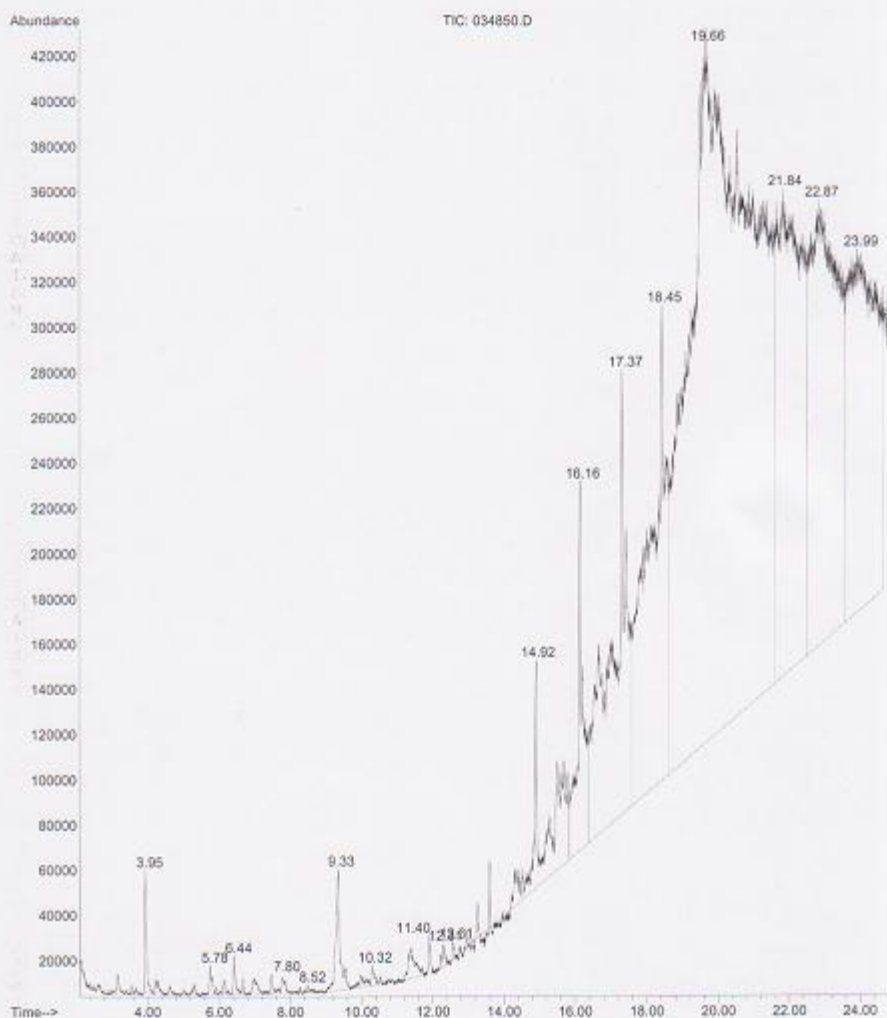
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.948	468	655	842	BV	87715	6484140	3.95%	1.715%
2	4.640	842	899	1200	PV 7	9491	2072875	1.26%	0.548%
3	6.128	1200	1424	1803	PV 7	34174	7809264	4.76%	2.066%
4	7.807	1803	2016	2204	VV 7	26438	3916639	2.39%	1.036%
5	9.483	2204	2607	2712	PV 6	147040	25433735	15.50%	6.729%
6	9.999	2712	2789	2872	VV 6	10185	2052727	1.25%	0.543%
7	10.325	2872	2904	3000	VV 5	20359	1949492	1.19%	0.516%
8	10.835	3000	3084	3147	VV 5	8727	1228967	0.75%	0.325%
9	11.360	3147	3269	3526	PV 5	60959	9747574	5.94%	2.579%
10	12.290	3526	3597	4098	VV 5	32639	7391066	4.50%	1.955%
11	14.862	4098	4504	4581	PV 5	30702	3615964	2.20%	0.957%
12	15.590	4581	4761	5027	PV 2	168442	33469659	20.39%	8.855%
13	17.360	5027	5385	5479	VV 2	26972	19547223	11.91%	5.172%
14	19.594	5479	6173	6744	VV 4	223915	164136397	100.00%	43.425%
15	21.718	6744	6922	7224	VV	182699	61791499	37.65%	16.348%
16	22.801	7224	7304	7903	VV	50751	27328990	16.65%	7.230%

Sum of corrected areas: 377976211

PAH16.M Thu Mar 08 10:13:07 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\034850.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 3 Feb 2012 12:55 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: KomPak Tmin
Misc Info : Komponenteista valmistettu nauha, paksu
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 034850.D
 Acq On : 3 Feb 2012 12:55
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Kompak Tmin
 Misc : Komponenteista valmistettu nauha, paksu
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.95	0.24	D:\DATABASE\NBS75K.L Pyrazole, 1,4-dimethyl- 1H-Pyrazole, 3,5-dimethyl- Furan, 2,5-dimethyl-	1073 63107 63116	001072-68-0 000067-51-6 000625-86-5	9 9 9
2	5.78	0.09	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, 1-fluoro-2-methyl- 1H-Imidazole, 2-ethyl-4-methyl- Benzenebutanoic acid, .alpha.-ethy 1-.beta.-hydroxy-	63852 2275 24852	000095-52-3 000931-36-2 055822-89-4	22 22 16
3	6.44	0.20	D:\DATABASE\NBS75K.L N-Ethyl-4-methyl-4-octanamine Veratraman-3,23-diol, 14,15,16,17- tetrahydro-, (3.beta.,23.beta.)- Piperidine, 1-nitroso-	15506 54556 64095	071275-02-0 000060-70-8 000100-75-4	45 36 9
4	7.80	0.10	D:\DATABASE\NBS75K.L Phenol, 4-methoxy-, acetate Guaifenesin 2,4-Heptadiene, 2,4-dimethyl-	13956 69604 4228	001200-06-2 000093-14-1 074421-05-9	43 37 25
5	8.52	0.03	D:\DATABASE\NBS75K.L p-Hydroxymeperidine + TMAH Phytol Phytol	38953 42181 72680	000000-00-0 000150-86-7 000150-86-7	25 14 14
6	9.33	0.51	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	3903 64647 64651	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	90 87 87
7	10.32	0.16	D:\DATABASE\NBS75K.L 2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxym ethyl)- 2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxym ethyl)- 2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxym ethyl)-	64860 64861 4421	000067-47-0 000067-47-0 000067-47-0	80 72 56
8	11.40	0.29	D:\DATABASE\NBS75K.L Caprolactam Caprolactam Caprolactam	2777 64075 64076	000105-60-2 000105-60-2 000105-60-2	86 64 45
9	12.31	0.07	D:\DATABASE\NBS75K.L Biphenyl Biphenyl Naphthalene, 2-ethenyl-	67196 67193 67202	000092-52-4 000092-52-4 000827-54-3	49 46 46
10	12.61	0.03	D:\DATABASE\NBS75K.L			

			1,8-Naphthyridine, 2,4,7-trimethyl	15832	014757-44-9	35
			Monomethyl-trimethylene-.beta.-sed	36140	000000-00-0	25
			cheptitol			
			5,5-Dimethyl-4-phenyl-spiro[1,2]he	35563	000000-00-0	25
			xane-3-imidazoline-3-oxide			
11	14.92	2.20	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Hexadecane	29267	000544-76-3	97
			Hexadecane	70790	000544-76-3	93
			Hexadecane	70785	000544-76-3	93
12	16.17	1.86	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Heptadecane	32063	000629-78-7	97
			Heptadecane	71193	000629-78-7	96
			Nonadecane, 9-methyl-	39865	013287-24-6	93
13	17.37	6.16	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			10H-Phenothiazine, 5-oxide	26506	001207-71-2	25
			2-(2,4-Dinitrostyryl)-1-naphthol	47682	000000-00-0	12
			Indan, 6-tert-butyl-4-ethyl-1,1-di	30042	003247-65-2	11
			methyl-			
14	18.45	8.02	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Nonadecane	71950	000629-92-5	97
			Heneicosane	42201	000629-94-7	95
			Heptadecane	32063	000629-78-7	92
15	19.66	44.75	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	58
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-	33141	013304-07-9	58
			diphenyl-			
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	52
16	21.83	12.08	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, 6-meth	23315	001804-04-2	10
			yl-3-phenyl-			
			Benzoic acid, 2-amino-, methyl est	66842	000134-20-3	9
			er			
			Benzoic acid, 2-amino-, methyl est	66841	000134-20-3	9
			er			
17	22.87	12.52	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			4-Carbomethoxy-2,2,5,5-tetramethyl	26473	050839-39-9	9
			-3-imidazoline-3-oxide-1-oxide			
			Naphthalen-1,4-imine-9-carboxylic	26541	039996-25-3	9
			acid, 1,4-dihydro-, ethyl ester			
			Benzene, 1-chloro-3-(2,2-dicyano e	19798	002972-73-8	9
			thenyl)			
18	23.99	10.69	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1,2,4,5-tetrachloro-3-nit	71672	000117-18-0	15
			ro-			
			Ferrocene, (3-hydroxypropyl)-	32674	012093-88-8	10
			1,1'-Biphenyl, 2,2',5-trimethoxy-	32755	019718-53-7	10

PAH16.M Thu Mar 08 11:40:54 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Liquid_biofuels\tupakanvoc\hannase\
 Data File : 034850.D
 Acq On : 3 Feb 2012 12:55
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPak Tmin
 Misc : Komponenteista valmistettu nauha, paksu
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

Signal : TIC

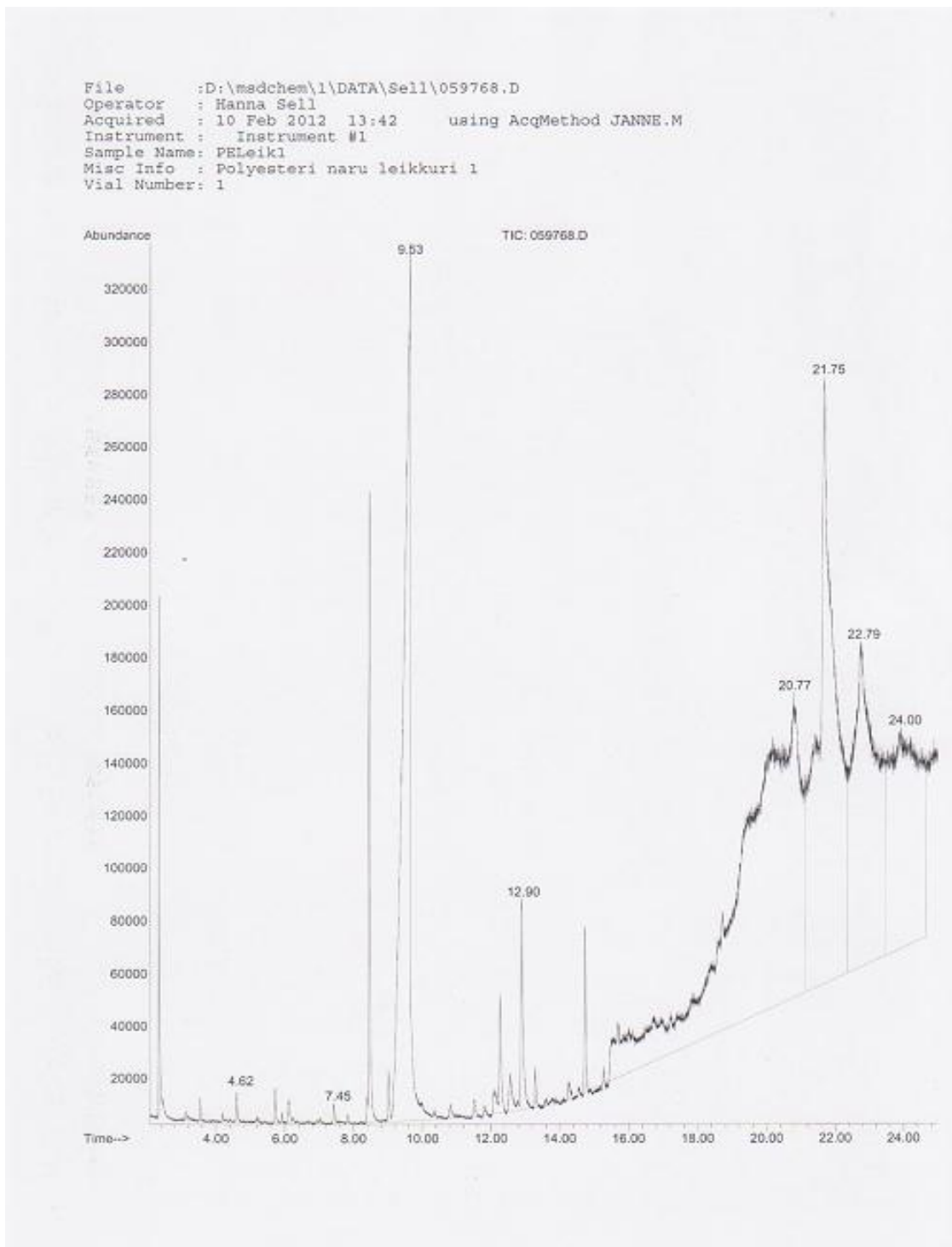
peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.951	147	656	1082	BV 3	36074	2079953	0.54%	0.240%
2	5.780	1082	1301	1374	PV 3	8678	804448	0.21%	0.093%
3	6.440	1374	1534	1857	VV 3	9902	1737348	0.45%	0.201%
4	7.801	1857	2014	2109	VV 3	5578	870288	0.22%	0.101%
5	8.516	2109	2266	2418	VV 3	1647	262927	0.07%	0.030%
6	9.327	2418	2552	2695	PV 3	45189	4444358	1.15%	0.514%
7	10.322	2695	2903	3117	VV 9	6961	1369371	0.35%	0.158%
8	11.402	3117	3284	3521	PV 9	11163	2488491	0.64%	0.288%
9	12.307	3521	3603	3650	PV 9	6843	645515	0.17%	0.075%
10	12.613	3650	3711	3753	PV 9	4329	223830	0.06%	0.026%
11	14.921	3753	4525	4848	PV 4	58033	19031257	4.91%	2.199%
12	16.166	4848	4964	5035	VV 3	107966	16123180	4.16%	1.863%
13	17.368	5035	5388	5463	VV 3	111437	53308335	13.76%	6.159%
14	18.449	5463	5769	5830	VV 5	160165	69427860	17.93%	8.022%
15	19.659	5830	6196	6878	VV 7	301096	387287538	100.00%	44.749%
16	21.834	6878	6963	7200	VV 7	204814	104525743	26.99%	12.077%
17	22.875	7200	7330	7576	VV 7	186056	108338167	27.97%	12.518%
18	23.986	7576	7722	7959	VBA7	152152	92503261	23.88%	10.688%

Sum of corrected areas: 865471870

PAH16.M Thu Mar 08 11:59:20 2012

Kromatogrammit lukuun 8.5

Kromatogrammit InSitu näytteenotosta.



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059768.D
 Acq On : 10 Feb 2012 13:42
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PEleiki
 Misc : Polyesteri naru leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.62	0.35	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Styrene	1947	000100-42-5	90
			1,3,5,7-Cyclooctatetraene	63647	000629-20-9	86
			Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	1948	000694-87-1	83
2	7.45	0.13	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Acetophenone	64535	000098-86-2	80
			Acetophenone	64534	000098-86-2	72
			Acetophenone	3752	000098-86-2	72
3	9.53	14.04	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64648	000065-85-0	91
4	12.90	2.01	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, butyl ester	68609	000136-60-7	78
			1,5-Pentanediol, monobenzoate	24877	055162-82-8	64
			Benzoic acid, cyclohexyl ester	23850	002412-73-9	64
5	20.77	35.85	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1H-Indole, dibromomethyl-	40615	065216-80-0	10
			Triisopropylantimony dichloride	45542	058037-60-8	6
			Manganese, tetracarbonyl(3,3,3-tri- fluoro-2-formyl-1-propenyl=C,O)-, (OC-6-23)-	41068	056271-17-1	4
6	21.75	20.28	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Ethyl benzoylacetate	20688	000094-02-0	33
			Benzoyl chloride	7288	000098-88-4	33
			4-Chloro-3-nitrobenzophenone	71744	056107-02-9	10
7	22.79	14.52	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,1'-Biphenyl, phenoxy-	33143	028984-89-6	64
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	60
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	55
8	24.00	12.83	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1,1',1''-(ethoxymethylidylidene)tris-	40935	000968-39-8	14
			Benzene, 1,1',1''-(methoxymethylidene)tris-	72118	000596-31-6	12
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-dimethylaminophenyl)-, ethyl ester	32732	001886-52-8	10

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059768.D
 Acq On : 10 Feb 2012 13:42
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PSLeik1
 Misc : Polyesteri naru leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

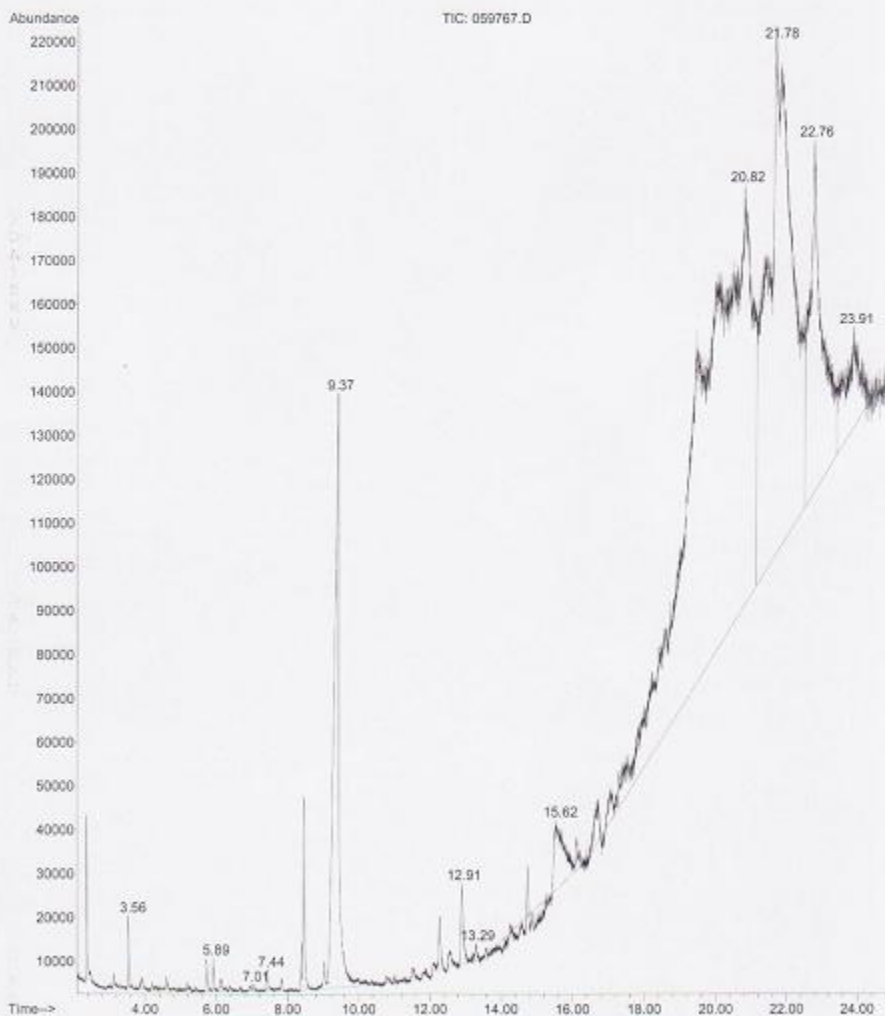
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	4.622	708	893	1670	PV 7	5915	1417600	0.98%	0.352%
2	7.449	1670	1890	2111	PV 6	4546	512108	0.35%	0.127%
3	9.533	2111	2625	3272	PV 4	257855	56566197	39.17%	14.041%
4	12.902	3272	3813	4207	PV 7	51401	8099165	5.61%	2.010%
5	20.767	4207	6587	6718	PV 10	106717	144406217	100.00%	35.845%
6	21.751	6718	6934	7151	VV 3	166465	81705198	56.58%	20.281%
7	22.786	7151	7299	7544	VV 3	113902	58484491	40.50%	14.517%
8	24.002	7544	7728	7959	VBA3	76057	51670260	35.78%	12.826%

Sum of corrected areas: 402861236

PAH16.M Thu Mar 08 12:24:04 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\059767.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 10 Feb 2012 12:16 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: KompOhutLeikl
Misc Info : Kompositelista koostuva naru ohut leikkuri 1
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059767.D
 Acq On : 10 Feb 2012 12:16
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KompOhutleik1
 Misc : Komposiiteista koostuva naru ohut leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.56	0.32	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	70586	000541-05-9	64
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	27918	000541-05-9	42
			1,1,1,3,5,7,7,7-Octamethyltetrasiloxane	39662	000000-00-0	40
2	5.89	0.29	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,3,5,7-Tetraethylbicyclo[3.3.1]nonasiloxane	44149	073420-21-0	22
			Furo[2',3':4,5]thiazolo[3,2-e]purine-8-methanol, 4-amino-6.alpha.,7,8,9a-tetrahydro-7-hydroxy-, [6aS-(6a.alpha.,7.alpha.,8.beta.,9a.alpha.)]-	39537	016667-76-8	22
			7a,9c-(1-iminoethano)phenanthro[4,5-bcd]furan, 4a.alpha.,5-dihydro-3-methoxy-12-methyl-	39622	024695-70-3	18
3	7.01	0.06	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			7-Oxabicyclo[4.2.1]nona-2,4-dien-8-one	6477	028000-13-7	15
			Methyl 10-phenyldecanoate	36305	000000-00-0	12
			2-Propenoic acid, 3-[(phenylmethyl)sulfonyl]-, methyl ester, (2)-	31872	077611-65-5	10
4	7.44	0.14	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzamide	3808	000055-21-0	64
			Acetophenone	64537	000098-86-2	64
			Butanedioic acid, (phenylmethylene)-	24275	005653-88-3	59
5	9.37	7.24	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64650	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
6	12.91	0.69	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, butyl ester	68609	000136-60-7	72
			Benzoic acid, cyclohexyl ester	23850	002412-73-9	56
			n-Propyl benzoate	13436	002315-68-6	56
7	13.29	0.09	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, decyl hexyl ester	53133	025724-58-7	35
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, diisooctyl ester	74177	027554-26-3	17
			Di-n-octyl phthalate	74172	000117-84-0	17
8	15.62	0.81	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Phthalic acid, allyl ethyl ester	30702	033672-94-5	72
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono	70599	000131-70-4	64

			butyl ester			
			2-Acetylbenzoic acid	13357	000577-56-0	64
9	20.82	50.31	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1-nitro-4-phenoxy-	26511	000620-88-2	25
			1,4-Pentadien-3-one, 1,5-diphenyl-	71048	000538-58-9	18
			2-Oxo-5-benzyloxy-6-methyl-4-phenyl-	41507	000000-00-0	12
			1,2,3,4-tetrahydropyrimidine			
10	21.78	27.58	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydro-	36350	000000-00-0	68
			erylene			
			4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydro-	36352	000000-00-0	68
			erylene			
			4-Methyl-6-phenyl-2-(2-hydroxyphen-	36290	000000-00-0	55
			yl)pyrimidine			
11	22.76	9.44	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,1'-Biphenyl, phenoxy-	33143	028984-89-6	64
			2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphe-	71338	013304-12-6	64
			nyl-			
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	60
12	23.91	3.03	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-dim-	71293	001886-52-8	43
			ethylaminophenyl)-, ethyl ester			
			Ethylamine, N-trityl-	40727	007370-34-5	43
			p-Terphenyl-d14	32805	001718-51-0	43

PAH16.M Thu Mar 08 11:32:36 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059767.D
 Acq On : 10 Feb 2012 12:16
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KompohtLeikl
 Misc : Komposiiteista koostuva naru ohut leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

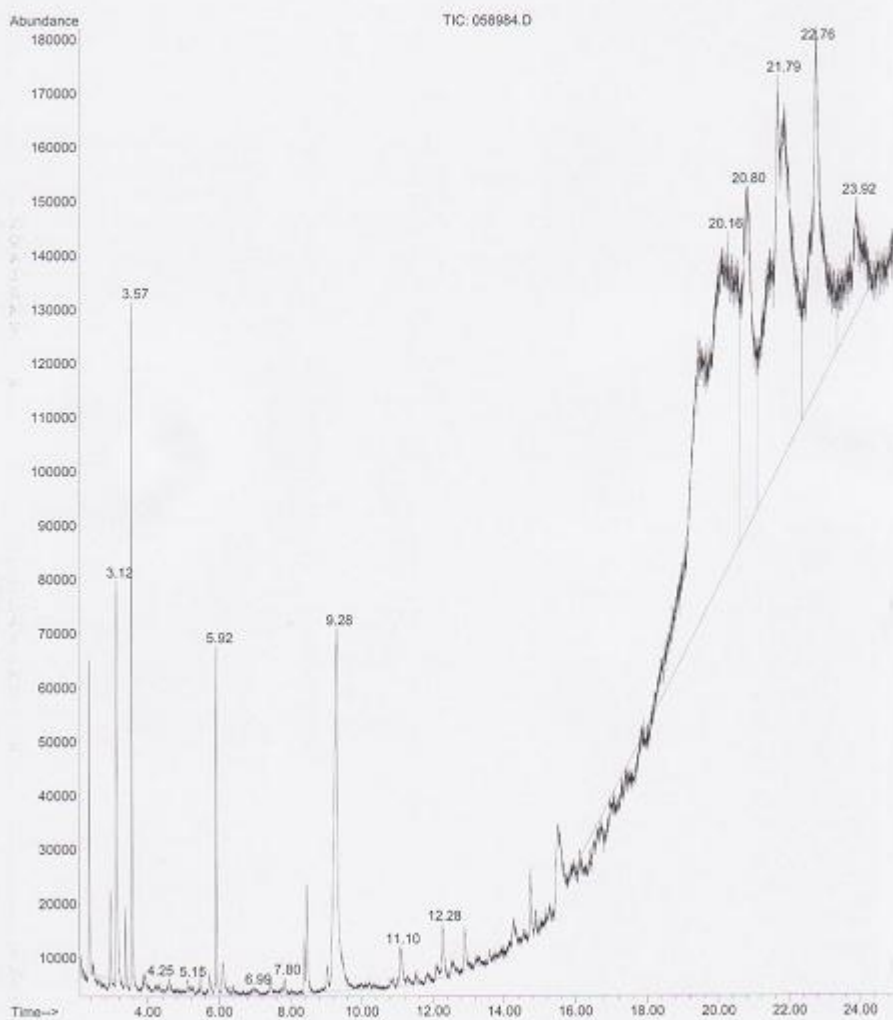
Signal : TIC

peak #	R.T. min.	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.562	468	518	1243	PV 5	5566	674263	0.64%	0.324%
2	5.890	1243	1339	1590	PV 9	3598	601274	0.57%	0.289%
3	7.007	1590	1733	1814	VV 9	806	118274	0.11%	0.057%
4	7.444	1814	1887	2177	PV 4	3029	299244	0.29%	0.144%
5	9.369	2177	2566	2997	PV	130360	15092032	14.40%	7.243%
6	12.913	2997	3816	3895	PV 8	11315	1437378	1.37%	0.690%
7	13.293	3895	3950	4001	VV 8	1999	195179	0.19%	0.094%
8	15.615	4001	4769	5024	PV 10	11656	1677843	1.60%	0.805%
9	20.819	5024	6604	6719	PV 10	88019	104819848	100.00%	50.307%
10	21.777	6719	6942	7199	VV 5	101090	57461453	54.82%	27.578%
11	22.764	7199	7290	7519	VV 5	68633	19663647	18.76%	9.437%
12	23.906	7519	7693	7859	VV 5	16016	6318714	6.03%	3.033%

Sum of corrected areas: 208359150

PAH16.M Thu Mar 08 12:23:47 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\058984.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 10 Feb 2012 12:59 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: KomPakLeik1
Misc Info : Komposiiteista koostuva naru paksu leikkuri 1
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058984.D
 Acq On : 10 Feb 2012 12:59
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KonPakLeik1
 Misc : Komposiiteista koostuva naru paksu leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.12	1.50	D:\DATABASE\NBS75K.L Toluene Toluene Toluene	63030 965 63028	000108-88-3 000108-88-3 000108-88-3	56 40 9
2	3.57	2.22	D:\DATABASE\NBS75K.L Cyclotrisiloxane, hexamethyl- Arsenous acid, tris(trimethylsilyl) ester Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	27918 48300 70586	000541-05-9 055429-29-3 000541-05-9	81 72 49
3	4.25	0.12	D:\DATABASE\NBS75K.L Guanidine, (1,4-benzodioxan-2-ylme- thyl)- Practolol 2H-Pyran, 2-ethoxy-3,4-dihydro-	24539 36921 4920	002165-19-7 006673-35-4 000103-75-3	10 10 10
4	5.15	0.08	D:\DATABASE\NBS75K.L L-Proline, 1-(5-amino-5-carboxypen- tyl)-5-oxo-, (S)- Cyclopentanone, 2-(1-methylpropyl) Pyrrolidin-2-one, 5-pentyl-	35442 7511 11195	038495-84-0 006376-92-7 000000-00-0	10 9 9
5	5.92	1.41	D:\DATABASE\NBS75K.L Cyclotetrasiloxane, octamethyl- Cyclotetrasiloxane, octamethyl- 2-Oxo-4-phenyl-6-(4-chlorophenyl)- 1,2-dihydropyrimidine	41966 72646 39756	000556-67-2 000556-67-2 000000-00-0	78 50 9
6	6.99	0.07	D:\DATABASE\NBS75K.L 1H-Imidazole-2-methanol, 1-methyl- Phenol, 4-fluoro- 7-Azabicyclo[4.1.0]heptane, 2-meth- yl-5-(1-methylethyl)-	2487 63936 10585	017334-08-6 000371-41-5 055854-39-2	11 11 10
7	7.81	0.21	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic acid, methyl ester Benzoic acid, methyl ester Benzoic acid, methyl ester	65685 65686 6479	000093-58-3 000093-58-3 000093-58-3	38 38 32
8	9.27	5.20	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	3903 64651 64647	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	91 91 91
9	11.10	0.58	D:\DATABASE\NBS75K.L Caprolactam 3-Piperidinone, 1-methyl- Aminocaproic Acid	2777 2780 5617	000105-60-2 005519-50-6 000060-32-2	86 78 50
10	12.28	1.06	D:\DATABASE\NBS75K.L			

			Biphenyl	11094	000092-52-4	64
			Naphthalene, 2-ethenyl-	67202	000827-54-3	64
			Biphenyl	67195	000092-52-4	58
11	20.16	34.43	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			trans-5,6-Dihydro-11-methylbenz(A)	38862	082735-48-6	15
			anthracene-5,6-diol			
			Paniculatine	38966	058786-38-2	7
			Triisopropylantimony dichloride	45542	058037-60-8	6
12	20.80	11.24	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benz[a]anthracene, 1,2,3,4,7,12-he	30793	016434-62-1	18
			xahydro-			
			Finaven	50323	043222-48-6	14
			Phenanthrene, 2,4,5,7-tetramethyl-	30783	007396-38-5	12
13	21.79	24.54	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1,2-diphenoxy-	36321	003379-37-1	60
			Benzene, 1,3-diphenoxy-	36322	003379-38-2	58
			Benzene, 1,4-diphenoxy-	71791	003061-36-7	58
14	22.76	12.75	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	90
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	89
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-	33141	013304-07-9	81
			diphenyl-			
15	23.92	4.58	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-dim	32732	001886-52-8	49
			ethylaminophenyl)-, ethyl ester			
			p-Terphenyl-d14	32805	001718-51-0	49
			1,1':3',1''-Terphenyl, 5'-methyl-	32819	000000-00-0	43

PAH16.M Thu Mar 08 10:56:54 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058984.D
 Acq On : 10 Feb 2012 12:59
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPakleik1
 Misc : Komposiiteista koostuva naru paksu leikkuri 1
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

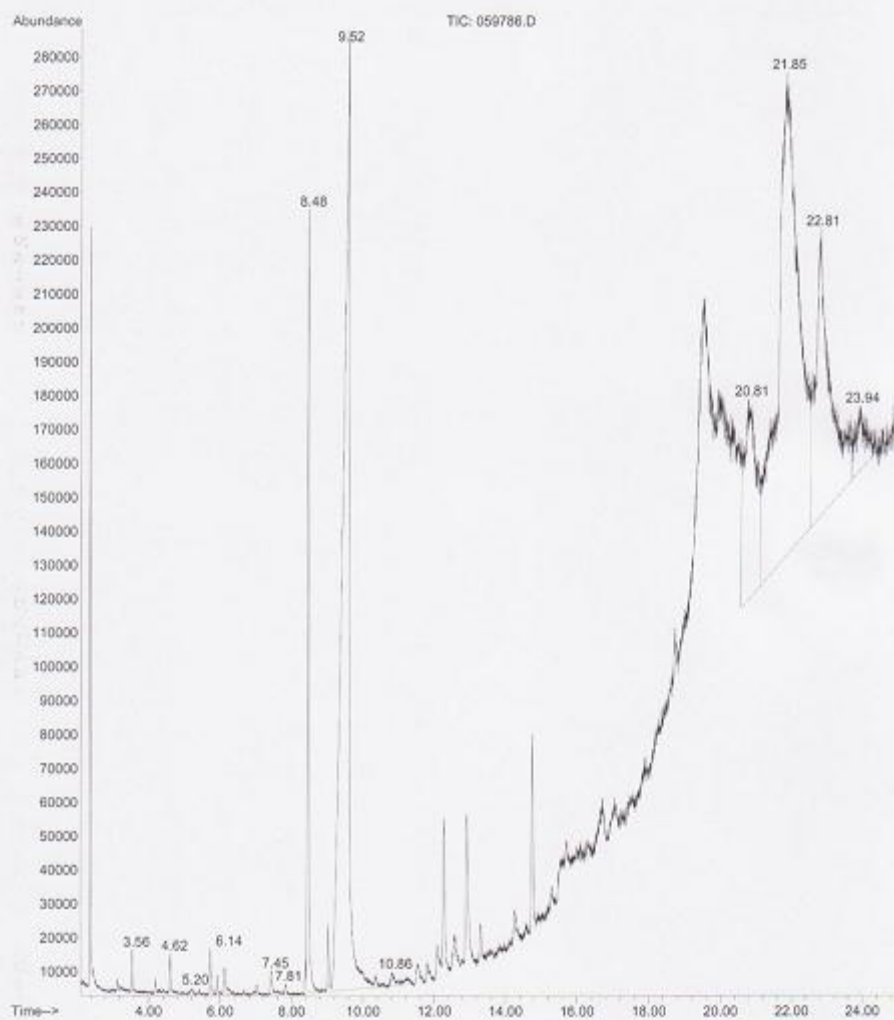
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.125	147	365	441	BV 3	34889	1867563	4.37%	1.504%
2	3.567	441	521	719	VV	58565	2762094	6.46%	2.225%
3	4.253	719	763	994	PV	534	150099	0.35%	0.121%
4	5.152	994	1080	1137	VV	979	103874	0.24%	0.084%
5	5.918	1137	1350	1636	PV 3	27992	1747257	4.09%	1.407%
6	6.987	1636	1727	1813	PV 3	694	85979	0.20%	0.069%
7	7.806	1813	2016	2139	PV 3	1565	255648	0.60%	0.206%
8	9.275	2139	2534	2998	PV 4	47162	6449775	15.09%	5.195%
9	11.104	2998	3179	3406	PV 7	4868	721224	1.69%	0.581%
10	12.281	3406	3594	4020	PV 7	7600	1320544	3.09%	1.064%
11	20.157	4830	6372	6523	PV 7	56157	42750492	100.00%	34.435%
12	20.798	6523	6598	6705	VV 7	61182	13957637	32.65%	11.243%
13	21.788	6705	6947	7146	VV 7	62203	30469782	71.27%	24.543%
14	22.760	7146	7290	7495	VV 7	57214	15825347	37.02%	12.747%
15	23.923	7495	7700	7857	VV 7	14694	5681611	13.29%	4.576%

Sum of corrected areas: 124148926

PAH16.M Thu Mar 08 12:22:37 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\059786.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 10 Feb 2012 11:33 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: PELeik2
Misc Info : Polyesteri naru leikkuri 2
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059786.D
 Acq On : 10 Feb 2012 11:33
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PELeik2
 Misc : Polyesteri naru leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.56	0.18	D:\DATABASE\NBS75K.L Cyclotrisiloxane, hexamethyl- 3,3-Diethoxy-1,1,1,5,5,5-hexamethyltrisiloxane Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	27918 41981 70586	000541-05-9 000000-00-0 000541-05-9	58 45 45
2	4.62	0.22	D:\DATABASE\NBS75K.L 1,3,5,7-Cyclooctatetraene 1,3,5,7-Cyclooctatetraene 1,3,5,7-Cyclooctatetraene	1949 63647 63648	000629-20-9 000629-20-9 000629-20-9	86 86 78
3	5.20	0.07	D:\DATABASE\NBS75K.L 3-Phenyl-4-(N,4-dimethylphenylhydr azono)isoxazol-5-one Bicyclo[4.3.0]nona-3,7-diene, tran s- Acetamide, 2,2,2-trichloro-N-pheny l-	41625 3761 31199	000000-00-0 000000-00-0 002563-97-5	25 10 10
4	6.14	0.68	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, [(1-methyl-2-propenyl)oxy]- Benzene, (cyclohexyloxy)- Carbonic acid, butyl phenyl ester	9353 16775 21258	022509-78-0 002206-38-4 004824-76-4	38 9 7
5	7.45	0.28	D:\DATABASE\NBS75K.L Acetophenone Acetophenone Acetophenone	64537 3752 64536	000098-86-2 000098-86-2 000098-86-2	78 78 78
6	7.81	0.07	D:\DATABASE\NBS75K.L 2,5-Cyclohexadien-1-one, 3,4,4-tri methyl- Benzoic acid, 1-benzoyl-2,2-dimeth ylhydrazide Benzoic acid, 2-(phenylazo)-, ethy l ester	6547 37375 34718	017429-31-1 030859-86-0 018277-91-3	17 14 14
7	8.47	4.70	D:\DATABASE\NBS75K.L 1,2-Propanedione, 1-phenyl- Benzoyl isothiocyanate 1-Propanone, 2-bromo-1-phenyl-	9265 13116 70222	000579-07-7 000532-55-8 002114-00-3	86 78 72
8	9.52	25.76	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	64651 64648 3903	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	91 91 91
9	10.86	0.38	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic acid, 4-methyl- 2H-1,3-Benzoxazine, 3,4-dihydro-6-	6472 31791	000099-94-5 052055-73-9	47 43

			methyl-3-(phenylmethyl)- Benzene, isocyanato-	64501	000103-71-9	30
10	20.81	9.62	D:\DATABASE\NBS75K.L 2H-Pyran-2-one, 6-methyl-3,4-diphe nyl-	36317	032727-38-1	16
			4-Spiro-(N-methylpiperidyl)-2,2,9- trimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-.gamm a.-carboline	42301	000000-00-0	11
			3-Iodoanisole	30560	000766-85-8	10
11	21.85	39.24	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, 1,4-diphenoxy-	36318	003061-36-7	59
			Benzene, 1,4-diphenoxy-	71791	003061-36-7	40
			2,2'-Biphenylylenephosphoric acid methyl ester	36195	076045-15-3	38
12	22.81	16.23	D:\DATABASE\NBS75K.L [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	81
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6- diphenyl-	33141	013304-07-9	81
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	81
13	23.94	2.55	D:\DATABASE\NBS75K.L 2H-Benzimidazol-2-one, 6-chloro-1, 3-dihydro-1-phenyl-	32667	054986-47-9	30
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-dim ethylaminophenyl)-, ethyl ester	32732	001886-52-8	22
			6H-4,7-Methenofuro[3,2-c]oxacyclou ndecin-6-one, 4,8,9,12-tetrahydro- 3,11-dimethyl-, {R-(E)}-	32751	000728-61-0	22

PAH16.M Thu Mar 08 11:21:22 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059786.D
 Acq On : 10 Feb 2012 11:33
 Operator : Hanna Sell
 Sample : PELeix2
 Misc : Polyesteri naru leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

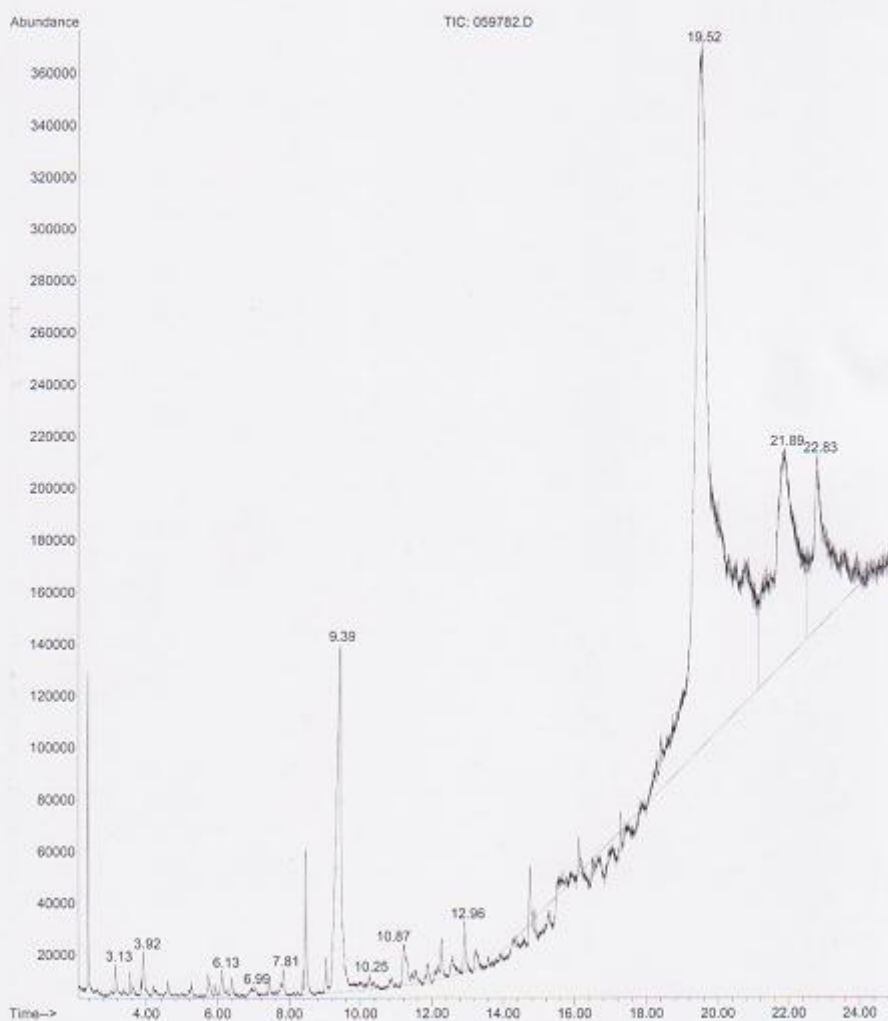
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.557	468	517	842	PV 4	4277	266066	0.46%	0.180%
2	4.623	842	893	1056	PV 3	5818	329088	0.57%	0.223%
3	5.205	1056	1098	1243	VV 3	1013	103289	0.18%	0.070%
4	6.143	1243	1429	1664	PV 6	5329	1004999	1.73%	0.680%
5	7.447	1664	1889	1990	PV 5	4315	419184	0.72%	0.284%
6	7.808	1990	2016	2128	VV 5	1705	110019	0.19%	0.074%
7	8.474	2128	2251	2376	PV 2	106669	6946199	11.98%	4.700%
8	9.523	2376	2621	3032	VV 3	268297	38079701	65.65%	25.765%
9	10.859	3032	3092	3299	VV 3	3057	555059	0.96%	0.376%
10	20.811	6522	6602	6712	VV 3	55045	14219453	24.52%	9.621%
11	21.852	6712	6969	7206	VV 5	135535	57999844	100.00%	39.243%
12	22.810	7206	7307	7619	VV 5	77379	23993051	41.37%	16.234%
13	23.941	7619	7706	7893	VV 5	15673	3770878	6.50%	2.551%

Sum of corrected areas: 147796830

PAH16.M Thu Mar 08 12:25:12 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\059782.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 10 Feb 2012 10:39 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: KomPakLeik2
Misc Info : komposiiteista koostuva nauha Paks leikkuri 2
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchen\1\DATA\Sell\
 Data File : 059782.D
 Acq On : 10 Feb 2012 10:39
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPakLeik2
 Misc : komposiiteista koostuva nauha Paks leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.13	0.18	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Phenylalanine	13709	000063-91-2	9
			Toluene	63030	000108-88-3	9
			2,5-Norbornadiene	63032	000121-46-0	9
2	3.92	0.69	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Furan, 2,5-dimethyl-	63114	000625-86-5	9
			1H-Pyrazole, 3,5-dimethyl-	63106	000067-51-6	9
			1H-Pyrazole, 3,4-dimethyl-	1072	002820-37-3	9
3	6.13	0.70	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Octadecanoic acid, 3-hydroxy-, met	44823	002420-36-2	10
			hyl ester			
			Cyclopentane, 1,1-dichloro-	6829	031038-06-9	9
			1-(2-Pyrazinyl)-4-methyl-2-pentano	17774	000000-00-0	9
4	6.99	0.17	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Decanal	67300	000112-31-2	17
			1,5,7-Octatrien-3-ol, 2,6-dimethyl	10373	029414-56-0	12
			1,3-Cyclohexanedione, 4-propyl-	10817	018456-81-0	10
5	7.81	0.44	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, methyl ester	65686	000093-58-3	47
			Benzoic acid, methyl ester	65685	000093-58-3	27
			Benzenecarbothioic acid	6861	000098-91-9	12
6	9.39	8.22	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64648	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
7	10.25	0.28	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxym	64860	000067-47-0	72
			ethyl)-			
			2-Furancarboxaldehyde, 5-(hydroxym	64861	000067-47-0	72
			ethyl)-			
			3,5-Dimethyl-3-heptene	4628	059643-68-4	64
8	10.87	1.14	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, 3-methyl-	65695	000099-04-7	27
			(2H)1-Benzopyran-3(4H)-one, 6-nitr	40101	000000-00-0	22
			o-2-phenyl-, oxime			
			3,5-Dodecadiyne, 2-methyl-	16814	055638-52-3	16
9	12.96	1.39	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic acid, 2-methylpropyl ester	17241	000120-50-3	50
			n-Propyl benzoate	13436	002315-68-6	50
			Benzoic acid, cyclohexyl ester	69871	002412-73-9	50
10	19.52	56.02	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-	33141	013304-07-9	90

			diphenyl-				
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	87	
			1,1'-Biphenyl, phenoxy-	33143	028984-89-6	87	
11	21.89	19.82	D:\DATABASE\NBS75K.L				
			1,2,3,6,7,8,9,10,11,12-Decahydrobe	36354	092387-50-3	64	
			nzo[E]pyrene				
			Methyl 2.alpha.,3.beta.,23-trihydr	59007	020016-63-1	59	
			oxyurs-12-en-28-oate				
			2,4-Bis(4-aminophenyl)pyrimidine	36271	000000-00-0	53	
12	22.83	10.96	D:\DATABASE\NBS75K.L				
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	89	
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-	33141	013304-07-9	76	
			diphenyl-				
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	76	

PAH16.M Thu Mar 08 11:20:16 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059782.D
 Acq On : 10 Feb 2012 10:39
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomPakLeik2
 Misc : komposiiteista koostuva nauha Paks leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

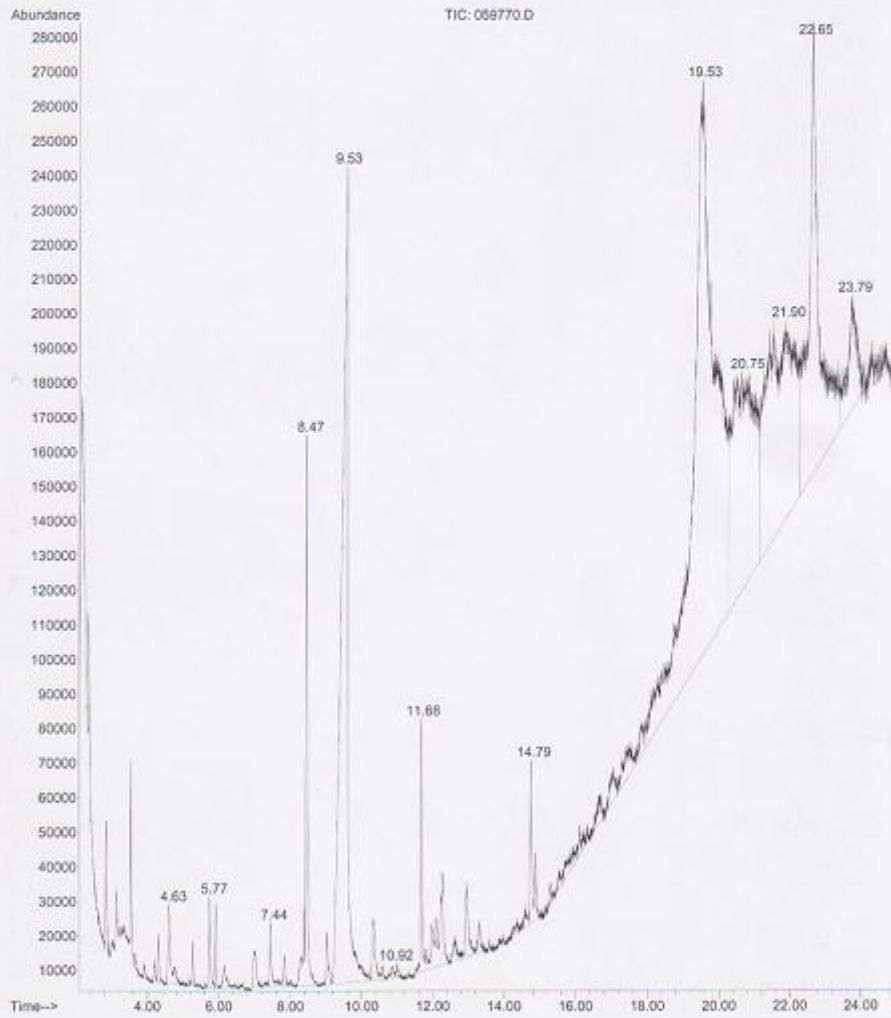
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.134	147	368	602	BV	4317	341440	0.31%	0.176%
2	3.922	602	646	1200	PV 8	8036	1346878	1.24%	0.694%
3	6.128	1200	1424	1643	PV 8	5892	1361016	1.25%	0.701%
4	6.987	1643	1727	1814	PV 8	2150	321206	0.30%	0.166%
5	7.807	1814	2016	2140	VV 10	6239	849475	0.78%	0.438%
6	9.389	2140	2574	2818	PV 4	122529	15953635	14.68%	8.222%
7	10.248	2818	2877	3004	VV 4	3649	538836	0.50%	0.278%
8	10.872	3004	3097	3497	PV 4	2555	2215238	2.04%	1.142%
9	12.964	3497	3835	4074	PV 10	9558	2691885	2.48%	1.387%
10	19.523	4074	6148	6717	PV 4	256740	108696548	100.00%	56.016%
11	21.887	6717	6982	7199	VV 7	76713	38459114	35.38%	19.820%
12	22.832	7199	7315	7759	VV 5	57959	21270173	19.57%	10.961%

Sum of corrected areas: 194045443

PAH16.M Thu Mar 08 12:24:39 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\059770.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 10 Feb 2012 9:56 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name : KomOhutLeik2
Misc Info : komposiiteista koostuva nauha ohut leikkuri 2
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchen\1\DATA\Sell\
 Data File : 059770.D
 Acq On : 10 Feb 2012 9:56
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomOhutLeik2
 Misc : komposiiteista koostuva nauha ohut leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.63	1.07	D:\DATABASE\NBS75K.L Undecanoic acid, methyl ester Butanoic acid, 3-methyl-, methyl ester Undecanoic acid, methyl ester	22934 3290 69717	001731-86-8 000556-24-1 001731-86-8	23 9 9
2	5.77	1.06	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzaldehyde Benzaldehyde Benzaldehyde	63685 63687 63689	000100-52-7 000100-52-7 000100-52-7	87 86 86
3	7.44	0.54	D:\DATABASE\NBS75K.L Acetophenone Acetophenone Acetophenone	64533 3752 64534	000098-86-2 000098-86-2 000098-86-2	90 86 86
4	8.47	2.67	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoyl bromide 1,2-Propanedione, 1-phenyl- Benzoyl isothiocyanate	18672 9265 13116	000618-32-6 000579-07-7 000532-55-8	83 78 78
5	9.53	13.85	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	3903 64651 64650	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	91 91 90
6	10.92	0.18	D:\DATABASE\NBS75K.L 1-Triazene, 1-methyl-3-(4-methylphenyl)- Tricyclo[5.4.0.0.2,8]undec-9-ene, 2,6,6,9-tetramethyl- 6-(p-Tolyl)-5,6,7,8-tetrahydro-4H-1,3,2,6-dioxathiazocine 2-oxide	9459 69964 32122	021124-13-0 005989-08-2 070291-64-4	35 23 22
7	11.68	3.41	D:\DATABASE\NBS75K.L Triacetin Triacetin Silane, methoxytripropyl-	70437 27053 19843	000102-76-1 000102-76-1 017841-46-2	83 83 17
8	14.79	1.24	D:\DATABASE\NBS75K.L 1H-Indole-3-carboxaldehyde, 5-methoxy- Borinic acid, diethyl-, 2-acetylphenyl ester 4-Methyl-2,6-dihydroxyquinoline	16468 23826 16455	010601-19-1 074663-95-9 034982-01-9	50 37 37
9	19.53	33.97	D:\DATABASE\NBS75K.L [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol 1,1'-Biphenyl, phenoxy- [1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33145 33143 33147	002432-11-3 028984-89-6 006093-03-4	91 90 74

10	20.75	12.62	D:\DATABASE\NBS75K.L Chlidanthina, 1,2-dihydro- Benzene, 1-methoxy-2-[(4-methoxyph enyl)methyl]- 6-Phenyl-piperonyl alcohol	41021 000000-00-0 14 29659 030567-87-4 11 29600 000000-00-0 11
11	21.90	14.68	D:\DATABASE\NBS75K.L 2-Methyl-4-phenyl-6-(2-hydroxyphen yl)pyrimidine 7H-Furo[3,2-g][1]benzopyran-7-one, 5-hydroxy-6,9-dimethoxy- Benzene, 1,4-diphenoxy-	36289 000000-00-0 46 36193 035779-45-4 43 71791 003061-36-7 43
12	22.66	12.11	D:\DATABASE\NBS75K.L [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol [1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol 1,1'-Biphenyl, 2-phenoxy-	33145 002432-11-3 96 33147 006093-03-4 94 71339 006738-04-1 74
13	23.79	2.61	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzaldehyde, 2,4-difluoro-5-metho xy-3-trimethylsilyl- 9H-Xanthen-9-one, 1,3,8-trihydroxy 1,1':3',1''-Terphenyl, 5'-methyl-	32632 000000-00-0 53 32659 006052-93-3 53 32819 000000-00-0 53

PAH16.M Thu Mar 08 13:04:23 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059770.D
 Acq On : 10 Feb 2012 9:56
 Operator : Hanna Sell
 Sample : KomOhutLeik2
 Misc : komposiiteista koostuva nauha ohut leikkuri 2
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

Signal : TIC

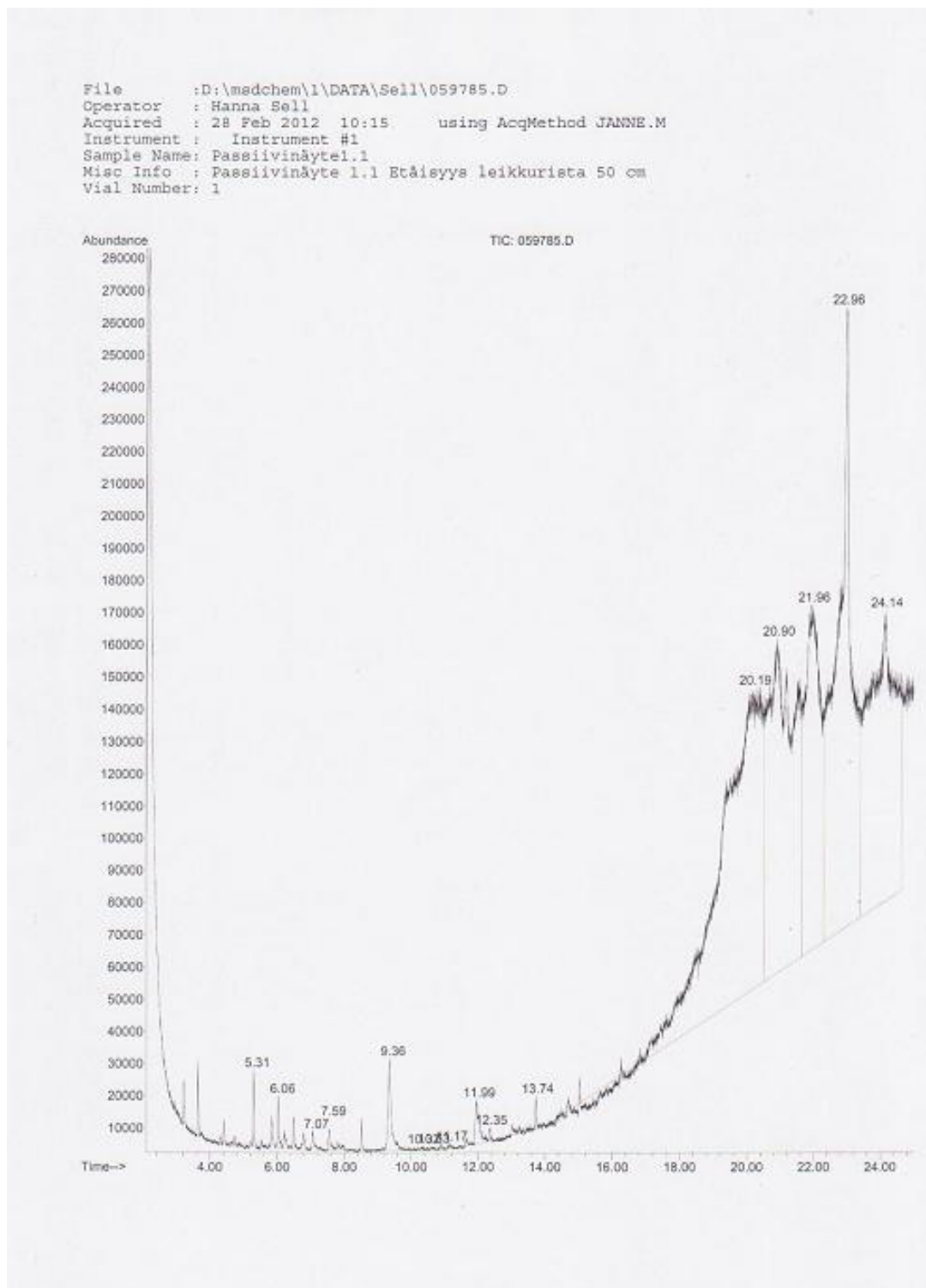
peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	4.631	700	895	1206	PV 9	16930	2363314	3.14%	1.068%
2	5.771	1206	1297	1813	PV 10	12955	2344592	3.12%	1.060%
3	7.444	1813	1887	2113	VV 2	10677	1188613	1.58%	0.537%
4	8.470	2113	2249	2374	PV 2	76029	5910381	7.86%	2.671%
5	9.531	2374	2623	3034	PV 3	214991	30641904	40.77%	13.850%
6	10.920	3034	3113	3211	VV 3	1742	387292	0.52%	0.175%
7	11.693	3211	3382	4089	PV 10	41555	7541817	10.03%	3.409%
8	14.788	4089	4477	4583	PV 5	28802	2744725	3.65%	1.241%
9	19.531	4583	6150	6411	PV 3	158296	75162075	100.00%	33.973%
10	20.753	6411	6581	6718	VV 3	56020	27912544	37.14%	12.616%
11	21.905	6718	6987	7119	VV 3	52223	32469439	43.20%	14.676%
12	22.656	7119	7252	7526	VV 6	113548	26794682	35.65%	12.111%
13	23.787	7526	7651	7786	VV 6	26561	5780046	7.69%	2.613%

Sum of corrected areas: 221241424

PAH16.M Thu Mar 08 12:24:23 2012

Kromatogrammit lukuun 8.6

Kromatogrammit passiivinäytteistä.



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059785.D
 Acq On : 28 Feb 2012 10:15
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte1.1
 Misc : Passiivinäyte 1.1 Etäisyys leikkurista 50 cm
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	5.31	0.17	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			.alpha.-Pinene	65808	000080-56-8	94
			.alpha.-Pinene	65809	000080-56-8	90
			.alpha.-Pinene	6680	000080-56-8	90
2	6.06	0.51	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			6,7-Benzo-phenothiazine-5,5-dioxid	39602	000000-00-0	43
			Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	72646	000556-67-2	42
			1,2-Dihydroanthra[1,2-d]thiazole-2,6,11-trione	39586	000000-00-0	37
3	7.07	0.10	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzyl Alcohol	2119	000100-51-6	87
			Benzyl Alcohol	63782	000100-51-6	86
			Phenol, 3-methyl-	2118	000108-39-4	78
4	7.59	0.25	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Acetophenone	64537	000098-86-2	72
			Acetophenone	64538	000098-86-2	72
			Acetophenone	64533	000098-86-2	72
5	9.36	0.68	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	87
			Benzoic Acid	64648	000065-85-0	86
6	10.33	0.01	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2-Pyridineacetaldehyde, [2-(2-pyridinyl)ethylidene]hydrazone	31524	056114-46-6	46
			Pyrazine, methoxy-, 1-oxide	4402	032046-05-2	38
			Pyrolidine, 1,5-dimethyl-3,3-diphenyl-2-ethylidene-	72191	030223-73-5	37
7	10.63	0.01	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methyl-ethyl)-, (R)-	7048	001195-31-9	18
			Bicyclo[4.1.0]heptane, 3,7,7-trimethyl-, [1S-(1.alpha.,3.beta.,6.alpha.)]-	7053	002778-68-9	18
			4(1H)-Pyrimidinone, 2-(butylthio)-	18725	054774-97-9	14
8	11.17	0.04	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1H-Indole, 1-(trimethylsilyl)-5-[[trimethylsilyl]oxy]-	72181	055712-57-7	7
			Phthalylglycine, trimethylsilyl ester	38925	000000-00-0	7
			Diselenide, dicyclopentyl-	42329	062212-26-4	7
9	11.99	0.41	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Pyridine, 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)-, (S)-	67681	000054-11-5	90

			Pyridine, 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)-, (S)-	12954	000054-11-5	87
			Pyridine, 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)-, 1-oxide, (S)-	68600	002820-55-5	53
10	12.35	0.05	D:\DATABASE\NBS75K.L Hexatriacontane	74636	000630-06-8	64
			Triaccontane	55461	000638-68-6	64
			Dotriacontane	74491	000544-85-4	64
11	13.74	0.17	D:\DATABASE\NBS75K.L Octadecane	71559	000593-45-3	95
			Hexatriacontane	74636	000630-06-8	87
			Pentadecane	70275	000629-62-9	87
12	20.19	27.24	D:\DATABASE\NBS75K.L 1-(3-Chloropropyl)-4-dimethylamino-6-methylthio-1,3,5-triazin-2(1H)-one	36119	074483-59-3	38
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-methylphenyl)-, ethyl ester	26543	018300-87-3	25
			N-Methylthiabenzazole	26497	032594-70-0	15
13	20.90	19.56	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, pentafluoro[(2-methylphenoxy)methyl]-	40801	000000-00-0	12
			N-(2,3,4,5,6-Pentafluorobenzyl)morpholine	37105	000000-00-0	11
			Benzenamine, N-(phenylmethylene)-	18124	000538-51-2	10
14	21.96	12.07	D:\DATABASE\NBS75K.L 2,3-Dimethyl-3H-phenanthro[3,4-D]imidazol-10-ol	36299	098033-25-1	55
			Benzene, 1,2-diphenoxy-(2-Methyl-3-chromonyl)methyl-triphenylphosphonium bromide	71792	003379-37-1	43
				59314	000000-00-0	43
15	22.97	20.79	D:\DATABASE\NBS75K.L [1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	95
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	94
			1,1'-Biphenyl, phenoxy-	33143	028984-89-6	93
16	24.14	17.94	D:\DATABASE\NBS75K.L 9H-Xanthen-9-one, 1,3,8-trihydroxy	32659	006052-93-3	47
			1,1'-Biphenyl, 2,2',5-trimethoxy-	32755	019718-53-7	40
			2-Propenoic acid, 2-cyano-3-(4-dimethylaminophenyl)-, ethyl ester	32732	001886-52-8	40

PAK16.N Thu Mar 08 11:34:20 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059785.D
 Acq On : 28 Feb 2012 10:15
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinkäytel.1
 Misc : Passiivinäyte 1.1 Etäisyys leikkurista 50 cm
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

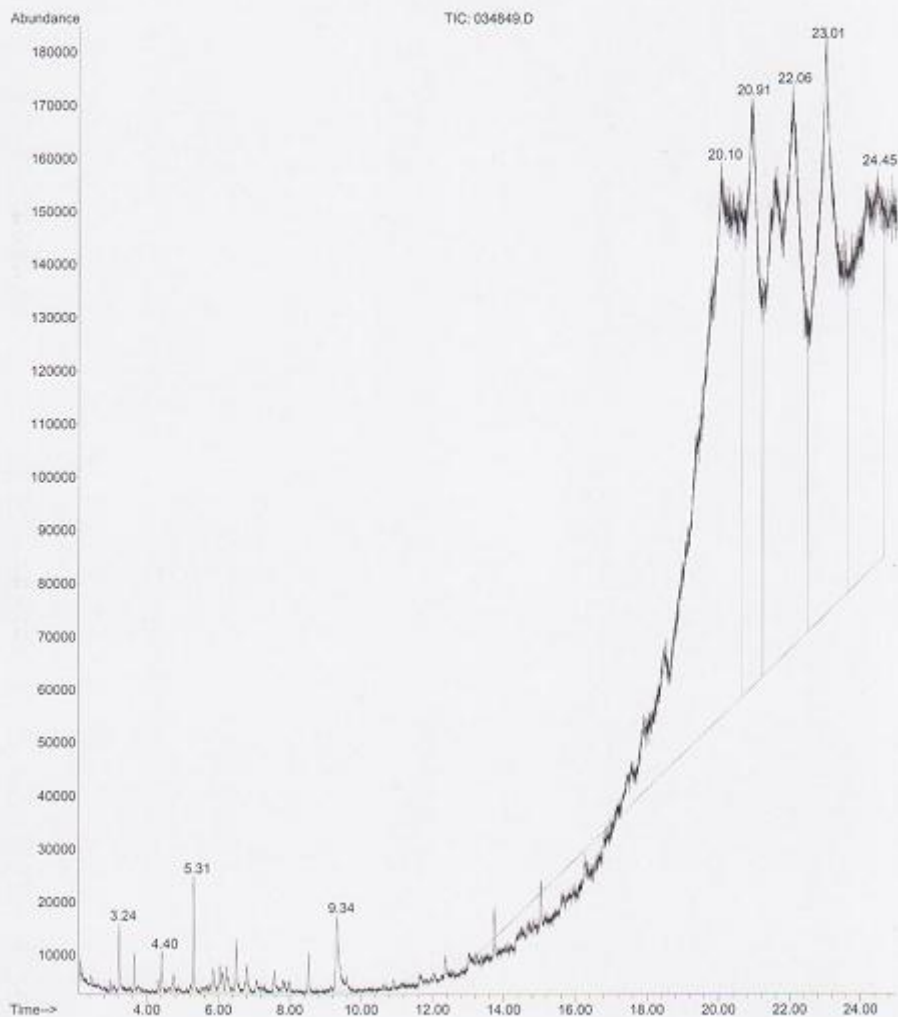
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	5.309	789	1135	1260	BV 5	12047	483853	0.62%	0.169%
2	6.064	1260	1401	1723	PV 5	6702	1464018	1.88%	0.512%
3	7.073	1723	1757	1884	VV 8	3563	275604	0.35%	0.096%
4	7.586	1884	1938	2349	PV 9	3830	706368	0.91%	0.247%
5	9.359	2349	2563	2845	PV 2	19034	1935818	2.48%	0.677%
6	10.325	2845	2904	2979	PV 2	358	37361	0.05%	0.013%
7	10.634	2979	3013	3054	VV 2	357	25181	0.03%	0.009%
8	11.168	3054	3201	3261	PV 2	947	104966	0.13%	0.037%
9	11.993	3261	3492	3593	PV 6	11315	1177348	1.51%	0.411%
10	12.347	3593	3617	3673	VV 6	2659	147339	0.19%	0.051%
11	13.739	3673	4108	4207	PV 8	4286	493792	0.63%	0.173%
12	20.193	4207	6384	6499	PV 8	88522	77953581	100.00%	27.242%
13	20.899	6499	6633	6896	VV 6	99615	55980347	71.81%	19.563%
14	21.957	6896	7006	7129	VV 6	102840	34528267	44.29%	12.067%
15	22.966	7129	7362	7520	VV 5	172241	59494781	76.32%	20.792%
16	24.143	7520	7777	7959	VBA5	85741	51339956	65.86%	17.942%

Sum of corrected areas: 286148578

PAH16.M Thu Mar 08 12:24:57 2012

File :D:\medchem\1\DATA\Sell\034849.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 28 Feb 2012 10:58 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: Passiivinäyte1.2
Misc Info : Passiivinäyte 1.2 Etäisyys leikkurista 50 cm
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 034849.D
 Acq On : 28 Feb 2012 10:58
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäytel.2
 Misc : Passiivinäyte 1.2 Etäisyys leikkurista 50 cm
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.24	0.12	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Toluene	965	000108-88-3	9
			Cyclobutene, 2-propenylidene-	964	052097-85-5	9
			Tetracyclo[3.2.0.0.02,7.04,6]heptane	963	000278-06-8	9
2	4.40	0.17	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1,2-dimethyl-	63706	000095-47-6	80
			Benzene, 1,3-dimethyl-	63696	000108-38-3	80
			Benzene, 1,3-dimethyl-	2027	000108-38-3	80
3	5.31	0.94	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			.alpha.-Pinene	65808	000080-56-8	87
			4-Carene, (1S,3S,6R)-(-)-	6682	005208-50-4	86
			Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 3,6,6-trimethyl-	6692	004889-83-2	80
4	9.34	0.41	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	87
			Benzoic Acid	64650	000065-85-0	86
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	86
5	20.10	29.30	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			trans-5,6-Dihydro-11-methylbenz(A)anthracene-5,6-diol	38862	082735-48-6	30
			Olean-12-ene-3,16,21,22,23,28-hexol, (3.beta.,4.beta.,16.alpha.,21.beta.,22.alpha.)-	59124	020853-07-0	16
			2(3H)-Benzofuranone, 3-[3-(dimethylamino)-2-propenylidene]-	26545	056771-83-6	11
6	20.91	11.70	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			2,4,5-Trimethoxyamphetamine	28879	000000-00-0	11
			2,4,5-Trimethoxyamphetamine	28874	000000-00-0	11
			4,5-Dihydroxyimino-4,5,6,7-tetrahydrobenzofurazan	18164	000000-00-0	10
7	22.06	23.48	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			10-Hydroxymitriptyline N-oxide	44120	067309-35-7	10
			7-Hydroxy-4-methoxyfuro[2,3-B]quinoline	26512	020643-71-4	10
			Isoxazole, 3,4-dimethyl-5-(2,4,6-trimethylphenyl)-	26556	061314-49-6	9
8	23.01	18.61	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-2'-ol	33145	002432-11-3	89
			1,1'-Biphenyl, 2-phenoxy-	71339	006738-04-1	64
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	58
9	24.45	15.26	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,2-Naphthalenedione, 4-[(4-methylphenyl)amino]-	36431	069085-39-8	20

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 034849.D
 Acq On : 28 Feb 2012 10:58
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte1.2
 Misc : Passiivinäyte 1.2 Etäisyys leikkurista 50 cm
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

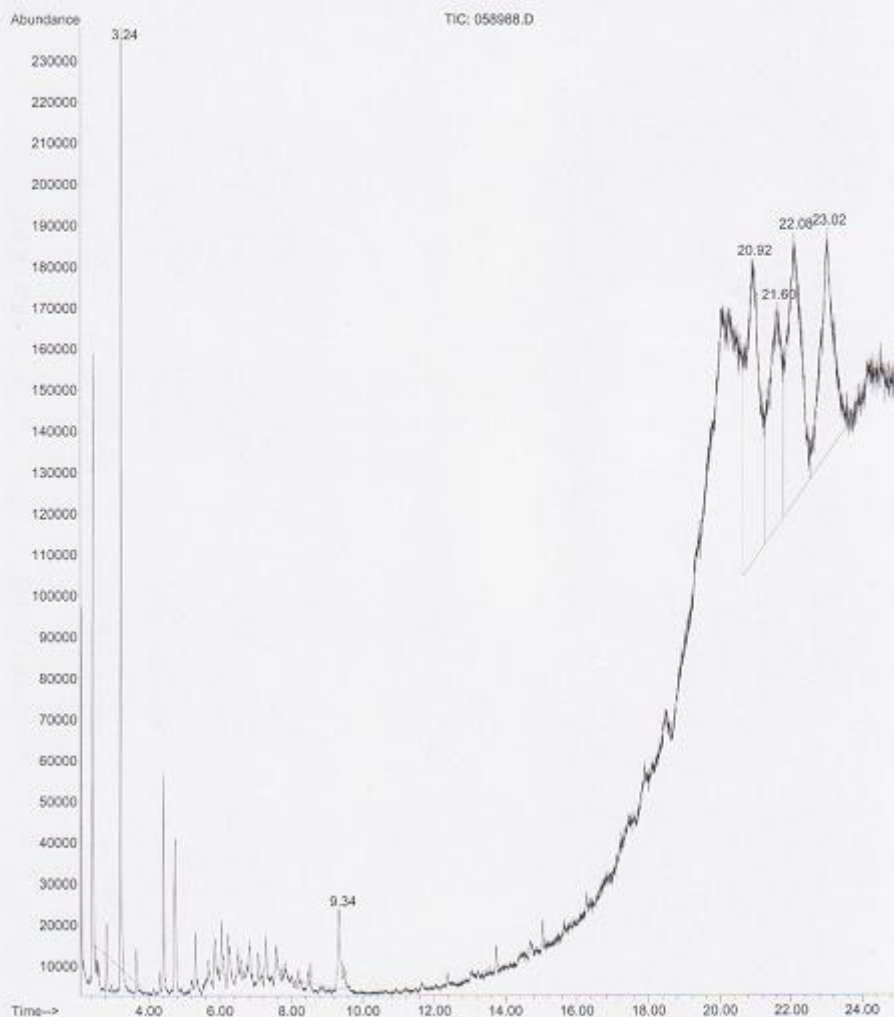
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.237	147	404	707	BV 4	3524	320088	0.41%	0.121%
2	4.399	707	814	1082	PV 6	3795	462417	0.60%	0.175%
3	5.309	1082	1135	2350	VV 6	11496	2503143	3.22%	0.945%
4	9.341	2350	2557	2747	PV 4	11314	1073675	1.38%	0.405%
5	20.102	3724	6352	6547	PV 4	98441	77635545	100.00%	29.302%
6	20.913	6547	6638	6751	VV 4	108274	31002582	39.93%	11.702%
7	22.064	6751	7044	7203	VV 4	99986	62218028	80.14%	23.483%
8	23.008	7203	7377	7599	VV 4	101038	49300075	63.50%	18.608%
9	24.454	7599	7887	7959	VBA4	70208	40429757	52.08%	15.260%

Sum of corrected areas: 264945309

PAH16.M Thu Mar 08 12:21:42 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\058988.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 28 Feb 2012 11:44 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: Passiivinäyte2.1
Misc Info : Passiivinäyte 2.1 Etäisyys leikkurista 6 m
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058988.D
 Acq On : 28 Feb 2012 11:44
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte2.1
 Misc : Passiivinäyte 2.1 Etäisyys leikkurista 6 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.24	2.15	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Cyclobutene, 2-propenylidene-	964	052097-85-5	56
			Toluene	965	000108-88-3	56
			2,5-Norbornadiene	63032	000121-46-0	9
2	9.34	1.28	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64651	000065-85-0	91
			Benzoic Acid	64648	000065-85-0	91
3	20.92	28.75	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzenesulfonic acid, 2,4,6-trinitro-	41585	002508-19-2	35
			Cyclohexene, 4-(dimethoxymethyl)-1-methyl-	15263	007560-66-9	27
			1,1'-Biphenyl, tetrachloro-	41095	012674-11-2	25
4	21.60	20.32	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,1'-Biphenyl, tetrachloro-	41095	012674-11-2	27
			Biphenyl, tetrachloro-	41092	012672-29-6	27
			1,2,3,4,5,6-Hexahydrochrysene	30792	002091-91-0	25
5	22.08	26.49	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydro-erylene	36352	000000-00-0	50
			4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydro-erylene	36350	000000-00-0	43
			3b,4,5,6,7,7a,9,10,11,12-Decahydrobenzo[b]fluoranthene	36351	000000-00-0	32
6	23.02	21.01	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			1,1'-Biphenyl, 2-phenoxy-	71339	006738-04-1	25
			1H-Inden-1-one, 2-(2,3-dihydro-1H-inden-1-ylidene)-2,3-dihydro-	33144	005706-06-9	22
			2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphenyl-	71338	013304-12-6	20

PAH16.M Thu Mar 08 11:35:17 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058988.D
 Acq On : 28 Feb 2012 11:44
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte2.1
 Misc : Passiivinäyte 2.1 Etäisyys leikkurista 6 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

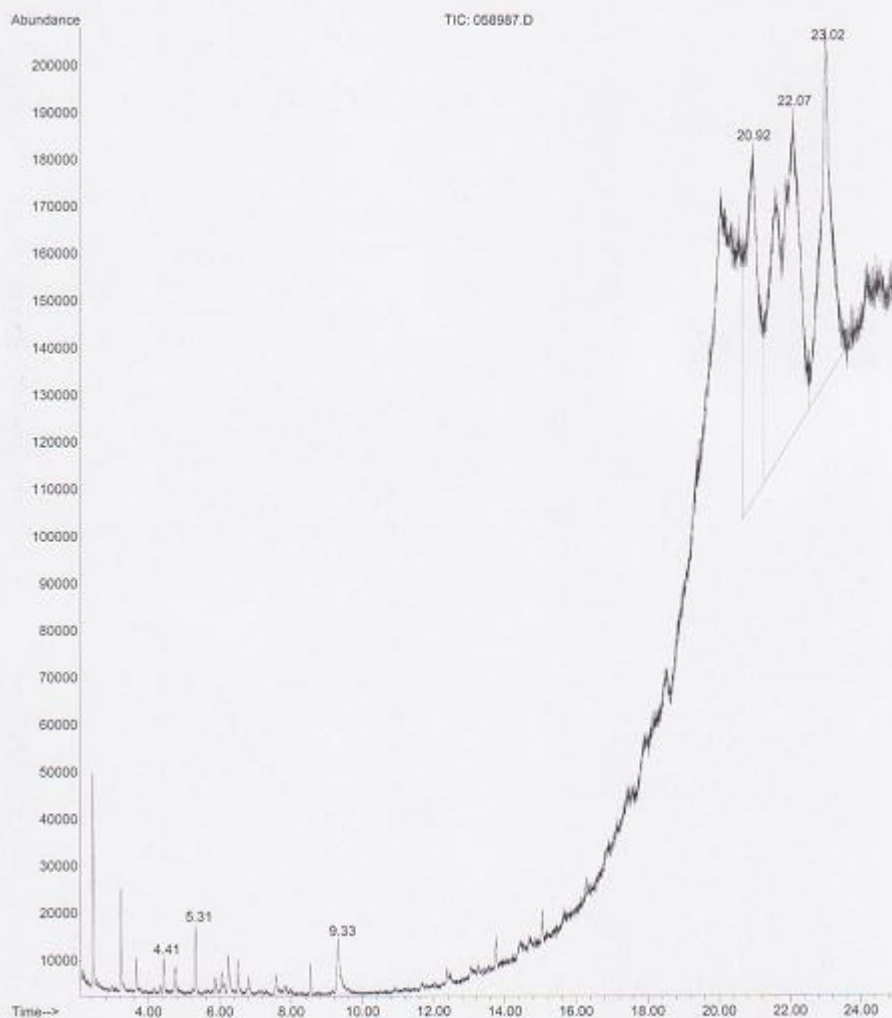
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.239	147	405	676	BV	65199	1403315	7.49%	2.153%
2	9.341	2124	2557	2842	BV 9	14977	836199	4.46%	1.283%
3	20.919	6545	6640	6755	VV 9	70954	18734270	100.00%	28.745%
4	21.602	6755	6881	6945	VV 9	50092	13242409	70.69%	20.319%
5	22.084	6945	7051	7211	VV 9	60091	17265842	92.16%	26.492%
6	23.020	7211	7381	7614	VV 9	48597	13691845	73.08%	21.008%

Sum of corrected areas: 65173880

PAH16.M Thu Mar 08 12:23:09 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\058987.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 28 Feb 2012 12:27 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: Passiivinäyte2.2
Misc Info : Passiivinäyte 2.2 Etäisyys leikkurista 6 m
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058987.D
 Acq On : 28 Feb 2012 12:27
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte2.2
 Misc : Passiivinäyte 2.2 Etäisyys leikkurista 6 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.41	0.66	D:\DATABASE\NBS75K.L p-Xylene	63703	000106-42-3	72
			p-Xylene	2032	000106-42-3	64
			Ethylbenzene	63693	000100-41-4	64
2	5.31	2.44	D:\DATABASE\NBS75K.L .alpha.-Pinene	65809	000080-56-8	91
			Tricyclo[2.2.1.0 ^{2,6}]heptane, 1,3,3-trimethyl-	65744	000488-97-1	90
			.alpha.-Pinene	65808	000080-56-8	90
3	9.33	1.46	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid	64651	000065-85-0	90
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	90
			Benzoic Acid	64647	000065-85-0	86
4	20.92	27.40	D:\DATABASE\NBS75K.L Ethyl 2-(4'-methoxy-1,1'-biphenyl-4-yl)-2-hydroxypropanoate	42775	000000-00-0	9
			Carbamodithioic acid, dipropyl-, propyl ester	27327	019047-79-1	9
			Imipramine Hydrochloride	45081	000113-52-0	9
5	22.07	45.99	D:\DATABASE\NBS75K.L 4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydroperylene	36352	000000-00-0	15
			4,5,6,7,8,9,9a,10,11,12-Decahydroperylene	36350	000000-00-0	15
			9H-Thioxanthen-9-one, 2-methyl-	29151	015774-82-0	11
6	23.02	22.05	D:\DATABASE\NBS75K.L 2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphenyl-	33142	013304-12-6	78
			2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphenyl-	71338	013304-12-6	60
			1,1'-Biphenyl, phenoxy-	33143	028984-89-6	60

PAR16.M Thu Mar 08 11:35:37 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 058987.D
 Acq On : 28 Feb 2012 12:27
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte2.2
 Misc : Passiivinäyte 2.2 Etäisyys leikkurista 6 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

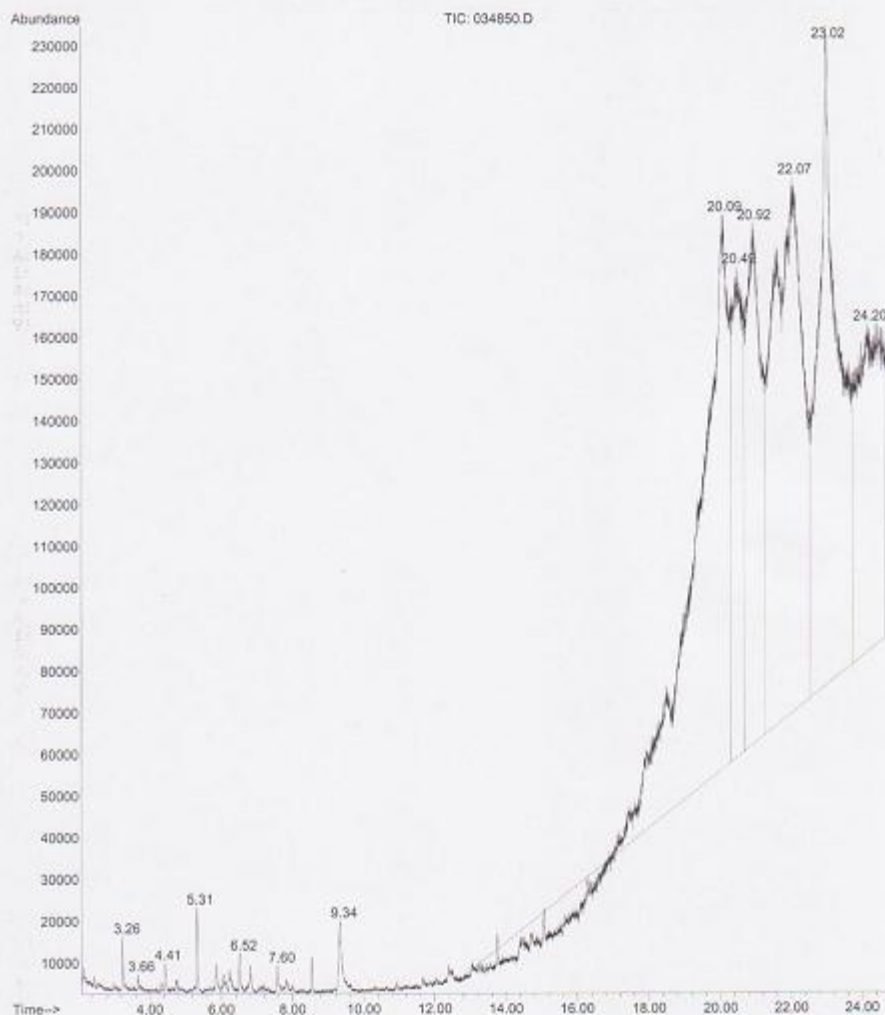
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	4.408	708	817	1046	PV 6	3218	471716	1.43%	0.657%
2	5.309	1046	1135	2231	VV 6	7219	1752110	5.31%	2.442%
3	9.333	2231	2554	2794	PV 7	9237	1044262	3.16%	1.455%
4	20.921	6545	6641	6757	VV 7	70411	19664453	59.58%	27.402%
5	22.070	6757	7046	7213	VV 7	63246	33006207	100.00%	45.993%
6	23.017	7213	7380	7594	VV 7	66035	15824818	47.94%	22.051%

Sum of corrected areas: 71763567

PAH16.M Thu Mar 08 12:22:52 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\034850.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 28 Feb 2012 13:11 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: Passiivinäyte3.1
Misc Info : Passiivinäyte 3.1 Etäisyys leikkurista 9 m
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\madchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 034850.D
 Acq On : 28 Feb 2012 13:11
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte3.1
 Misc : Passiivinäyte 3.1 Etäisyys leikkurista 9 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.26	0.07	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, (propoxymethyl)-	9834	000937-61-1	9
			Hydrazinecarbothioamide	63009	000079-19-6	9
			Benzenemethanesulfonamide	15416	004563-33-1	9
2	3.66	0.03	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	70586	000541-05-9	56
			2-Methyl-7-phenylindole	24652	000000-00-0	50
			1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane	27934	001873-88-7	45
3	4.41	0.13	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1,3-dimethyl-	2027	000108-38-3	74
			Benzene, 1,3-dimethyl-p-Xylene	63695	000108-38-3	72
				63700	000106-42-3	64
4	5.31	0.16	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			.alpha.-Pinene	65808	000080-56-8	94
			Tricyclo[2.2.1.0 ^{2,6}]heptane, 1,3,3-trimethyl-.alpha.-Pinene	65744	000488-97-1	91
				65809	000080-56-8	91
5	6.53	0.47	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			.alpha.-Pinene	65808	000080-56-8	91
			3-Carene	65796	013466-78-9	90
			Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 3,6,6-trimethyl-	6692	004889-83-2	87
6	7.59	0.16	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Acetophenone	64538	000098-86-2	72
			Benzene, 1,2,3-trimethyl-Acetophenone	64574	000526-73-8	72
				3752	000098-86-2	64
7	9.34	0.44	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzoic Acid	3903	000065-85-0	90
			Benzoic Acid	64647	000065-85-0	87
				64650	000065-85-0	80
8	20.09	23.15	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Benzene, 1-nitro-4-phenoxy-	26511	000620-88-2	18
			2(3H)-Benzofuranone, 3-[3-(dimethylamino)-2-propenylidene]-	26545	056771-83-6	14
			N-Methylthiabendazole	26497	032594-70-0	14
9	20.49	7.61	D:\DATABASE\NBS75K.L			
			Sulfoximine, S-methyl-S-phenyl-N-(2-pyridinylcarbonyl)-	35830	054090-93-6	10
			Phthalazine, 1-phenyl-	24390	007188-22-9	9
			1,2-Bis(trimethylsilyl)-4-methylbenzene	31078	101300-64-5	9

10	20.92	11.56	D:\DATABASE\NBS75K.L 5-(2-Oxoheptadecyl) methanesulphon othioate	50726	076078-83-6	10
			Pyrimidine, 2-dimethylamino-4-(4-fluorophenyl)-	26929	083858-07-5	10
			2-Dimethylamino-5-(4-fluorophenyl)pyrimidine	26928	000000-00-0	10
11	22.07	24.28	D:\DATABASE\NBS75K.L 4-Nitro-3-carbethoxy-1,2-dimethylindole	36200	000000-00-0	15
			Quinaldic acid, 1,4-dihydro-6-nitro-4-oxo-, ethyl ester	36163	030093-88-0	11
			Cobalt, cyclopentadienyl(1-methyl)-1,2-dithiolatoethene	29432	000000-00-0	11
12	23.02	19.77	D:\DATABASE\NBS75K.L 2,5-Cyclohexadien-1-one, 4,4-diphenyl-	71338	013304-12-6	78
			Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6-diphenyl-	33141	013304-07-9	59
			[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol	33147	006093-03-4	58
13	24.20	12.18	D:\DATABASE\NBS75K.L dl-Xylitol, cyclic 2,3-(phenylboronate) 1,4,5-triacetate	50717	074793-44-5	16
			Benzaldehyde, 2,4-difluoro-5-methoxy-3-trimethylsilyl-	32632	000000-00-0	10
			Ferrocene, (3-hydroxypropyl)-	32674	012093-88-8	10

PAR16.M Thu Mar 08 11:38:18 2012

Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 034850.D
 Acq On : 28 Feb 2012 13:11
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte3.1
 Misc : Passiivinäyte 3.1 Etäisyys leikkurista 9 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

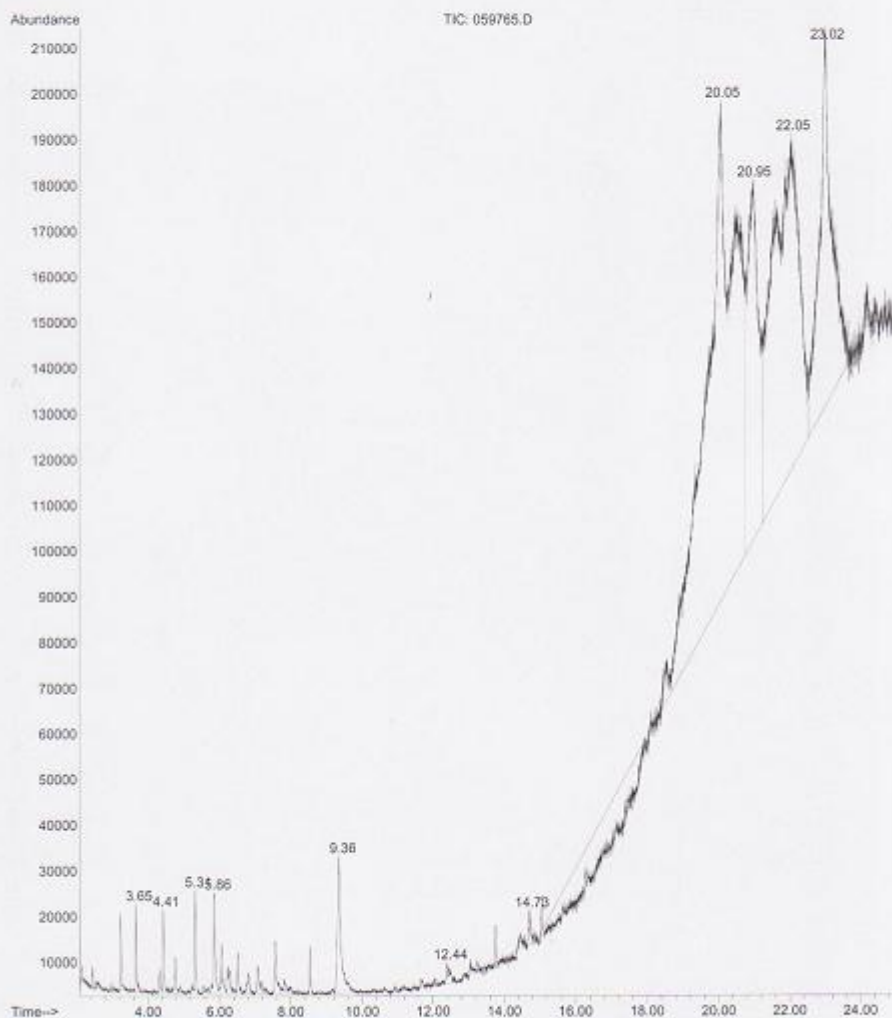
Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.262	147	413	490	BV 3	4827	209166	0.27%	0.066%
2	3.662	490	554	708	PV 6	1354	103315	0.13%	0.033%
3	4.413	708	819	1045	PV 7	2521	397853	0.52%	0.125%
4	5.312	1045	1136	1213	VV 5	9970	522769	0.68%	0.164%
5	6.526	1213	1564	1874	VV 5	5338	1484978	1.92%	0.467%
6	7.595	1874	1941	2231	PV 7	4188	508077	0.66%	0.160%
7	9.341	2231	2557	2748	PV 6	13232	1413386	1.83%	0.445%
8	20.088	3736	6347	6424	PV 6	128405	73569064	95.34%	23.147%
9	20.488	6424	6488	6555	VV 6	112321	24175437	31.33%	7.606%
10	20.924	6555	6642	6761	VV 6	119767	36725930	47.60%	11.555%
11	22.067	6761	7045	7214	VV 6	123637	77162119	100.00%	24.278%
12	23.817	7214	7380	7636	VV 6	145951	62842150	81.44%	19.772%
13	24.199	7636	7797	7959	VBA6	74704	38713520	50.17%	12.181%

Sum of corrected areas: 317827766

PAH16.M Thu Mar 08 12:22:16 2012

File :D:\msdchem\1\DATA\Sell\059765.D
Operator : Hanna Sell
Acquired : 28 Feb 2012 13:54 using AcqMethod JANNE.M
Instrument : Instrument #1
Sample Name: Passiivinäyte3.2
Misc Info : Passiivinäyte 3.2 Etäisyys leikkurista 9 m
Vial Number: 1



Library Search Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059765.D
 Acq On : 28 Feb 2012 13:54
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte3.2
 Misc : Passiivinäyte 3.2 Etäisyys leikkurista 9 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\NBS75K.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus start of peak
 Integration Events: Chemstation Integrator - AUTOINT2.E

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.66	0.59	D:\DATABASE\NBS75K.L Cyclotrisiloxane, hexamethyl- Tetraasiloxane, decamethyl- Arsenous acid, tris(trimethylsilyl) ester	27918 72967 48300	000541-05-9 000141-62-8 055429-29-3	90 72 64
2	4.41	0.69	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzene, 1,3-dimethyl- Benzene, 1,2-dimethyl- Benzene, 1,2-dimethyl-	63697 63707 2033	000108-38-3 000095-47-6 000095-47-6	90 87 86
3	5.31	0.46	D:\DATABASE\NBS75K.L .alpha.-Pinene Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 3,6,6-tr imethyl- 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-	65808 6692 6662	000080-56-8 004889-83-2 013877-91-3	94 91 87
4	5.86	2.31	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzaldehyde Benzaldehyde Benzaldehyde	63685 63687 2020	000100-52-7 000100-52-7 000100-52-7	91 86 80
5	9.36	1.73	D:\DATABASE\NBS75K.L Benzoic Acid Benzoic Acid Benzoic Acid	3903 64651 64647	000065-85-0 000065-85-0 000065-85-0	91 91 90
6	12.44	0.30	D:\DATABASE\NBS75K.L Biphenyl Biphenyl Naphthalene, 2-ethenyl-	67194 67192 67202	000092-52-4 000092-52-4 000827-54-3	64 62 50
7	14.73	0.40	D:\DATABASE\NBS75K.L Phenylethyne Phenylethyne 4H-Pyran-4-one, 2-methoxy-6-phenyl	63585 63586 23360	000536-74-3 000536-74-3 004225-43-8	64 59 50
8	20.05	37.08	D:\DATABASE\NBS75K.L 5-Methyl-2-p-chlorophenylimino-1,3 -thiazolidine 9H-Xanthen-9-one, 3-methoxy- Anthralin	29017 29157 29163	075220-48-3 003722-52-9 000480-22-8	22 15 11
9	20.95	13.00	D:\DATABASE\NBS75K.L Quinoline, 3-methyl-2-phenyl-, 1-o xide Indole, 2-benzoyl-1-methyl- Quinoline, 3-methyl-2-phenyl-, 1-o xide	30893 30904 71057	014300-19-7 001025-99-6 014300-19-7	20 18 18
10	22.05	28.44	D:\DATABASE\NBS75K.L			

```
Amitriptyline 72190 000050-48-6 25
2-Buten-1-ol, 2-methyl-4-(1H-purin 27322 001637-39-4 22
-6-ylamino)-, (E)-
Nortriptyline 71813 000072-69-5 16

11 23.02 14.99 D:\DATABASE\NBS75K.L
Bicyclo[3.1.0]hex-3-en-2-one, 6,6- 33141 013304-07-9 86
diphenyl-
[1,1':3',1''-Terphenyl]-4'-ol 33147 006093-03-4 62
1,1'-Biphenyl, phenoxy- 33143 028984-89-6 58

PAH16.M Thu Mar 08 11:38:41 2012
```


Area Percent Report

Data Path : D:\msdchem\1\DATA\Sell\
 Data File : 059765.D
 Acq On : 28 Feb 2012 13:54
 Operator : Hanna Sell
 Sample : Passiivinäyte3.2
 Misc : Passiivinäyte 3.2 Etäisyys leikkurista 9 m
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: AUTOINT2.E
 Integrator: ChemStation

Method : D:\MSDCHEM\1\METHODS\PAH16.M
 Title : pahien kvantitointi

Signal : TIC

peak #	R.T. min	first scan	max scan	last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	3.656	147	551	703	BV 4	7908	804087	1.59%	0.590%
2	4.410	703	817	1053	PV 3	7115	946697	1.87%	0.695%
3	5.314	1053	1136	1243	VV 4	10960	630576	1.25%	0.463%
4	5.856	1243	1327	2231	VV 4	12729	3146779	6.23%	2.310%
5	9.363	2231	2564	3137	PV 4	20322	2356416	4.66%	1.730%
6	12.443	3137	3650	3738	PV 4	2531	411259	0.81%	0.302%
7	14.734	3738	4458	4519	PV 4	4679	547666	1.08%	0.402%
8	20.053	4519	6334	6579	PV 4	98860	50513202	100.00%	37.078%
9	20.949	6579	6650	6753	VV 4	74598	17705070	35.05%	12.996%
10	22.046	6753	7037	7210	VV 4	69033	38749053	76.71%	28.443%
11	23.019	7210	7380	7648	VV 4	73708	20423426	40.43%	14.991%

Sum of corrected areas: 136234232

PAH16.M Thu Mar 08 12:23:28 2012



DSC-laitteisto: Perkin Elmer Differential Scanning Calorimeter, DSC 6
Jäähdytін: Neslab RTE-140



GC-MS-TD-laitteisto
GC: HP 6890
MS: HP 5973

TD: Markes international



FTIR-laitteisto; Nicolet 380 FT-IR, Thermo Electron Corporation