Supporting Information for: DETAILED PRODUCT ANALYSIS DURING THE LOW AND INTERMEDIATE TEMPERATURE OXIDATION OF ETHYLCYCLOHEXANE

B. HUSSON[1], O. HERBINET[1], P.A. GLAUDE[1], S.S. AHMED[2], F. BATTIN-LECLERC1

[1]Laboratoire Réactions et Génie de Procédés, KINCOM, CNRS, Nancy Université, 1 rue Grandville, BP 451, 54001 NANCY Cedex, France

[2]Saudi-Aramco, Research & Development Center, Dhahran 31311, Saudi Arabia

ethylcyclohexane oxidation in a JSR

Experimental conditions	
Residence time (s)	2
Equivalence ratios	0,25, 1 and 2
x ethylcyclohexane	0,005
Temperature range (K)	500 - 1100 K
P (Torr)	800

Molecule name		Oxygen			Carbon Monoxide			Carbon Dioxide			Ethylcyclohexane			Methane		
Equivalence ratios		ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2
T(K)	500	0,06028463	0,22628664	0,03017155	0	0	0	0	0	0	4,87E-03	5,03E-03	4,98E-03	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
	525	0,05923214	0,226579		0	0		0	0		4,84E-03	4,94E-03		0,00E+00	0,00E+00	
	550	0,05937832	0,2290933	0,02992889	0	0	0	0	0	0	4,83E-03	4,97E-03	5,02E-03	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
	575	0,05820888	0,22204742	0,02982072	0,00031804	0,00086161	0	0,00012768	0	0	3,97E-03	3,23E-03	4,85E-03	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
	600	0,0559577	0,21491384	0,02670124	0,00209041	0,00442369	0,00092522	0,00038304	0,00177475	0,00022982	2,82E-03	1,91E-03	3,32E-03	0,00E+00	5,14E-06	0,00E+00
	625	0,05472979	0,2094467	0,02713101	0,00280456	0,00696803	0,00092522	0,00061286	0,00229824	0	2,48E-03	1,61E-03	3,43E-03	0,00E+00	5,65E-06	0,00E+00
	650	0,05730256	0,21359822	0,02998737	0,00127217	0,00673673	0	0,00030643	0,00163941	0	3,21E-03	1,61E-03	4,81E-03	0,00E+00	6,17E-06	0,00E+00
	675	0,05911519	0,21453377		0	0,00419239		0	0,0009959		4,74E-03	2,08E-03		0,00E+00	5,14E-06	
	700	0,05917366	0,21953312	0,03002245	0	0,00185911	0	0	0,00048008	0	4,84E-03	2,71E-03	4,96E-03	0,00E+00	6,17E-06	0,00E+00
	725	0,05934908	0,22225207		0	0,00040478		0	0,00026047		4,78E-03	4,05E-03		0,00E+00	5,14E-06	
	750	0,05999227	0,22318762	0,03029434	0	0,00017348	0	0	0,00017875	0	4,80E-03	4,40E-03	4,76E-03	0,00E+00	5,14E-06	0,00E+00
	775	0,06110324	0,2225152		0	0,00028913		0	0,00018386		4,61E-03	4,23E-03		0,00E+00	7,71E-06	
	800	0,05917366	0,21909458	0,0299669	0,00011565	0,00179261	5,7826E-05	0,00015322	0,00030643	0	3,99E-03	2,69E-03	4,66E-03	4,11E-05	6,06E-05	1,90E-05
	825	0,0559577	0,2078972	0,02645858	0,00300695	0,00650543	0,00182152	0,0003575	0,00109805	0	2,31E-03	1,51E-03	2,64E-03	3,50E-04	2,61E-04	3,59E-04
	850	0,05101682	0,20175764	0,02607851	0,00731499	0,01413846	0,00242869	0,00102144	0,00199181	0	1,11E-03	6,43E-04	2,22E-03	7,68E-04	5,43E-04	5,35E-04
	875	0,04590052	0,19237288	0,02289179	0,01272172	0,01928497	0,00517543	0,00140448	0,00464755	0,00045965	6,85E-04	3,91E-04	1,53E-03	1,09E-03	6,56E-04	1,04E-03
	900	0,04174901	0,18667186	0,01993895	0,01639367	0,02217627	0,00852934	0,00214502	0,00740544	0,00074054	4,72E-04	2,68E-04	8,81E-04	1,27E-03	5,86E-04	1,40E-03
	925	0,03821145	0,17883661		0,0193428	0,02194497		0,0029111	0,01281907		3,10E-04	1,26E-04		1,43E-03	4,59E-04	
	950	0,03537556	0,1757376	0,01645987	0,02133779	0,0180128	0,01269281	0,00492845	0,01961165	0,00135341	2,15E-04	4,16E-05	4,30E-04	1,35E-03	2,19E-04	1,94E-03
	975	0,03023002	0,16825318		0,02211845	0,01373368		0,0066649	0,02750227		1,04E-04	2,50E-06		1,16E-03	1,45E-04	
	1000	0,02470442	0,16451097	0,01306849	0,02125106	0,01092911	0,0166828	0,01166995	0,03209875	0,00211949	4,08E-05	0,00E+00	1,80E-04	7,99E-04	1,05E-04	2,78E-03
	1025	0,01543661	0,16190897	0,0109635	0,00780651	0,00179261	0,01940062	0,02732352	0,04065331	0,00260467	2,76E-05	0,00E+00	7,55E-05	6,31E-04	0,00E+00	3,17E-03
	1050	0,01026184	0,15995016	0,00903392	0,00430804	0,00026022	0,02133779	0,03365645	0,04093421	0,00344736	2,31E-06	0,00E+00	2,30E-05	3,48E-04	0,00E+00	2,94E-03
	1075	0,00529172	0,15989168	0,00640268	0,00260217	0	0,02434475	0,03746131	0,04203226	0,00413683	0,00E+00	0,00E+00	2,96E-06	1,69E-04	0,00E+00	3,17E-03
	1100	0,00248506	0,16000863	0,00364573	0	0	0,0251254	0,03952973	0,04170029	0,00559238	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	3,77E-03

Ethylene			Acetylene			Ethane			Propylene			Ethylene oxide		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00	
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
9,98E-06	1,96E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,84E-06	0,00E+00	1,43E-05	2,70E-05	0,00E+00
6,69E-05	7,92E-05	4,06E-05	0,00E+00	1,67E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	7,36E-06	4,78E-06	4,97E-06	1,26E-04	1,34E-04	5,45E-05
1,35E-04	1,63E-04	6,62E-05	0,00E+00	1,67E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,51E-05	1,05E-05	8,64E-06	1,94E-04	2,08E-04	6,11E-05
1,30E-04	2,49E-04	0,00E+00	0,00E+00	2,51E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,53E-05	1,73E-05	0,00E+00	7,65E-05	1,95E-04	0,00E+00
3,99E-06	2,81E-04		0,00E+00	1,67E-06		0,00E+00	0,00E+00		1,84E-06	2,32E-05		0,00E+00	1,22E-04	
0,00E+00	2,03E-04	0,00E+00	0,00E+00	1,67E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,97E-05	0,00E+00	0,00E+00	4,62E-05	0,00E+00
0,00E+00	7,02E-05		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	8,46E-06		0,00E+00	9,90E-06	
3,33E-06	4,13E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	5,88E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
3,29E-05	7,29E-05		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		4,41E-06	8,28E-06		0,00E+00	5,50E-06	
2,73E-04	5,02E-04	7,39E-05	0,00E+00	5,36E-06	0,00E+00	2,70E-06	0,00E+00	0,00E+00	2,76E-05	5,26E-05	6,80E-06	8,80E-06	3,41E-05	0,00E+00
1,59E-03	1,43E-03	1,47E-03	2,01E-05	1,81E-05	0,00E+00	1,43E-05	5,41E-06	2,49E-05	1,67E-04	1,39E-04	1,54E-04	5,50E-05	8,47E-05	3,85E-05
2,96E-03	2,23E-03	1,91E-03	2,91E-05	3,95E-05	1,46E-05	5,00E-05	1,51E-05	4,00E-05	2,96E-04	1,65E-04	2,16E-04	1,06E-04	1,08E-04	4,90E-05
3,50E-03	2,27E-03	3,22E-03	4,84E-05	5,16E-05	3,15E-05	7,57E-05	1,89E-05	9,06E-05	2,82E-04	1,36E-04	3,70E-04	8,97E-05	8,47E-05	5,67E-05
3,69E-03	1,90E-03	3,89E-03	6,41E-05	4,59E-05	5,46E-05	9,11E-05	1,84E-05	1,34E-04	2,56E-04	1,06E-04	4,03E-04	7,48E-05	4,62E-05	5,56E-05
3,57E-03	1,21E-03		7,31E-05	3,65E-05		1,00E-04	1,38E-05		2,16E-04	6,03E-05		4,51E-05	2,15E-05	
2,92E-03	5,76E-04	4,30E-03	7,53E-05	1,54E-05	9,89E-05	8,22E-05	6,76E-06	1,73E-04	1,51E-04	3,38E-05	3,41E-04	2,86E-05	6,60E-06	2,86E-05
2,10E-03	3,38E-04		6,03E-05	1,14E-05		7,35E-05	4,06E-06		1,22E-04	2,02E-05		1,49E-05	0,00E+00	
1,51E-03	1,57E-04	4,80E-03	4,95E-05	7,03E-06	1,64E-04	6,41E-05	2,70E-06	2,05E-04	1,10E-04	5,15E-06	2,49E-04	6,60E-06	0,00E+00	1,16E-05
1,27E-03	0,00E+00	4,69E-03	4,64E-05	0,00E+00	1,87E-04	5,81E-05	0,00E+00	2,05E-04	7,85E-05	0,00E+00	1,78E-04	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8,45E-04	0,00E+00	3,45E-03	4,23E-05	0,00E+00	1,58E-04	4,41E-05	0,00E+00	1,61E-04	4,36E-05	0,00E+00	9,18E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
3,15E-04	0,00E+00	2,94E-03	1,36E-05	0,00E+00	1,65E-04	2,00E-05	0,00E+00	1,39E-04	5,88E-06	0,00E+00	5,39E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00	2,43E-03	0,00E+00	0,00E+00	1,91E-04	0,00E+00	0,00E+00	1,16E-04	0,00E+00	0,00E+00	2,24E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00

Acetaldehyde			1-butene			1,3 butadiene			2-butene (cis or trans)			2-butene (cis or trans)		
ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2
0	0	0	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0	0		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00	
0	0	0	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00010373	0,0001639	0	1,46E-06	1,60E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00029045	0,00030757	0,0001556	6,39E-06	2,82E-06	5,06E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00027074	0,00033972	0,00013018	1,13E-05	5,33E-06	8,12E-06	1,51E-06	0,00E+00	0,00E+00	1,47E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00019294	0,00035269	0	1,25E-05	1,01E-05	0,00E+00	2,19E-06	3,15E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
1,7635E-05	0,00031587		0,00E+00	1,38E-05		0,00E+00	3,98E-06		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00	
0	0,00022095	0	0,00E+00	1,38E-05	0,00E+00	0,00E+00	6,04E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0	8,8173E-05		0,00E+00	5,86E-06		0,00E+00	3,70E-06		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00	
0	5,2904E-05	0	0,00E+00	3,46E-06	0,00E+00	0,00E+00	2,19E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
1,5041E-05	6,4833E-05		0,00E+00	3,86E-06		0,00E+00	4,25E-06		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00	
6,6907E-05	0,00018776	1,4004E-05	9,32E-06	2,32E-05	2,26E-06	1,34E-05	2,56E-05	4,25E-06	0,00E+00	2,96E-06	0,00E+00	0,00E+00	2,82E-06	0,00E+00
0,00022562	0,00029408	0,00010218	4,83E-05	4,10E-05	4,57E-05	7,75E-05	5,84E-05	8,04E-05	7,62E-06	6,35E-06	6,63E-06	5,93E-06	5,50E-06	4,57E-06
0,00028734	0,00026089	0,00014678	6,67E-05	3,32E-05	6,07E-05	1,25E-04	6,30E-05	1,25E-04	9,73E-06	5,64E-06	8,89E-06	9,31E-06	5,36E-06	6,07E-06
0,0002334	0,00019242	0,00018931	4,75E-05	2,26E-05	9,53E-05	1,18E-04	5,51E-05	2,05E-04	9,88E-06	3,39E-06	1,14E-05	7,20E-06	4,51E-06	1,04E-05
0,00019294	0,0001333	0,00016753	3,94E-05	2,04E-05	7,83E-05	1,08E-04	5,07E-05	2,12E-04	5,22E-06	2,40E-06	1,11E-05	5,64E-06	3,53E-06	1,06E-05
0,00014574	7,6243E-05		3,12E-05	1,12E-05		1,01E-04	3,47E-05		3,81E-06	1,41E-06		5,22E-06	2,26E-06	
0,0001001	4,0974E-05	0,00013226	2,06E-05	8,12E-06	5,38E-05	8,08E-05	2,63E-05	2,04E-04	3,10E-06	0,00E+00	8,47E-06	3,53E-06	0,00E+00	8,61E-06
6,2239E-05	1,556E-05		1,60E-05	3,06E-06		6,58E-05	1,52E-05		2,40E-06	0,00E+00		2,54E-06	0,00E+00	
4,7717E-05	7,7799E-06	8,2986E-05	2,10E-05	0,00E+00	3,99E-05	5,45E-05	1,37E-06	2,08E-04	2,68E-06	0,00E+00	5,93E-06	3,53E-06	0,00E+00	6,49E-06
2,2821E-05	0	5,9127E-05	1,48E-05	0,00E+00	2,18E-05	4,80E-05	0,00E+00	1,56E-04	1,83E-06	0,00E+00	4,09E-06	2,54E-06	0,00E+00	5,08E-06
1,4004E-05	0	3,0601E-05	5,59E-06	0,00E+00	1,16E-05	4,58E-05	0,00E+00	9,75E-05	0,00E+00	0,00E+00	2,40E-06	0,00E+00	0,00E+00	2,40E-06
2,5933E-06	0	0	0,00E+00	0,00E+00	3,99E-06	2,47E-06	0,00E+00	4,92E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,69E-06
0	0	0	0,00E+00	0,00E+00	3,20E-06	0,00E+00	0,00E+00	3,90E-05	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00

1-butyne			Ethanol			oxetane			2-propenal			Propanal			Acetone		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		3,58E-06	0,00E+00	
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	4,40E-06	0,00E+00	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	3,19E-06	5,79E-06	0,00E+00	9,63E-06	1,10E-05	0,00E+00	6,33E-06	1,29E-05	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	7,07E-06	5,90E-06	0,00E+00	4,13E-06	3,03E-06	0,00E+00	2,03E-05	1,91E-05	9,85E-06	3,82E-05	2,89E-05	1,98E-05	1,84E-05	2,04E-05	1,32E-05
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	6,68E-06	7,86E-06	0,00E+00	4,95E-06	6,33E-06	0,00E+00	2,66E-05	2,69E-05	1,27E-05	4,10E-05	3,77E-05	1,79E-05	1,95E-05	1,93E-05	1,13E-05
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	6,68E-06	0,00E+00	3,03E-06	6,47E-06	0,00E+00	1,85E-05	3,33E-05	0,00E+00	2,20E-05	4,02E-05	0,00E+00	1,35E-05	1,84E-05	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	6,29E-06		0,00E+00	7,15E-06		0,00E+00	3,45E-05		0,00E+00	3,69E-05		0,00E+00	1,60E-05	
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	3,93E-06	0,00E+00	0,00E+00	4,95E-06	0,00E+00	0,00E+00	2,26E-05	0,00E+00	0,00E+00	2,37E-05	0,00E+00	0,00E+00	1,40E-05	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	6,37E-06		0,00E+00	7,70E-06		0,00E+00	7,43E-06	
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	4,05E-06	0,00E+00	0,00E+00	3,58E-06	0,00E+00	0,00E+00	7,43E-06	0,00E+00
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	6,95E-06		0,00E+00	4,13E-06		0,00E+00	5,78E-06	
0,00E+00	1,20E-06	0,00E+00	0,00E+00	5,50E-06	0,00E+00	0,00E+00	7,70E-06	0,00E+00	1,27E-05	3,74E-05	0,00E+00	7,70E-06	2,37E-05	0,00E+00	3,85E-06	1,40E-05	6,05E-06
1,44E-06	1,91E-06	0,00E+00	9,43E-06	1,61E-05	3,93E-06	1,27E-05	1,46E-05	7,43E-06	7,10E-05	7,36E-05	5,27E-05	3,27E-05	4,13E-05	1,90E-05	2,39E-05	2,67E-05	1,71E-05
1,67E-06	1,56E-06	0,00E+00	1,73E-05	1,61E-05	8,25E-06	1,49E-05	1,46E-05	1,21E-05	9,99E-05	7,53E-05	6,34E-05	3,74E-05	3,25E-05	1,98E-05	3,85E-05	3,96E-05	2,12E-05
1,20E-06	1,20E-06	1,67E-06	1,26E-05	1,14E-05	6,29E-06	1,29E-05	1,02E-05	1,32E-05	8,66E-05	5,71E-05	8,80E-05	2,23E-05	2,12E-05	2,26E-05	3,47E-05	2,81E-05	3,14E-05
0,00E+00	0,00E+00	1,79E-06	8,25E-06	5,90E-06	5,11E-06	9,35E-06	7,98E-06	1,02E-05	7,41E-05	4,00E-05	8,63E-05	2,34E-05	1,35E-05	1,84E-05	3,52E-05	2,12E-05	3,47E-05
0,00E+00	0,00E+00		5,11E-06	0,00E+00		6,60E-06	4,68E-06		5,39E-05	2,35E-05		1,38E-05	5,78E-06		2,78E-05	1,27E-05	
0,00E+00	0,00E+00	2,27E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	4,68E-06	2,75E-06	6,33E-06	3,65E-05	1,33E-05	5,59E-05	7,15E-06	3,03E-06	1,32E-05	2,06E-05	8,80E-06	3,60E-05
0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		0,00E+00	0,00E+00		2,03E-05	8,98E-06		4,40E-06	0,00E+00		1,10E-05	5,23E-06	
0,00E+00	0,00E+00	1,79E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	3,03E-06	1,62E-05	0,00E+00	2,69E-05	3,58E-06	0,00E+00	6,88E-06	1,38E-05	0,00E+00	2,26E-05
0,00E+00	0,00E+00	1,44E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,07E-05	0,00E+00	1,62E-05	0,00E+00	0,00E+00	3,58E-06	6,88E-06	0,00E+00	1,32E-05
0,00E+00	0,00E+00	1,20E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	2,90E-06	0,00E+00	6,95E-06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	2,75E-06	0,00E+00	7,98E-06
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	3,85E-06
0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	2,75E-06

1,3-cyclopentadiene			1-butene,3-methyl			Cyclopentene			1,3-pentadiene (cis or trans)			1,3-pentadiene (cis or trans)		
ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1,3475E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1,1463E-06	0	2,695E-06	1,1229E-06	2,2458E-06	2,02126E-06	1,4598E-06	1,90897E-06	0	0	0	0	0	0
0	1,6048E-06	0	2,9196E-06	2,4704E-06	0	2,13355E-06	1,90897E-06	0	0	0	0	0	0	0
0	1,2609E-06		0	2,9196E-06		0	2,13355E-06		0	0		0	0	
0	1,6048E-06	0	0	3,2565E-06	0	0	2,69502E-06	0	0	1,4902E-06	0	0	0	0
0	0		0	2,2458E-06		0	2,02126E-06		0	1,1463E-06		0	0	
0	0	0	0	1,7967E-06	0	0	1,4598E-06	0	0	1,1463E-06	0	0	0	0
0	1,9487E-06		0	3,4811E-06		0	3,14419E-06		0	1,9487E-06		0	1,1463E-06	
3,2097E-06	9,6291E-06	0	6,2884E-06	1,0892E-05	1,4598E-06	8,7588E-06	1,33628E-05	2,13355E-06	1,238E-05	8,4827E-06	5,8462E-06	6,7633E-06	3,8975E-06	3,20969E-06
3,1409E-05	2,5448E-05	2,7626E-05	1,7405E-05	1,4261E-05	1,7293E-05	3,39123E-05	2,15601E-05	3,26771E-05	4,505E-05	1,6622E-05	5,915E-05	2,3958E-05	8,712E-06	3,20969E-05
5,8806E-05	3,2899E-05	3,8975E-05	2,6052E-05	1,2577E-05	1,9314E-05	4,50292E-05	1,9202E-05	3,48106E-05	5,9379E-05	1,6163E-05	7,6345E-05	3,2212E-05	8,4827E-06	4,22991E-05
4,7572E-05	2,6709E-05	6,2589E-05	1,8416E-05	7,299E-06	2,5153E-05	2,49289E-05	1,1903E-05	3,53721E-05	4,3216E-05	1,4558E-05	8,9069E-05	2,327E-05	8,3681E-06	4,96355E-05
4,6082E-05	2,0863E-05	6,2933E-05	1,7518E-05	5,0532E-06	3,1105E-05	1,77422E-05	7,299E-06	2,43674E-05	3,7141E-05	1,3527E-05	7,4052E-05	2,1322E-05	7,2218E-06	4,14967E-05
3,6797E-05	1,4329E-05		1,5833E-05	4,3794E-06		1,25767E-05	5,39003E-06		3,0492E-05	9,7437E-06		1,6851E-05	5,9609E-06	
2,8085E-05	9,5144E-06	5,3877E-05	1,224E-05	3,1442E-06	2,302E-05	7,97276E-06	3,59335E-06	1,31382E-05	2,1665E-05	6,6486E-06	4,3789E-05	1,1922E-05	3,439E-06	2,44166E-05
1,9602E-05	5,9609E-06		9,208E-06	1,4598E-06		4,49169E-06	1,12292E-06		1,3412E-05	2,0634E-06		7,795E-06	1,2609E-06	
2,9575E-05	0	4,356E-05	1,325E-05	0	2,0886E-05	4,49169E-06	0	5,72691E-06	1,4558E-05	0	2,2353E-05	8,0242E-06	0	1,27241E-05
2,2582E-05	0	3,5307E-05	9,8817E-06	0	1,4598E-05	2,47043E-06	0	2,02126E-06	7,5657E-06	0	1,1119E-05	4,9292E-06	0	6,19011E-06
1,1005E-05	0	2,3729E-05	3,5934E-06	0	9,208E-06	0	0	1,12292E-06	1,8341E-06	0	4,2414E-06	0	0	2,29264E-06
0	0	1,5475E-05	0	0	2,0213E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Butanal			2-butanone			1,3-pentadiene, 2-methyl			2-butenal			Acetic acid		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6,1076E-05	0	0
2,5678E-06	3,118E-06	0	1,2105E-05	1,2289E-05	0	0	0	0	0	0	0	0,00016562	0,00038791	0
1,0271E-05	5,6857E-06	6,4194E-06	2,9896E-05	1,9625E-05	1,0638E-05	0	0	0	1,0246E-05	4,5536E-06	5,1229E-06	0,00023605	0,00034224	6,54777E-05
1,3022E-05	9,354E-06	4,5853E-06	3,1913E-05	2,8795E-05	7,5198E-06	0	0	0	1,442E-05	1,2902E-05	6,451E-06	0,00019038	0,00031528	2,64112E-05
6,9696E-06	9,7208E-06	0	1,0638E-05	2,4944E-05	0	0	0	0	7,5894E-06	1,1574E-05	0	1,5957E-05	0,00015186	0
0	1,0821E-05		0	2,2009E-05		0	0		0	1,4799E-05		0	0,00011115	
0	5,5023E-06	0	0	1,2839E-05	0	0	0	0	0	1,0246E-05	0	0	5,3923E-05	0
0	2,2009E-06		0	4,9521E-06		0	0		0	3,605E-06		0	9,9042E-06	
0	0	0	0	2,2009E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	3,8516E-06		0	1,0435E-06		0	2,0871E-06		0	0	
0	3,118E-06	0	0	7,7033E-06	0	9,4868E-06	6,3561E-06	2,6563E-06	4,5536E-06	1,2712E-05	0	0	0	0
7,5198E-06	5,5023E-06	2,9346E-06	1,1922E-05	1,4673E-05	7,3364E-06	2,4096E-05	1,2902E-05	2,476E-05	3,7378E-05	2,5804E-05	1,2143E-05	0	0	0
6,7862E-06	6,4194E-06	3,4848E-06	1,3572E-05	1,5773E-05	8,2535E-06	2,3622E-05	1,3851E-05	2,3148E-05	5,5592E-05	1,9922E-05	2,8271E-05	0	0	0
3,3014E-06	2,1092E-06	3,4848E-06	9,354E-06	8,6203E-06	1,0454E-05	1,2523E-05	1,0815E-05	1,9163E-05	3,2445E-05	2,163E-05	4,0224E-05	0	0	0
3,0263E-06	0	1,8341E-06	7,3364E-06	2,9346E-06	1,3206E-05	6,9253E-06	5,6921E-06	1,1764E-05	2,846E-05	1,1384E-05	2,9978E-05	0	0	0
2,5678E-06	0		3,118E-06	1,8341E-06		5,9767E-06	4,4588E-06		2,6563E-05	8,9176E-06		0	0	
0	0	1,8341E-06	2,2009E-06	0	5,5023E-06	4,1742E-06	2,5614E-06	4,0793E-06	1,4799E-05	5,1229E-06	2,3907E-05	0	0	0
0	0		0	0		3,1306E-06	1,9922E-06		1,0435E-05	3,9844E-06		0	0	
0	0	0	0	0	0	1,9922E-06	0	4,0793E-06	7,5894E-06	0	1,3471E-05	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	5,6921E-06	0	6,6407E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	3,7947E-06	0	3,4152E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,8974E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

2-butenal			Benzene			1,3-cyclohexadiene			Cyclohexene			1-penten-3-one		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0	0	0	0	6,0405E-06	6,1638E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	6,1638E-06		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	6,0405E-06	6,1638E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	2,8056E-06	0	5,1776E-06	6,1638E-06	6,1638E-06	1,4028E-06	0	0	2,758E-06	5,2654E-06	0	3,9828E-06	1,2707E-05	0
6,3764E-06	7,3966E-06	4,591E-06	7,3966E-06	7,5198E-06	6,5336E-06	5,6112E-06	4,0809E-06	1,033E-05	1,1659E-05	1,2537E-05	1,0155E-05	2,4845E-05	2,3897E-05	1,28966E-05
8,9269E-06	9,6921E-06	6,8865E-06	1,0725E-05	1,5533E-05	8,0129E-06	7,9067E-06	1,7344E-05	1,4028E-05	1,3289E-05	2,3945E-05	1,379E-05	2,6741E-05	3,7552E-05	1,38449E-05
5,6112E-06	9,6921E-06	0	1,0109E-05	1,7135E-05	6,1638E-06	7,9067E-06	1,9257E-05	0	1,6172E-05	1,8805E-05	0	1,5552E-05	2,9397E-05	0
0	1,2243E-05		0	2,0957E-05		0	2,3593E-05		4,2624E-06	2,6076E-05		0	2,5224E-05	
0	7,3966E-06	0	0	1,504E-05	6,5336E-06	0	1,9384E-05	0	6,1429E-06	2,9085E-05	0	0	2,181E-05	0
0	3,8258E-06		0	8,8759E-06		0	7,7791E-06		1,2537E-06	2,921E-05		0	4,931E-06	
0	2,5505E-06	0	0	7,3966E-06	6,1638E-06	0	3,8258E-06	0	3,3849E-06	3,0715E-05	0	0	2,2759E-06	0
0	4,846E-06		0	9,7388E-06		0	7,9067E-06		2,6452E-05	5,1024E-05		0	3,7931E-06	
2,219E-05	2,3975E-05	1,1222E-05	1,3684E-05	4,6352E-05	7,0267E-06	1,7981E-05	6,0575E-05	3,3157E-06	0,00011797	0,00011421	4,1997E-05	2,0862E-06	1,3276E-05	0
8,6208E-05	4,1319E-05	6,9885E-05	0,00010466	0,00013856	6,8048E-05	6,4274E-05	0,00018695	4,9608E-05	0,00022741	0,00012411	0,00026126	1,2707E-05	2,181E-05	6,44829E-06
7,8812E-05	3,8513E-05	9,3605E-05	0,00019157	0,00021191	9,6279E-05	4,9863E-05	0,00029395	5,4199E-05	0,00016812	8,3744E-05	0,00024584	1,1759E-05	1,4793E-05	7,01726E-06
6,5549E-05	2,1425E-05	0,00010151	0,00024779	0,00022375	0,0001965	3,7365E-05	0,00031155	6,1468E-05	0,00011433	6,1053E-05	0,00022528	5,3104E-06	1,1E-05	4,17242E-06
4,2594E-05	1,7344E-05	7,4476E-05	0,00024261	0,00016531	0,0002447	2,8694E-05	0,00024817	4,795E-05	8,3493E-05	4,6887E-05	0,0001473	3,7931E-06	2,6552E-06	2,65518E-06
2,7546E-05	9,437E-06		0,00022412	0,00010072		2,1042E-05	0,00015877		5,3406E-05	3,1341E-05		3,2241E-06	3,0345E-06	
1,7599E-05	7,3966E-06	3,5197E-05	0,00018331	5,2269E-05	0,00026221	1,7344E-05	7,8302E-05	2,5633E-05	4,4129E-05	1,8554E-05	6,3811E-05	0	0	0
1,0967E-05	2,5505E-06		0,00012882	3,612E-05		1,1095E-05	5,4199E-05		2,5825E-05	3,2595E-06		0	0	
6,8865E-06	0	2,0914E-05	0,00012858	1,3684E-05	0,00026997	8,2893E-06	2,4613E-05	1,6196E-05	1,2537E-05	0	3,0589E-05	0	0	0
4,3359E-06	0	9,1819E-06	7,902E-05	0	0,00024039	5,7387E-06	1,6196E-05	9,1819E-06	4,7639E-06	0	1,2286E-05	0	0	0
0	0	3,8258E-06	4,4873E-05	0	0,0001912	0	0	4,2084E-06	0	0	3,5102E-06	0	0	0
0	0	0	7,3966E-06	0	0,0001536	0	0	2,168E-06	0	0	1,2537E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	6,4473E-05	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Pentanal			Cyclohexane, 1-methyl			Cyclohexene, 3-methyl			Cyclohexene 1-methyl			Toluene		
ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4,25303E-06	8,32114E-06	0	0	0	0	0	1,072E-06	0	1,072E-06	1,6079E-06	0	0	0	0
1,92311E-05	1,66423E-05	1,47931E-05	0	0	4,2266E-06	0	1,2864E-06	0	6,4318E-06	4,8238E-06	0	0	0	0
1,83065E-05	2,1635E-05	1,25742E-05	0	0	4,3323E-06	0	2,4655E-06	1,072E-06	7,3966E-06	5,6814E-06	0	0	0	0
1,14647E-05	1,36837E-05	0	0	0	0	0	0	0	1,072E-05	8,6829E-06	0	0	0	0
0	1,31289E-05		0	0		0	0		2,1439E-06	1,147E-05		0	0	
0	8,13622E-06	0	0	0	0	0	0	0	0	1,415E-05	0	0	0	0
0	2,21897E-06		0	0		0	0		0	1,4686E-05		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1,072E-06	1,415E-05	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		8,3613E-06	2,0475E-05		0	1,3736E-06	
0	0	0	4,6493E-06	4,4168E-06	2,0076E-06	1,6079E-06	1,8223E-06	1,1792E-06	3,5589E-05	4,1056E-05	1,4472E-05	0	5,7059E-06	0
0	0	0	1,2257E-05	5,3889E-06	1,585E-06	9,3261E-06	3,1087E-06	1,7795E-05	6,6248E-05	3,9984E-05	8,3506E-05	1,3736E-05	1,3419E-05	1,12005E-05
0	0	0	1,2152E-05	4,2266E-06	1,7857E-05	1,1684E-05	3,0015E-06	2,2618E-05	5,2419E-05	2,6156E-05	8,3935E-05	2,2929E-05	1,437E-05	1,55328E-05
0	0	0	9,2985E-06	3,2756E-06	1,8808E-05	1,0398E-05	2,2511E-06	2,6049E-05	3,4303E-05	1,8116E-05	7,7932E-05	2,0182E-05	1,1412E-05	2,40917E-05
0	0	0	7,9249E-06	2,7473E-06	1,3419E-05	8,8973E-06	2,0367E-06	1,8009E-05	2,2618E-05	1,2864E-05	5,0811E-05	1,9231E-05	7,7136E-06	2,83183E-05
0	0		4,8606E-06	2,1133E-06		6,539E-06	1,6079E-06		1,5544E-05	8,7901E-06		1,5955E-05	4,2266E-06	
0	0	1,84914E-06	4,7549E-06	1,3736E-06	6,2343E-06	4,7167E-06	1,072E-06	6,3246E-06	1,3721E-05	5,0382E-06	2,4334E-05	1,1835E-05	2,4303E-06	2,16614E-05
0	0		2,3246E-06	0		2,2511E-06	0		9,9693E-06	1,072E-06		8,3476E-06	1,0567E-06	
0	0	0	0	0	3,487E-06	0	0	2,6799E-06	3,9663E-06	0	1,5544E-05	7,1852E-06	0	1,63781E-05
0	0	0	0	0	0	0	0	1,072E-06	2,7871E-06	0	7,611E-06	4,6493E-06	0	1,39478E-05
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2,1439E-06	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

2-hexanone			Cyclohexane, ethenyl			Cyclohexene, 4-ethyl			E,2,4-Ethylidenecyclohexene			Ethylbenzene		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**	**ϕ = 1**	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2,3669E-06	2,9586E-06	0	4,1196E-06	3,7451E-06	0	2,6028E-05	2,5373E-05	0	4,7414E-06	6,5431E-06	0	2,7737E-06	3,7907E-06	0
1,1243E-05	5,9173E-06	7,5445E-06	8,801E-06	5,0559E-06	9,9245E-06	5,2431E-05	3,2208E-05	5,8985E-06	1,2422E-05	9,1983E-06	7,4914E-06	5,3625E-06	7,3041E-06	2,49634E-06
1,2042E-05	1,0207E-05	7,6924E-06	1,264E-05	4,3069E-06	1,2546E-05	7,9771E-05	4,5597E-05	8,9321E-05	9,9569E-06	9,4828E-06	6,4483E-06	8,9683E-06	1,054E-05	3,42091E-06
8,2842E-06	1,1391E-05	0	1,4887E-05	8,8946E-06	0	0,00011956	7,125E-05	1,5917E-06	7,9655E-06	5,7845E-06	0	9,8005E-06	1,3776E-05	0
0	1,3906E-05		1,8725E-06	1,3763E-05		2,3688E-05	0,00012284		0	6,7328E-06		0	2,6165E-05	
0	5,9173E-06	0	0	1,7227E-05	0	4,2132E-06	0,00015458	0	0	7,3966E-06	0	0	2,2929E-05	0
0	2,6628E-06		0	1,4325E-05		4,2132E-06	0,00014194		0	6,1638E-06		0	1,3314E-05	
0	1,4793E-06	0	0	1,0112E-05	0	6,7412E-06	9,9807E-05	1,6853E-06	0	3,0345E-06	0	0	5,455E-06	0
0	1,4793E-06		3,9324E-06	1,367E-05		3,6047E-05	0,00013183		0	4,931E-06		0	1,1372E-05	
5,9173E-06	5,9173E-06	1,9231E-06	1,1891E-05	2,4811E-05	3,277E-06	0,00010683	0,00021047	2,8369E-05	2,9397E-06	1,2233E-05	0	6,8418E-06	3,9479E-05	1,75668E-06
1,3758E-05	8,8759E-06	1,213E-05	1,7134E-05	1,9568E-05	1,2827E-05	0,00014147	0,00016731	9,8683E-05	7,0173E-06	9,2931E-06	3,5086E-06	2,5056E-05	6,1299E-05	1,04477E-05
1,0799E-05	4,29E-06	1,0651E-05	7,1157E-06	1,0205E-05	9,9245E-06	7,0782E-05	7,6868E-05	6,7225E-05	5,1207E-06	4,2673E-06	2,181E-06	1,9416E-05	3,2175E-05	8,78342E-06
5,1776E-06	3,9941E-06	7,2486E-06	2,5279E-06	5,8049E-06	6,1794E-06	3,4174E-05	4,363E-05	4,3069E-05	1,8017E-06	2,5604E-06	1,6121E-06	1,165E-05	1,9971E-05	9,24571E-06
2,9586E-06	1,6272E-06	4,4379E-06	0	3,0897E-06	2,7152E-06	1,9755E-05	2,5467E-05	2,2564E-05	0	9,4828E-07	1,0431E-06	7,5815E-06	6,9343E-06	6,10217E-06
1,9231E-06	0		0	1,5917E-06		1,0486E-05	8,801E-06		0	0		4,0681E-06	2,4039E-06	
0	0	0	0	0	0	7,2093E-06	6,1794E-06	7,6775E-06	0	0	0	2,219E-06	1,4793E-06	3,79074E-06
0	0		0	0		3,8387E-06	9,3627E-07		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	1,498E-06	0	2,9025E-06	0	0	0	0	0	3,236E-06
0	0	0	0	0	0	0	0	1,4044E-06	0	0	0	0	0	2,5888E-06
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

E,2,3-Ethylidenecyclohexene			Cyclohexene, 1-ethyl			Styrene			Cyclohexanone			2-cyclohexen-1-one		
ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2	ϕ = 1	ϕ = 0.25	ϕ = 2
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7,6924E-06	0	0	0	0
1,8966E-06	2,3707E-06	0	5,0933E-05	1,2452E-05	0	3,277E-06	5,9922E-06	0	2,8551E-05	5,2664E-05	0	6,7928E-06	4,5889E-05	0
3,7931E-06	4,1724E-06	2,0862E-06	7,7243E-05	1,7789E-05	8,2673E-05	7,3029E-06	9,4564E-06	1,6853E-06	5,4735E-05	9,7487E-05	1,8196E-05	3,9851E-05	6,0531E-05	1,34346E-05
8,25E-06	4,931E-06	2,0862E-06	9,007E-05	5,3929E-05	9,9713E-05	1,2078E-05	1,5168E-05	5,1495E-06	4,0533E-05	7,9291E-05	2,0415E-05	5,2984E-05	7,5475E-05	2,56616E-05
7,5862E-06	6,9224E-06	0	0,0001131	6,5165E-05	1,8725E-06	7,7711E-06	1,6478E-05	0	3,2249E-05	6,2723E-05	0	3,5322E-05	9,0419E-05	0
0	1,0336E-05		2,219E-05	0,00010149		0	1,9568E-05		0	2,9438E-05		3,019E-06	9,208E-05	
0	1,0052E-05	0	3,8387E-06	0,00011741	0	0	1,1984E-05	0	0	1,4201E-05	0	0	9,9627E-05	0
0	7,8707E-06		3,6515E-06	0,0001087		0	7,3029E-06		0	2,5148E-06		0	8,0306E-05	
0	3,8879E-06	0	5,8049E-06	7,097E-05	1,9662E-06	0	9,3627E-07	0	0	6,2131E-06	0	0	1,5095E-05	0
0	7,6811E-06		2,9774E-05	9,1287E-05		0	4,4941E-06		0	1,213E-05		0	2,2794E-05	
4,1724E-06	1,5836E-05	0	7,0033E-05	0,00012649	2,1066E-05	1,8725E-06	3,277E-05	0	3,9941E-06	2,7811E-05	0	0	3,0492E-05	0
9,388E-06	1,4888E-05	2,6552E-06	8,1362E-05	9,1755E-05	5,8517E-05	3,3238E-05	6,7318E-05	1,3389E-05	1,361E-05	8,1362E-06	5,7693E-06	1,751E-05	5,4191E-05	1,14722E-05
7,0173E-06	8,6293E-06	1,0431E-06	4,0634E-05	4,0915E-05	4,1664E-05	2,9774E-05	3,3893E-05	1,1235E-05	1,2278E-05	3,9941E-06	1,9231E-06	3,01E-05	2,0227E-05	3,47186E-06
3,5086E-06	3,7931E-06	0	1,8913E-05	2,2564E-05	2,6216E-05	2,425E-05	2,3688E-05	8,8946E-06	7,6924E-06	6,509E-06	3,1066E-06	1,585E-05	2,0982E-05	0
9,4828E-07	9,4828E-07	0	1,0393E-05	1,2172E-05	1,2921E-05	4,775E-06	5,524E-06	4,3069E-06	6,509E-06	2,9586E-06	2,219E-06	3,019E-06	0	0
0	0		5,9922E-06	3,277E-06		4,2132E-06	3,7451E-06		4,4379E-06	0		0	0	
0	0	0	4,4005E-06	2,3407E-06	5,6176E-06	3,3706E-06	1,3108E-06	3,4642E-06	2,9586E-06	0	1,6272E-06	0	0	0
0	0		2,1534E-06	9,3627E-07		0	0		0	0		0	0	
0	0	0	9,3627E-07	0	2,9025E-06	0	0	4,6814E-06	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1,498E-06	0	0	3,9324E-06	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	3,4642E-06	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1,498E-06	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

MASS 126 (C8H14O)		
ϕ = 1	**ϕ = 0.25**	**ϕ = 2**
0	0	0
0	0	
0	0	0
0	0	
1,1835E-05	6,7097E-05	0
0,00025708	0,00058813	0
0,00063103	0,0007274	0,00051353
0,00067097	0,0009214	0,00065195
0,00059173	0,00047993	8,9815E-06
5,9173E-05	0,00031911	
0	0,00040364	6,3399E-06
2,1133E-05	0,00062998	
2,7684E-05	0,00076396	4,2266E-06
5,5263E-05	0,00103732	
0,00015427	0,00118345	4,6176E-05
0,00063653	0,00101037	0,00029903
0,00053467	0,00053361	0,00016061
0,00036264	0,00050719	0,00013948
0,00024852	0,00026628	0,00012152
0,00018439	0,00011179	
8,897E-05	6,1286E-05	0,00010144
6,7943E-05	3,6983E-05	
4,8817E-05	1,6906E-05	8,3476E-05
2,3141E-05	0	6,4456E-05
2,2612E-05	0	5,5263E-05
1,902E-05	0	3,5926E-05
0	0	2,3246E-05