

!VERSION: 16_03 Thermo aramco mech
!AUTHORS: C3
!NOTE: SPECIES RE-ARRANGED AS THE SAME ORDER IN MECH

THERMO

300.000 1000.000 5000.000
AR G 5/97AR 1 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.50000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 2
-7.45375000E 4.37967491E 2.50000000E 0.00000000E 0.00000000E 3
0.00000000E 0.00000000E 7.45375000E 4.37967491E 0.00000000E 4
N2 G 8/02N 2 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.95257637E 1.39690040E-03-4.92631603E-07 7.86010195E-11-4.60755204E-15
2
-9.23948688E 5.87188762E 3.53100528E 1.23660988E-04-5.02999433E-07 3
2.43530612E-09-1.40881235E-12-1.04697628E 2.96747038E 0.00000000E 4
HE G 5/97HE 1 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.50000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 2
-7.45375000E 9.28723974E-01 2.50000000E 0.00000000E 0.00000000E 3
0.00000000E 0.00000000E 7.45375000E 9.28723974E-01 0.00000000E 4
H2 TPIS78H 2 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.93286575E 8.26608026E-04-1.46402364E-07 1.54100414E-11-6.88804800E-16
2
-8.13065581E 1.02432865E 2.34433112E 7.98052075E-03-1.94781510E-05 3
2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E 6.83010238E-01 0.00000000E
4
H L 6/94H 1 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
0.25000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 0.00000000E 2
0.25473660E 0.44668285E 0.25000000E 0.00000000E 0.00000000E 3
0.00000000E 0.00000000E 0.25473660E 0.44668285E 0.26219035E 4
O2 RUS 890 2 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
3.66096065E 6.56365811E-04-1.41149627E-07 2.05797935E-11-1.29913436E-15
2
-1.21597718E 3.41536279E 3.78245636E 2.99673416E-03 9.84730201E-06 3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E 3.65767573E 0.00000000E 4
O L 1/900 1 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.54363697E 2.73162486E-05-4.19029520E-09 4.95481845E-12-4.79553694E-16
2
2.92260120E 4.92229457E 3.16826710E 3.27931884E-03 6.64306396E-06 3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E 2.05193346E 2.99687009E 4
H2O L 5/89H 2 O 1 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
0.26770389E 0.29731816E-02-0.77376889E-06 0.94433514E-10-0.42689991E-14
2
-0.29885894E 0.68825500E 0.41986352E 0.20364017E-02 0.65203416E-05 3
-0.54879269E-08 0.17719680E-11-0.30293726E 0.84900901E 0.29084817E 4
OH IU3/03O 1 H 1 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
2.83853033E 1.10741289E-03-2.94000209E-07 4.20698729E-11-2.42289890E-15
2
3.69780808E 5.84494652E 3.99198424E 2.40106655E-03 4.61664033E-06 3
-3.87916306E-09 1.36319502E-12 3.36889836E 1.03998477E-01 4.48613328E 4

OHV 1212860 1H 1 G 0300.00 5000.00 1000.00
 1
 0.02882730E 0.10139743E-02-0.02276877E-05 0.02174683E-09-0.05126305E-14
 2
 5.02650000E 0.05595712E 0.03637266E 0.01850910E-02-0.16761646E-05 3
 0.02387202E-07-0.08431442E-11 5.00213000E 0.13588605E
 4
 H2O2 T 8/03H 2O 2 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
 1
 4.57977305E 4.05326003E-03-1.29844730E-06 1.98211400E-10-1.13968792E-14
 2
 -1.80071775E 6.64970694E-01 4.31515149E8.47390622E-04 1.76404323E-05 3
 -2.26762944E-08 9.08950158E-12-1.77067437E 3.27373319E1.63425145E 4
 HO2 T 1/09H 1O 2 0 OG 200.000 5000.00 1000.00
 1
 4.17228741E 1.88117627E-03-3.46277286E-07 1.94657549E-11 1.76256905E-16
 2
 3.10206839E 2.95767672E 4.30179807E4.74912097E-03 2.11582905E-05 3
 -2.42763914E-08 9.29225225E-12 2.64018485E 3.71666220E 1.47886045E 4
 CO RUS 79C 1O 1 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.30484859E 0.13517281E-02-0.48579405E-06 0.78853644E-10-0.46980746E-14
 2
 -0.14266117E 0.60170977E 0.35795335E0.61035369E-03 0.10168143E-05 3
 0.90700586E-09-0.90442449E-12-0.14344086E 0.35084093E0.13293628E 4
 CO2 L 7/88C 1O 2 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.46365111E 0.27414569E-02-0.99589759E-06 0.16038666E-09-0.91619857E-14
 2
 -0.49024904E0.19348955E 0.23568130E 0.89841299E-02-0.71220632E-05 3
 0.24573008E-08-0.14288548E-12-0.48371971E 0.99009035E0.47328105E 4
 HOCO T05/06H 1 C 1 O 2 0 G 200.000 6000.00
 1000.00 1
 5.39206152E 4.11221455E-03-1.48194900E-06 2.39875460E-10-1.43903104E-14
 2
 -2.38606717E2.23529091E 2.92207919E 7.62453859E-03 3.29884437E-06 3
 -1.07135205E-08 5.11587057E-12-2.30281524E 1.12925886E2.18076591E 4
 CH4 G 8/99C 1 H 4 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 1.65326226E 1.00263099E-02-3.31661238E-06 5.36483138E-10-3.14696758E-14
 2
 -1.00095936E 9.90506283E 5.14911468E1.36622009E-02 4.91453921E-05 3
 -4.84246767E-08 1.66603441E-11-1.02465983E4.63848842E8.97226656E 4
 CH3 IU0702C 1 H 3 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.29781206E 0.57978520E-02-0.19755800E-05 0.30729790E-09-0.17917416E-13
 2
 0.16509513E 0.47224799E 0.36571797E 0.21265979E-02 0.54583883E-05 3
 -0.66181003E-08 0.24657074E-11 0.16422716E 0.16735354E 0.17643935E 4
 CH2 IU3/03C 1 H 2 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 3.14631886E 3.03671259E-03-9.96474439E-07 1.50483580E-10-8.57335515E-15
 2
 4.60412605E 4.72341711E 3.71757846E 1.27391260E-03 2.17347251E-06 3
 -3.48858500E-09 1.65208866E-12 4.58723866E 1.75297945E 4.70504920E 4
 CH2(S) IU6/03C 1 H 2 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1

3.13501686E 2.89593926E-03-8.16668090E-07 1.13572697E-10-6.36262835E-15
2
5.05040504E 4.06030621E 4.19331325E2.33105184E-03 8.15676451E-06 3
-6.62985981E-09 1.93233199E-12 5.03662246E7.46734310E-01 5.15727280E 4
C L 7/88C 1 0 0 OG 200.000 6000.00 1000.00
1
0.26055830E0.19593434E-03 0.10673722E-06-0.16423940E-10 0.81870580E-15
2
0.85411742E 0.41923868E 0.25542395E0.32153772E-03 0.73379223E-06 3
-0.73223487E-09 0.26652144E-12 0.85442681E 0.45313085E 0.86195097E 4
CH IU3/03C 1 H 1 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
0.25209369E 0.17653639E-02-0.46147660E-06 0.59289675E-10-0.33474501E-14
2
0.70946769E 0.74051829E 0.34897583E 0.32432160E-03-0.16899751E-05 3
0.31628420E-08-0.14061803E-11 0.70612646E 0.20842841E 0.71658188E 4
CHV 073003C 1H 1 G 0300.00 5000.00 1000.00
1
0.02196223E 0.02340381E-01-0.07058201E-05 0.09007582E-09-0.03855040E-13
2
0.10419559E 0.09178373E 0.03200202E 0.02072875E-01-0.05134431E-04 3
0.05733890E-07-0.01955533E-10 0.10393714E 0.03331587E
4
CH3O2H A 7/05C 1 H 4 O 2 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
7.76538058E 8.61499712E-03-2.98006935E-06 4.68638071E-10-2.75339255E-14
2
-1.82979984E1.43992663E 2.90540897E 1.74994735E-02 5.28243630E-06 3
-2.52827275E-08 1.34368212E-11-1.68894632E 1.13741987E1.52423685E 4
CH3O2 H 3C 1O 2 OG 300.000 5000.000
1374.000 11
6.47970487E 7.44401080E-03-2.52348555E-06 3.89577296E-10-2.25182399E-14
2
-1.56285441E8.19477074E 1.97339205E 1.53542340E-02-6.37314891E-06 3
3.19930565E-10 2.82193915E-13 2.54278835E 1.69194215E
4
CH2O2H 9/ 1/12 C 1H 3O 2 OG 300.000 5000.000
1410.000 21
9.24697852E 4.60845541E-03-1.53501472E-06 2.34434830E-10-1.34573106E-14
2
4.11529953E2.11503248E 2.88976454E 2.09465776E-02-1.75190772E-05 3
7.27819787E-09-1.18912344E-12 6.12390620E 1.23802076E
4
CH3OH T06/02C 1H 4 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
3.52726795E 1.03178783E-02-3.62892944E-06 5.77448016E-10-3.42182632E-14
2
-2.60028834E 5.16758693E 5.65851051E1.62983419E-02 6.91938156E-05 3
-7.58372926E-08 2.80427550E-11-2.56119736E8.97330508E-01-2.41746056E 4
CH3O IU1/03C 1 H 3 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
4.75779238E 7.44142474E-03-2.69705176E-06 4.38090504E-10-2.63537098E-14
2
3.78111940E1.96680028E 3.71180502E2.80463306E-03 3.76550971E-05 3
-4.73072089E-08 1.86588420E-11 1.29569760E 6.57240864E 2.52571660E 4
CH2OH IU2/03C 1 H 3 O 1 0 G 200.000 6000.00
1000.00 1

5.09314370E 5.94761260E-03-2.06497460E-06 3.23008173E-10-1.88125902E-14
 2
 -4.03409640E1.84691493E 4.47834367E1.35070310E-03 2.78484980E-05 3
 -3.64869060E-08 1.47907450E-11-3.50072890E 3.30913500E2.04462770E 4
 CH2O T 5/11H 2C 1O 1 OG 200.000 6000.00 1000.00
 1
 3.16952665E 6.19320560E-03-2.25056366E-06 3.65975660E-10-2.20149458E-14
 2
 -1.45486831E 6.04207898E 4.79372312E9.90833322E-03 3.73219990E-05 3
 -3.79285237E-08 1.31772641E-11-1.43791953E 6.02798058E-01-1.31293365E
 4
 HCO T 5/03C 1H 1O 1 OG 200.000 6000.00 1000.00
 1
 3.92001542E 2.52279324E-03-6.71004164E-07 1.05615948E-10-7.43798261E-15
 2
 3.65342928E 3.58077056E 4.23754610E3.32075257E-03 1.40030264E-05 3
 -1.34239995E-08 4.37416208E-12 3.87241185E 3.30834869E 5.08749163E 4
 HCOH MAR94 C 1H 2O 1 OG 300. 5000. 1398.
 1
 9.18749272E 1.52011152E-03-6.27603516E-07 1.09727989E-10-6.89655128E-15
 2
 7.81364593E2.73434214E2.82157421E 3.57331702E-02-3.80861580E-05 3
 1.86205951E-08-3.45957838E-12 1.12956672E 3.48487757E
 4
 HO2CHO 6/26/95 THERMC 1H 2O 3 OG 300.000 5000.000 1378.00
 21
 9.87503878E 4.64663708E-03-1.67230522E-06 2.68624413E-10-1.59595232E-14
 2
 -3.80502496E2.24939155E 2.42464726E 2.19706380E-02-1.68705546E-05 3
 6.25612194E-09-9.11645843E-13-3.54828006E 1.75027796E
 4
 HOCH2O2H 9/ 1/12 C 1H 4O 3 OG 300.000 5000.000
 1398.000 21
 1.24531886E 7.18221110E-03-2.47029548E-06 3.85611737E-10-2.24774193E-14
 2
 -4.24862928E3.58745197E 5.35189713E-01 3.73266553E-02-3.15299511E-05 3
 1.30352583E-08-2.11473264E-12-3.86609415E 2.71776082E
 4
 HOCH2O2 9/ 1/12 C 1H 3O 3 OG 300.000 5000.000
 1377.000 21
 1.16406115E 5.72826040E-03-2.05362036E-06 3.29070695E-10-1.95188360E-14
 2
 -2.53505769E3.07332064E 2.82068616E 2.47857094E-02-1.66186399E-05 3
 4.79633095E-09-4.28087766E-13-2.22077036E 1.70599803E
 4
 OCH2O2H 7/21/14 THERMC 1H 3O 3 OG 300.000 5000.000
 1418.000 31
 1.29622491E 4.21948855E-03-1.54275194E-06 2.50413077E-10-1.49855537E-14
 2
 -1.81326406E3.87016356E 4.46349361E-01 3.63049606E-02-3.26130978E-05 3
 1.37050551E-08-2.20872791E-12-1.41972598E 2.72960376E
 4
 HOCH2O 2/16/99 THERMC 1H 3O 2 OG 300.000 5000.000
 1452.000 11
 6.39521515E 7.43673043E-03-2.50422354E-06 3.84879712E-10-2.21778689E-14
 2
 -2.41108840E6.63865583E 4.11183145E 7.53850697E-03 3.77337370E-06 3

-5.38746005E-09 1.45615887E-12-2.28023001E 7.46807254E
 4
 O2CHO 6/26/95 THERMC 1H 10 3 0G 300.000 5000.000 1368.00
 11
 7.24075139E 4.63312951E-03-1.63693995E-06 2.59706693E-10-1.52964699E-14
 2
 -1.87027618E6.49547212E 3.96059309E 1.06002279E-02-5.25713351E-06 3
 1.01716726E-09-2.87487602E-14-1.73599383E 1.17807483E
 4
 HOCHO L 8/88H 2C 10 2 0G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.46138316E 0.64496364E-02-0.22908251E-05 0.36716047E-09-0.21873675E-13
 2
 -0.47514850E 0.84788383E 0.38983616E0.35587795E-02 0.35520538E-04 3
 -0.43849959E-07 0.17107769E-10-0.46770609E 0.73495397E0.45531246E 4
 OCHO ATCT/AC 1 O 2 H 1 0 G 200.000 6000.000 1000.00
 1
 4.14394211E 5.59738818E-03-1.99794019E-06 3.16179193E-10-1.85614483E-14
 2
 -1.72459887E 5.07778617E 4.68825921E4.14871834E-03 2.55066010E-05 3
 -2.84473900E-08 1.04422559E-11-1.69867041E 4.28426480E1.55992356E 4
 C2H6 G 8/88C 2H 6 0 0G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 4.04666411E 1.53538802E-02-5.47039485E-06 8.77826544E-10-5.23167531E-14
 2
 -1.24473499E9.68698313E-01 4.29142572E5.50154901E-03 5.99438458E-05 3
 -7.08466469E-08 2.68685836E-11-1.15222056E 2.66678994E1.00849652E 4
 C2H5 8/ 4/ 4 THERMC 2H 5 0 0G 300.000 5000.000
 1387.000 11
 5.88784390E 1.03076793E-02-3.46844396E-06 5.32499257E-10-3.06512651E-14
 2
 1.15065499E8.49651771E 1.32730217E 1.76656753E-02-6.14926558E-06 3
 -3.01143466E-10 4.38617775E-13 1.34284028E 1.71789216E
 4
 C2H5O2H 9/ 1/12 C 2H 60 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.04823538E 1.34779879E-02-4.62179078E-06 7.18618519E-10-4.17307436E-14
 2
 -2.46578171E2.84294243E 1.83755328E 3.38053586E-02-2.37548140E-05 3
 9.31974865E-09-1.58003428E-12-2.15814086E 1.80977584E
 4
 C2H5O2 9/ 1/12 C 2H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1389.000 21
 9.50282570E 1.20429839E-02-4.09491581E-06 6.33049241E-10-3.66133788E-14
 2
 -7.37069391E2.21717130E 3.90351912E 2.22599212E-02-1.01610079E-05 3
 1.71709751E-09 1.88166738E-14-5.09654081E 8.98722750E
 4
 C2H4 8/12/15 C 2H 4 0 0G 300.000 5000.000
 1392.000 01
 5.07061289E 9.11140768E-03-3.10506692E-06 4.80733851E-10-2.78321396E-14
 2
 3.66391217E6.64501414E 4.81118223E-01 1.83778060E-02-9.99633565E-06 3
 2.73211039E-09-3.01837289E-13 5.44386648E 1.85867157E
 4
 C2H3 8/12/15 C 2H 3 0 0G 300.000 5000.000
 1400.000 01

4.99675415E 6.55838271E-03-2.20921909E-06 3.39300272E-10-1.95316926E-14
 2
 3.34604382E3.01451097E 1.25545094E 1.57481597E-02-1.12218328E-05 3
 4.50915682E-09-7.74861577E-13 3.47435574E 1.69664043E
 4
 CHOCHO C 2H 2O 2 0G 300.000 5000.000
 1386.000 11
 9.75438561E 4.97645947E-03-1.74410483E-06 2.75586994E-10-1.61969892E-14
 2
 -2.95832896E2.61878329E 1.88105120E 2.36386368E-02-1.83443295E-05 3
 6.84842963E-09-9.92733674E-13-2.69280190E 1.59154793E
 4
 C2H3OOH 4/18/ 8 THERMC 2H 4O 2 0G 300.000 5000.000
 1397.000 21
 1.15749951E 8.09909174E-03-2.81808668E-06 4.42697954E-10-2.58998042E-14
 2
 -8.84852664E3.43859117E 1.35644398E 3.37002447E-02-2.75988500E-05 3
 1.14222854E-08-1.89488886E-12-5.49996692E 1.98354466E
 4
 C2H3OO H 3C 2O 2 G 298.150 2000.000 1000.00
 1
 6.04483828E 1.45511127E-02-7.50974622E-06 1.83488280E-09-1.66689681E-13
 2
 1.01699244E3.71144913E 1.09784776E 2.95333237E-02-2.27744360E-05 3
 7.20559155E-09-3.07929092E-13 1.13996101E 2.13563583E
 4
 CHCHO H 2C 2O 1 G 298.150 2000.000 1000.00
 1
 4.92632910E 9.71712147E-03-5.54855980E-06 1.53068537E-09-1.64742462E-13
 2
 2.89499494E 5.27874677E-01 2.33256751E 1.62952986E-02-9.72052177E-06
 3
 5.15124155E-10 1.03836514E-12 2.96585452E 1.39904923E
 4
 C2H2 G 1/91C 2 H 2 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 4.65878489E 4.88396667E-03-1.60828888E-06 2.46974544E-10-1.38605959E-14
 2
 2.57594042E3.99838194E 8.08679682E-01 2.33615762E-02-3.55172234E-05 3
 2.80152958E-08-8.50075165E-12 2.64289808E 1.39396761E 2.74459950E 4
 C2H T 5/10C 2 H 1 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 3.66270248E 3.82492252E-03-1.36632500E-06 2.13455040E-10-1.23216848E-14
 2
 6.71683790E 3.92205792E 2.89867676E 1.32988489E-02-2.80733327E-05 3
 2.89484755E-08-1.07502351E-11 6.70616050E 6.18547632E 6.83210436E 4
 H2CC L12/89H 2C 2 0 0G 200.000 6000.000
 1000.000 1
 0.42780340E 0.47562804E-02-0.16301009E-05 0.25462806E-09-0.14886379E-13
 2
 0.48316688E 0.64023701E 0.32815483E 0.69764791E-02-0.23855244E-05 3
 -0.12104432E-08 0.98189545E-12 0.48621794E 0.59203910E 0.49887266E 4
 C2H5OH 8/12/15 C 2H 6O 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 21
 8.14483865E 1.28314052E-02-4.29052743E-06 6.55971721E-10-3.76506611E-14
 2
 -3.24005526E1.86241126E 2.15805861E-01 2.95228396E-02-1.68271048E-05 3

4.49484797E-09-4.02451543E-13-2.94851823E 2.45725052E
 4
 C2H5O 8/12/15 C 2H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1467.000 11
 8.19120635E 1.10391986E-02-3.75270536E-06 5.80275784E-10-3.35735146E-14
 2
 -5.66847208E1.90131344E 2.90353584E 1.77256708E-02-2.69624757E-06 3
 -3.45830533E-09 1.25224784E-12-3.28930290E 1.13545591E
 4
 PC2H4OH 8/12/15 C 2H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 21
 8.06750150E 1.06143554E-02-3.57999360E-06 5.50363760E-10-3.17051769E-14
 2
 -6.92747939E1.53833428E 2.59479867E 2.27100669E-02-1.39473846E-05 3
 4.70095591E-09-6.90044236E-13-4.91486975E 1.43240718E
 4
 SC2H4OH 8/12/15 C 2H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1385.000 21
 8.15007136E 1.02549305E-02-3.40137764E-06 5.17509965E-10-2.96128942E-14
 2
 -1.05014386E1.73134615E 1.46281093E 2.39193995E-02-1.30667185E-05 3
 3.10615465E-09-1.85896007E-13-8.00790323E 1.92547092E
 4
 O2C2H4OH 9/ 1/12 THERMC 2H 50 3 0G 300.000 5000.000
 1506.000 41
 1.27503881E 1.11514325E-02-3.83473891E-06 5.98155829E-10-3.48372108E-14
 2
 -2.52770876E3.54317608E 7.04009800E 1.59564166E-02 2.21097416E-06 3
 -7.05197355E-09 2.08266026E-12-2.24524432E1.75361758E 4
 C2H4O2H 9/ 1/12 C 2H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1389.000 31
 1.00590614E 1.13378955E-02-3.89403387E-06 6.06090687E-10-3.52212353E-14
 2
 4.24048653E2.32086536E 2.75788364E 2.88271987E-02-2.08302264E-05 3
 8.47401397E-09-1.48617610E-12 3.00153893E 1.59921711E
 4
 C2H4O1-2 L 8/88C 2 H 4 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.54887641E 0.12046190E-01-0.43336931E-05 0.70028311E-09-0.41949088E-13
 2
 -0.91804251E0.70799605E 0.37590532E0.94412180E-02 0.80309721E-04 3
 -0.10080788E-06 0.40039921E-10-0.75608143E 0.78497475E0.63304657E 4
 C2H3O1-2 A 1/05C 2 H 3 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 5.60158035E 9.17613962E-03-3.28028902E-06 5.27903888E-10-3.15362241E-14
 2
 1.71446252E5.47228512E 3.58349017E6.02275805E-03 6.32426867E-05 3
 -8.18540707E-08 3.30444505E-11 1.85681353E 9.59725926E 1.97814471E 4
 CH3CHO L 8/88C 2 H 4 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.54041108E 0.11723059E-01-0.42263137E-05 0.68372451E-09-0.40984863E-13
 2
 -0.22593122E0.34807917E 0.47294595E0.31932858E-02 0.47534921E-04 3
 -0.57458611E-07 0.21931112E-10-0.21572878E 0.41030159E0.19987949E 4
 CH3CO IU2/03C 2 H 3 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 0.53137165E 0.91737793E-02-0.33220386E-05 0.53947456E-09-0.32452368E-13
 2

-0.36450414E0 0.16757558E 0.40358705E 0.87729487E-03 0.30710010E-04 3
 -0.39247565E-07 0.15296869E-10-0.26820738E 0.78617682E0.12388039E 4
 CH2CHO T03/10C 2 H 3 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.53928338E 7.80238629E-03-2.76413612E-06 4.42098906E-10-2.62954290E-14
 2
 -1.18858659E8.72091393E 2.79502600E 1.01099472E-02 1.61750645E-05 3
 -3.10303145E-08 1.39436139E-11 1.62944975E 1.23646657E 1.53380440E 4
 O2CH2CHO BOZ_03C 2H 3O 3 OG 300.000 5000.000
 1393.000 01
 1.11807543E 9.14479256E-03-3.15089833E-06 4.91944238E-10-2.86639180E-14
 2
 -1.55790331E2.87892740E1.29465843E 4.44936393E-02-4.26577074E-05 3
 2.07391950E-08-3.96828771E-12-1.18275628E 3.60778797E
 4
 HO2CH2CO BOZ_03C 2H 3O 3 OG 300.000 5000.000
 1386.000 01
 1.04146322E 1.12680116E-02-5.17494839E-06 1.00333285E-09-6.68165911E-14
 2
 -1.40955672E2.27894400E 2.22681686E 3.56781380E-02-3.26401909E-05 3
 1.47651988E-08-2.64794380E-12-1.18735095E 1.91581197E
 4
 C2H3OH 2/ 3/ 9 THERMC 2H 4O 1 OG 300.000 5000.000
 1410.000 11
 8.32598158E 8.03387281E-03-2.63928405E-06 3.98410726E-10-2.26551155E-14
 2
 -1.83221436E2.02080305E1.27972260E-01 3.38506073E-02-3.30644935E-05 3
 1.64858739E-08-3.19935455E-12-1.59914544E 2.30438601E
 4
 C2H2OH H 3C 2O 1 OG 300.000 5000.000
 1401.000 11
 8.20268447E 5.92989165E-03-1.99194448E-06 3.05794341E-10-1.76114732E-14
 2
 1.24881328E1.89670436E 6.41642616E-01 2.61903633E-02-2.30385370E-05 3
 1.02804704E-08-1.81971416E-12 1.48276951E 2.06750999E
 4
 CH2CO H 2C 2O 1 OG 300.00 5000.00 1000.00
 1
 5.35869367E 6.95641586E-03-2.64802637E-06 4.65067592E-10-3.08641820E-14
 2
 -7.90294013E3.98525731E 1.81422511E 1.99008590E-02-2.21416008E-05 3
 1.45028521E-08-3.98877068E-12-7.05394926E 1.36079359E
 4
 HCCO T 4/09H 1 C 2 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 5.91479333E 3.71408730E-03-1.30137010E-06 2.06473345E-10-1.21476759E-14
 2
 1.93596301E5.50567269E 1.87607969E 2.21205418E-02-3.58869325E-05 3
 3.05402541E-08-1.01281069E-11 2.01633840E 1.36968290E 2.14444387E 4
 HCCOH T12/09C 2 H 2 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.37509678E 5.49429011E-03-1.88136576E-06 2.93803536E-10-1.71771901E-14
 2
 8.93277676E8.24498007E 2.05541154E 2.52003372E-02-3.80821654E-05 3
 3.09890632E-08-9.89799902E-12 9.76872113E 1.22271534E 1.12217316E 4
 CH3CO3H 6/26/95 THERMC 2H 4O 3 OG 300.000 5000.000
 1391.000 31

1.25060485E 9.47789695E-03-3.30402246E-06 5.19630793E-10-3.04233568E-14
 2
 -4.59856703E3.79195947E 2.24135876E 3.37963514E-02-2.53887482E-05 3
 9.67583587E-09-1.49266157E-12-4.24677831E 1.70668133E
 4
 CH3CO3 4/ 3/ 0 THERMC 2H 30 3 0G 300.000 5000.000
 1391.000 21
 1.12522498E 8.33652672E-03-2.89014530E-06 4.52781734E-10-2.64354456E-14
 2
 -2.60238584E2.96370457E 3.60373432E 2.70080341E-02-2.08293438E-05 3
 8.50541104E-09-1.43846110E-12-2.34205171E 1.12014914E
 4
 CH3CO2 2/14/95 THERMC 2H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1395.000 11
 8.54059736E 8.32951214E-03-2.84722010E-06 4.41927196E-10-2.56373394E-14
 2
 -2.97290678E2.03883545E 1.37440768E 2.49115604E-02-1.74308894E-05 3
 6.24799508E-09-9.09516835E-13-2.72330150E 1.81405454E
 4
 CH3OCH3 2/11/14 THERMC 2H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1999.000 21
 6.03232751E 1.56155270E-02-5.50761030E-06 8.75666140E-10-5.17180562E-14
 2
 -2.52690354E8.25885183E 2.05597390E 2.07019456E-02-5.00382376E-06 3
 -1.62279885E-09 6.84330155E-13-2.35494445E 1.45029944E
 4
 CH3OCH2 2/11/14 THERMC 2H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 11
 6.62621974E 1.22219496E-02-4.12416696E-06 6.34127512E-10-3.65317390E-14
 2
 -3.33965890E8.95305753E 1.58874948E 2.24414123E-02-1.19434933E-05 3
 3.37160213E-09-4.15077249E-13-1.37208255E 1.87548958E
 4
 CH3OCH2O2H 2/12/14 THERMC 2H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1404.000 31
 1.28159161E 1.34818095E-02-4.50397729E-06 6.88229286E-10-3.94883680E-14
 2
 -4.06745921E3.78047802E 1.05786981E 4.36787095E-02-3.46383899E-05 3
 1.44808830E-08-2.46100643E-12-3.68851076E 2.43391936E
 4
 CH3OCH2O2 2/12/14 THERMC 2H 50 3 0G 300.000 5000.000
 1441.000 21
 1.19179361E 1.19412867E-02-3.93526185E-06 5.95756132E-10-3.39597705E-14
 2
 -2.34231833E3.20096863E 3.39930541E 3.09460407E-02-1.92548181E-05 3
 5.76033887E-09-6.16081571E-13-2.04433218E 1.39429608E
 4
 CH2OCH2O2H 2/12/14 THERMC 2H 50 3 0G 300.000 5000.000
 1418.000 21
 1.23892901E 1.11758961E-02-3.59249095E-06 5.34196366E-10-3.00536541E-14
 2
 -1.80551598E3.29576862E 1.62245477E-01 4.76101093E-02-4.52046954E-05 3
 2.18379311E-08-4.11295947E-12-1.46498100E 2.98253164E
 4
 O2CH2OCH2O2H 2/12/14 ERMC 2H 50 5 0G 300.000 5000.000
 1433.000 31
 1.77378326E 1.13589899E-02-3.67382539E-06 5.49255712E-10-3.10405899E-14
 2

-3.82903058E5.66609932E 2.39977678E 5.39881943E-02-4.87969524E-05 3
 2.19792134E-08-3.86106979E-12-3.37824638E 2.30683371E
 4
 HO2CH2OCHO 2/12/14 THERMC 2H 40 4 0G 300.000 5000.000
 1386.000 31
 1.57136128E 9.64430166E-03-3.44136025E-06 5.49722196E-10-3.25360322E-14
 2
 -6.29409094E5.29505242E 1.21909586E 4.28858235E-02-3.17634222E-05 3
 1.11542676E-08-1.49753153E-12-5.79287926E 2.49759193E
 4
 OCH2OCHO 5/29/14 THERMC 2H 30 3 0G 300.000 5000.000
 1523.000 21
 1.24013200E 7.83738243E-03-2.82992688E-06 4.55558739E-10-2.71061389E-14
 2
 -4.68453470E3.78084549E 1.89539692E 2.74118545E-02-1.36476090E-05 3
 1.26325603E-09 5.17970476E-13-4.27879440E 2.02333278E
 4
 HOCH2OCO 5/29/14 THERMC 2H 30 3 0G 300.000 5000.000
 1443.000 11
 1.11498410E 9.34736520E-03-3.35541548E-06 5.38037115E-10-3.19260183E-14
 2
 -4.75012119E2.95983867E 5.95255071E 8.42196282E-03 1.36741678E-05 3
 -1.46786275E-08 3.84143533E-12-4.44470269E 2.85657217E
 4
 CH3OCH2O 5/15/14 THERMC 2H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1523.000 31
 9.81288609E 1.21313106E-02-4.30285768E-06 6.84443177E-10-4.03862658E-14
 2
 -2.50760742E2.51866352E 5.63414373E 8.92830283E-03 1.37225633E-05 3
 -1.40497059E-08 3.54625624E-12-2.22825214E 1.93588846E
 4
 CH3OCHO T 6/08C 2 H 4 O 2 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.33360880E 1.34851485E-02-4.84305805E-06 7.81719241E-10-4.67917447E-14
 2
 -4.68316521E6.91542601E 5.96757028E9.38085425E-03 7.07648417E-05 3
 -8.29932227E-08 3.13522917E-11-4.55713267E 7.50341113E-01-4.37330508E
 4
 CH3OCO 5/ 8/ 3 THERMC 2H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1601.000 21
 9.73659803E 7.42432713E-03-2.65641779E-06 4.25031143E-10-2.51824924E-14
 2
 -2.36015721E2.36353471E 4.16215406E 1.38037511E-02-3.08486109E-07 3
 -4.56430814E-09 1.46909632E-12-2.10130301E 8.64301044E
 4
 CH2OCHO 4/15/ 8 THERMC 2H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1442.000 21
 1.00960096E 7.19887066E-03-2.59813465E-06 4.18110812E-10-2.48723387E-14
 2
 -2.36389018E2.71144175E 2.31031671E 1.80474065E-02-2.71519637E-06 3
 -4.60918579E-09 1.70037078E-12-2.02910878E 1.71549722E
 4
 C3H8 8/12/15 C 3H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1390.000 21
 9.15541310E 1.72574139E-02-5.85614868E-06 9.04190155E-10-5.22523772E-14
 2
 -1.75762439E2.77418510E 2.40878470E-01 3.39548599E-02-1.60930874E-05 3

2.83480628E-09 2.78195172E-14-1.40362853E 2.16500800E
 4
 IC3H7 8/12/15 C 3H 7 0 0G 298.0 6000.0 1000.0
 1
 6.70775549E 1.74048076E-02-6.07615926E-06 9.60084351E-10-5.65656490E-14
 2
 7.55377821E1.03686516E8.97467137E-01 4.15744022E-02-4.94778349E-05 3
 4.56493655E-08-1.79085437E-11 9.93950407E 2.92641758E
 4
 NC3H7 8/12/15 C 3H 7 0 0G 298.0 6000.0 1000.0
 1
 7.48614243E 1.65769478E-02-5.74876481E-06 9.04103694E-10-5.30867231E-14
 2
 8.93710008E1.42595379E2.20120865E 5.29641653E-02-7.23640506E-05 3
 6.36996940E-08-2.29332581E-11 1.15130744E 3.43669174E
 4
 NC3H7O2H 8/12/15 C 3H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1392.000 41
 1.42246236E 1.74340964E-02-5.97063522E-06 9.27753851E-10-5.38585168E-14
 2
 -2.88159737E4.74357865E 1.35815897E 4.56683952E-02-2.91646368E-05 3
 9.41701313E-09-1.22337394E-12-2.41528416E 2.23322825E
 4
 NC3H7O2 8/12/15 C 3H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.32753283E 1.61303126E-02-5.52348308E-06 8.58197168E-10-4.98172586E-14
 2
 -1.16032968E4.15091215E 2.13311681E 3.96692045E-02-2.37570127E-05 3
 6.96020417E-09-7.82576856E-13-7.46687112E 1.92444565E
 4
 IC3H7O2H 8/12/15 C 3H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1405.000 41
 1.44896107E 1.68268026E-02-5.67601391E-06 8.72850837E-10-5.02993991E-14
 2
 -3.06478491E5.01352281E 1.77384705E 4.75813498E-02-3.43745304E-05 3
 1.31405381E-08-2.06922904E-12-2.63458844E 1.77669753E
 4
 IC3H7O2 8/12/15 C 3H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1407.000 31
 1.35268120E 1.54306581E-02-5.17464218E-06 7.92548669E-10-4.55415379E-14
 2
 -1.33946348E4.40461451E 2.58517502E 4.16107259E-02-2.92193877E-05 3
 1.08614807E-08-1.66312005E-12-9.67013161E 1.44731300E
 4
 NC3H7O 8/12/15 C 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1386.000 21
 1.15279177E 1.53775991E-02-5.23946272E-06 8.11382512E-10-4.69927603E-14
 2
 -9.85099867E3.54233008E 2.57486880E 3.07100600E-02-1.20048836E-05 3
 3.40807108E-12 7.25275283E-13-6.20913350E 1.45966401E
 4
 IC3H7O 8/12/15 C 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1527.000 21
 1.19648494E 1.42943974E-02-4.71413211E-06 7.14027066E-10-4.07161162E-14
 2
 -1.17519389E3.88860959E 2.36108410E 3.45650027E-02-1.94579631E-05 3
 4.71536901E-09-2.64704937E-13-8.28791395E 1.33112436E
 4

C3H6OOH1-2 9/ 1/12 C 3H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1387.000 41
 1.38088686E 1.43845650E-02-4.74440961E-06 7.19308280E-10-4.10654123E-14
 2
 -5.14352831E4.20210765E 2.83631132E 3.88229894E-02-2.47944364E-05 3
 7.85644898E-09-9.58634300E-13-1.26002528E 1.72549973E
 4
 C3H6OOH1-3 9/ 1/12 C 3H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1401.000 41
 1.39130757E 1.40218463E-02-4.55921149E-06 6.84182417E-10-3.87696213E-14
 2
 -3.65650518E4.21532559E 1.74271107E 4.53733504E-02-3.57580373E-05 3
 1.48540053E-08-2.49981756E-12 2.32580844E 2.20973041E
 4
 C3H6OOH2-1 9/ 1/12 C 3H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1393.000 41
 1.36645362E 1.54329764E-02-5.29285952E-06 8.23001262E-10-4.77931121E-14
 2
 -5.58295862E4.28758364E 2.38465746E 4.42928555E-02-3.50977087E-05 3
 1.53695144E-08-2.81167824E-12-1.80979612E 1.69923285E
 4
 C3H6OOH1-2O2 9/ 1/12 C 3H 70 4 0G 300.000 5000.000
 1404.000 51
 1.91044980E 1.44076100E-02-4.72127814E-06 7.12631642E-10-4.05578490E-14
 2
 -2.50270510E6.63747978E 3.99085043E 5.31865338E-02-4.28597948E-05 3
 1.77187019E-08-2.92768695E-12-2.02143526E 1.34150719E
 4
 C3H6OOH1-3O2 9/ 1/12 C 3H 70 4 0G 300.000 5000.000
 1416.000 51
 1.81661664E 1.47644887E-02-4.74842743E-06 7.06972467E-10-3.98305587E-14
 2
 -2.26256376E5.93719393E 5.56933350E 4.68523421E-02-3.58917784E-05 3
 1.43314525E-08-2.29776083E-12-1.86065694E 7.18655005E
 4
 C3H6OOH2-1O2 9/ 1/12 C 3H 70 4 0G 300.000 5000.000
 1404.000 51
 1.91044980E 1.44076100E-02-4.72127814E-06 7.12631642E-10-4.05578490E-14
 2
 -2.50270510E6.63747978E 3.99085043E 5.31865338E-02-4.28597948E-05 3
 1.77187019E-08-2.92768695E-12-2.02143526E 1.34150719E
 4
 C3KET12 10/17/12 C 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1385.000 41
 1.70187760E 1.32097361E-02-4.67054741E-06 7.41411770E-10-4.36869787E-14
 2
 -4.23572589E5.92615939E 1.03882879E 5.34180080E-02-4.47684141E-05 3
 1.94651680E-08-3.45055244E-12-3.70308881E 2.56511209E
 4
 C3KET13 10/17/12 C 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1508.000 41
 1.73612692E 1.32330813E-02-4.75332110E-06 7.62529227E-10-4.52613717E-14
 2
 -4.06248060E6.17768199E 4.74956819E 3.14080991E-02-6.83838427E-06 3
 -5.67123901E-09 2.27686972E-12-3.51924570E 9.83753744E
 4
 C3H51-2,3OOH 8/26/3 THRC 3H 70 4 0G 300.000 5000.000
 1386.000 61

2.12378169E 1.39519596E-02-4.94539222E-06 7.86381389E-10-4.63925564E-14
 2
 -1.92864584E7.69636561E 2.55619708E 6.13504487E-02-5.23205391E-05 3
 2.28208029E-08-4.02231508E-12-1.31353414E 2.21043799E
 4
 C3H52-1,3OOH 8/26/3 THRC 3H 70 4 0G 300.000 5000.000
 1379.000 61
 2.02817964E 1.48155431E-02-5.25503386E-06 8.35963453E-10-4.93308915E-14
 2
 -1.80085066E7.22688262E 4.12253742E 5.19553611E-02-3.83733727E-05 3
 1.45851637E-08-2.29820536E-12-1.22759164E 1.48367359E
 4
 C3H501-2OOH-3 10/13 THERC 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1432.000 31
 1.57042382E 1.30255692E-02-4.23544254E-06 6.35555595E-10-3.60110207E-14
 2
 -2.77269333E5.51895464E3.25001215E 6.65787151E-02-6.18859778E-05 3
 2.84638649E-08-5.08511634E-12-2.22371240E 4.30381280E
 4
 C3H501-3OOH-2 10/13 THERC 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1434.000 21
 1.44493479E 1.36372560E-02-4.25836513E-06 6.20006211E-10-3.43451580E-14
 2
 -2.77372360E5.06099103E4.43959178E 7.16532928E-02-7.15032351E-05 3
 3.51737842E-08-6.63682938E-12-2.27250412E 4.56394038E
 4
 C3H601-2 A01/05C 3 H 6 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 8.01491079E 1.73919953E-02-6.26027968E-06 1.01188256E-09-6.06239111E-14
 2
 -1.51980838E1.88279964E 3.42806676E 6.25176642E-03 6.13196311E-05 3
 -8.60387185E-08 3.51371393E-11-1.28446646E 1.04244994E1.11564001E 4
 C3H601-3 A11/04C 3 H 6 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.80716906E 1.88824545E-02-6.79082475E-06 1.09713919E-09-6.57154952E-14
 2
 -1.36547629E1.35382154E 5.15283752E1.86401716E-02 1.29980652E-04 3
 -1.58629974E-07 6.20668783E-11-1.13243512E 4.73561224E9.75233898E 4
 C3H6 8/12/15 C 3H 6 0 0G 298.000 6000.000
 1000.000 01
 6.59032304E 1.52592866E-02-5.30369441E-06 8.35510888E-10-4.91215549E-14
 2
 -2.47481113E1.15748238E1.54606737E 4.36553128E-02-5.61392417E-05 3
 4.98421927E-08-1.84798923E-11 2.07056233E 2.99232495E
 4
 C3H5-A 8/12/15 C 3H 5 0 0G 298.000 6000.000
 1000.000 01
 7.37604097E 1.23449782E-02-4.26463882E-06 6.69045835E-10-3.92202554E-14
 2
 1.77332960E1.61758204E3.32899442E 5.38423469E-02-7.65500752E-05 3
 6.35512285E-08-2.14283003E-11 2.03420628E 3.68038362E
 4
 C3H5-S 8/12/15 C 3H 5 0 0G 300.000 5000.000
 1390.000 11
 7.95954498E 1.11163183E-02-3.75197834E-06 5.77246260E-10-3.32768957E-14
 2
 2.80567891E1.79800372E 1.61793372E 2.44803904E-02-1.41856503E-05 3

4.16402233E-09-4.90904795E-13 3.04291037E 1.66341443E
 4
 C3H5-T 8/12/15 C 3H 5 0 0G 300.000 5000.000
 1376.000 11
 7.69949212E 1.17803985E-02-4.07791749E-06 6.38119222E-10-3.72229675E-14
 2
 2.61747145E1.68305890E 2.29256998E 1.98527646E-02-6.42635654E-06 3
 -5.90016395E-10 5.05491095E-13 2.85773377E 1.39407124E
 4
 CC3H6 C 3H 60 0 0G 200.000 6000.000 1000.
 1
 6.21663437E 1.65393591E-02-5.90075838E-06 9.48095199E-10-5.65661522E-14
 2
 2.95937491E1.36041009E 2.83278674E5.21028618E-03 9.29583210E-05 3
 -1.22753194E-07 4.99191366E-11 5.19520048E 1.08306333E 6.41047999E 4
 C3H5O KPS12 C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 01
 1.02638186E 1.17609932E-02-3.89837957E-06 5.92650815E-10-3.38867417E-14
 2
 7.25938472E2.75108651E 8.24068673E-01 3.46749909E-02-2.51786795E-05 3
 9.56781953E-09-1.48085302E-12 1.04203725E 2.28283070E
 4
 CH2CHOCH2 8/ 8/15 C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1384.000 21
 1.20076931E 1.05055204E-02-3.69920541E-06 5.85629983E-10-3.44431587E-14
 2
 6.97311613E3.75189859E 1.15350351E 3.51253596E-02-2.50071619E-05 3
 9.00715632E-09-1.32376643E-12 1.08300872E 2.10606652E
 4
 CH3CHCHO C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1424.000 21
 1.06781476E 1.12805711E-02-3.89010759E-06 6.07617268E-10-3.54120848E-14
 2
 -7.73234209E3.24971238E 1.47166733E 2.69251618E-02-1.00248013E-05 3
 -1.13421435E-09 1.03416658E-12-4.04142023E 1.88722472E
 4
 AC4H7OOH 6/17/13 THERMC 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1395.000 41
 1.47661443E 2.12235231E-02-7.09403390E-06 1.08423759E-09-6.22145708E-14
 2
 -1.35617411E4.77449138E 1.33470633E 5.27831440E-02-3.58861360E-05 3
 1.32495013E-08-2.06619289E-12-8.87891782E 2.43857336E
 4
 C3H6OH1-2 9/ 1/12 C 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 31
 1.00338281E 1.60227373E-02-5.41658448E-06 8.34191172E-10-4.81215988E-14
 2
 -1.27912397E2.39034395E 5.05207596E-01 3.63869988E-02-2.15530901E-05 3
 6.45584786E-09-7.71267046E-13-9.26980840E 2.79804349E
 4
 CH3CHCO 03/03/95 THERMC 3H 40 1 0G 300.000 5000.000 1400.00
 41
 1.00219123E 9.56966300E-03-3.26221644E-06 5.05231706E-10-2.92593257E-14
 2
 -1.42482738E2.77829973E 1.48380119E 3.22203013E-02-2.70250033E-05 3
 1.20499164E-08-2.18365931E-12-1.15276540E 1.71552068E
 4

AC3H5OOH GOLDSMITH C 3H 60 2 0G 298.0 6000.0
1000.000 31
1.20838649E 1.47946591E-02-5.13212591E-06 8.07504999E-10-4.74394983E-14
2
-1.02184463E3.36434791E 3.18124993E 4.35233041E-02-5.16277353E-05 3
4.32011427E-08-1.57714983E-11-7.63521503E 1.21725683E
4
C3H6OH2-1 8/ 9/ 4 THERMC 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
1392.000 31
1.12222277E 1.36444398E-02-4.51406709E-06 7.10523275E-10-4.22690392E-14
2
-1.75350136E3.18911926E 1.09670360E 3.80727565E-02-2.75022497E-05 3
1.07477493E-08-1.74895773E-12-1.40764487E 2.22475799E
4
HOC3H6O2 9/ 1/12 C 3H 70 3 0G 300.000 5000.000
1407.000 41
1.56948113E 1.57703692E-02-5.30501726E-06 8.14307835E-10-4.68666193E-14
2
-3.24540840E5.06084117E 2.84960487E 4.77244552E-02-3.60392974E-05 3
1.43479922E-08-2.33507634E-12-2.82106103E 1.76478537E
4
SC3H5OH 2/ 3/ 9 C 3H 60 1 0G 300.000 5000.000
1404.000 21
1.11222064E 1.27745410E-02-4.25315532E-06 6.48216484E-10-3.71190850E-14
2
-2.36690795E3.41335182E3.53977226E-02 4.34969453E-02-3.74479918E-05 3
1.70906074E-08-3.13775054E-12-2.02502608E 2.41528201E
4
IC3H5OH 8/ 1/95 THERMC 3H 60 1 0G 300.000 5000.000 1374.00
21
1.07381025E 1.31698194E-02-4.41529622E-06 6.77009837E-10-3.89608901E-14
2
-2.47298321E3.13634050E 1.58376391E 3.16215366E-02-1.73664942E-05 3
4.18927663E-09-2.79899620E-13-2.12643496E 1.88313766E
4
C3H5OH T06/10C 3 H 6 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
8.72477114E 1.63942712E-02-5.90852993E-06 9.53262253E-10-5.70318010E-14
2
-1.90496618E1.97198674E 3.15011905E 1.28538274E-02 4.28438434E-05 3
-6.67818707E-08 2.80408237E-11-1.66413668E 1.35066359E1.48710589E 4
CH2CCH2OH 9/ 8/95 THERMC 3H 50 1 0G 300.000 5000.000 1372.00
21
9.70702027E 1.13972660E-02-3.77993962E-06 5.75209277E-10-3.29229125E-14
2
9.13212884E2.25012933E 2.88422544E 2.42428071E-02-1.14152268E-05 3
1.71775334E-09 1.42177454E-13 1.17935615E 1.52102335E
4
C3H4-P T 2/90H 4 C 3 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
0.60252400E 0.11336542E-01-0.40223391E-05 0.64376063E-09-0.38299635E-13
2
0.19620942E0.86043785E 0.26803869E 0.15799651E-01 0.25070596E-05 3
-0.13657623E-07 0.66154285E-11 0.20802374E 0.98769351E 0.22302059E 4
C3H4-A L 8/89C 3 H 4 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
0.63168722E 0.11133728E-01-0.39629378E-05 0.63564238E-09-0.37875540E-13
2

0.20117495E0.10995766E 0.26130445E 0.12122575E-01 0.18539880E-04 3
 -0.34525149E-07 0.15335079E-10 0.21541567E 0.10226139E 0.22962267E 4
 C3H3 T 7/11C 3 H 3 0 0 G 200.000 6000.00
 1000.000 1
 7.14221719E 7.61902211E-03-2.67460030E-06 4.24914904E-10-2.51475443E-14
 2
 3.95709594E1.25848690E 1.35110873E 3.27411291E-02-4.73827407E-05 3
 3.76310220E-08-1.18541128E-11 4.07679941E 1.52058598E 4.22762135E 4
 CC3H4 T12/81C 3H 4 0 0G 300.000 5000.00 1000.00
 1
 0.66999931E 0.10357372E-01-0.34551167E-05 0.50652949E-09-0.26682276E-13
 2
 0.30199051E0.13378770E0.24621047E-01 0.23197215E-01-0.18474357E-05 3
 -0.15927593E-07 0.86846155E-11 0.32334137E 0.22729762E 0.3332728 E 4
 C3H2 T12/00C 3 H 2 0 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.67324762E 5.57728845E-03-1.99180164E-06 3.20289156E-10-1.91216272E-14
 2
 7.57571184E9.72894405E 2.43417332E 1.73013063E-02-1.18294047E-05 3
 1.02756396E-09 1.62626314E-12 7.69074892E 1.21012230E 7.83005132E 4
 H2CCC (S) 0C 3H 2 0 0G 200.000 5000.000 1500.00
 0 1
 0.64888762E 0.53112789E-02-0.17809490E-05 0.27252642E-09-0.15619590E-13
 2
 0.63661864E0.10064283E 0.37229726E 0.92589854E-02-0.23006191E-05 3
 -0.10200808E-08 0.45374357E-12 0.64877289E 0.56865936E
 4
 C3H2 (S) 0C 3H 2 0 0G 200.000 5000.000 900.00
 0 1
 0.77642570E 0.47112774E-02-0.16170637E-05 0.25472406E-09-0.15038572E-13
 2
 0.66849672E0.15098549E 0.52976482E 0.16987466E-01-0.24266517E-04 3
 0.18653681E-07-0.55763001E-11 0.67240466E0.37540041E 4
 C3H2C 0C 3H 2 0 0G 200.000 5000.000 1500.00
 0 1
 0.65632680E 0.52363256E-02-0.17544830E-05 0.26866106E-09-0.15428509E-13
 2
 0.56514618E0.12000607E 0.11295888E 0.17287401E-01-0.11366823E-04 3
 0.34569296E-08-0.36615951E-12 0.58419080E 0.17331448E
 4
 PC3H4OH-2 4/ 2/13 THERMC 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1403.000 21
 1.07164095E 1.06066461E-02-3.51374060E-06 5.33713932E-10-3.04901511E-14
 2
 4.98486803E2.98329329E 1.42757363E 3.64825569E-02-3.18007132E-05 3
 1.46914605E-08-2.72331227E-12 7.80342663E 1.85890339E
 4
 SC3H4OH 3/28/13 C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1407.000 21
 1.20968484E 9.43976596E-03-3.10773897E-06 4.69609188E-10-2.67165710E-14
 2
 -3.85854894E3.76795997E 1.72870561E 4.41015870E-02-4.72013860E-05 3
 2.52073596E-08-5.13375710E-12 2.22720503E 1.43928257E
 4
 C3H3O 2/17/14 CZHOUH 3C 30 1 G 298.150 2000.000 1000.00
 1
 4.19355696E 1.95625103E-02-1.22336450E-05 3.90615061E-09-5.08539231E-13
 2

3.14931737E 5.03216224E 8.75023836E-01 3.51184068E-02-3.89901356E-05
 3
 2.40255750E-08-6.10883631E-12 3.20427921E 2.04717253E
 4
 C3H3O2H 1/31/13 C 3H 40 2 0G 300.000 5000.000
 1385.000 31
 1.38152174E 8.62174763E-03-3.06710006E-06 4.88874247E-10-2.88888385E-14
 2
 6.29182941E4.39151257E 1.09787313E 4.22717882E-02-3.83969355E-05 3
 1.77405069E-08-3.27674312E-12 1.03592314E 2.30651783E
 4
 C2HCHO 1/31/13 C 3H 20 1 0G 300.000 5000.000
 2012.000 11
 7.99952054E 7.07825497E-03-2.63086819E-06 4.33073185E-10-2.62003284E-14
 2
 8.71863156E1.57226237E 4.20776611E 1.34382727E-02-5.15442099E-06 3
 -2.24570818E-11 2.74111284E-13 1.02117375E 5.43871873E
 4
 C2H5CHO 8/12/15 C 3H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1449.000 21
 1.06224453E 1.35569132E-02-4.60754771E-06 7.12755462E-10-4.12631683E-14
 2
 -2.78692266E3.16628752E 2.18895588E 2.58289987E-02-6.04170058E-06 3
 -3.70702654E-09 1.57131095E-12-2.42671146E 1.61496330E
 4
 C2H5CO A10/04C 3 H 5 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
 1
 6.52325448E 1.54211952E-02-5.50898157E-06 8.85889862E-10-5.28846399E-14
 2
 -7.19631634E5.19862218E 6.25722402E9.17612184E-03 7.61190493E-05 3
 -9.05514997E-08 3.46198215E-11-5.91616484E 2.23330599E3.94851891E 4
 CH2CH2CHO C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1437.000 21
 1.00673122E 1.14971005E-02-3.90137798E-06 6.03029101E-10-3.48958224E-14
 2
 -2.75080876E2.58818404E 2.55799036E 2.23391941E-02-4.89741478E-06 3
 -3.58874384E-09 1.47175030E-12 4.53127696E 1.67016285E
 4
 C2H3CHO KPS12 C 3H 40 1 0G 300.000 5000.000
 1398.000 01
 9.99155394E 9.82348001E-03-3.31203088E-06 5.09524422E-10-2.93821890E-14
 2
 -1.25303509E2.85168883E 7.33844455E-01 3.17482671E-02-2.29599468E-05 3
 8.42104232E-09-1.23613478E-12-9.38473548E 2.10308851E
 4
 C2H3CO KPS12 C 3H 30 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 01
 8.86032735E 8.48985205E-03-2.90350080E-06 4.50763986E-10-2.61524281E-14
 2
 7.73489171E2.06978792E 1.65335195E 2.57402596E-02-1.89009911E-05 3
 7.29174972E-09-1.16083226E-12 1.02020654E 1.78705872E
 4
 CH3COCH3 8/12/15 C 3H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1394.000 21
 8.87619308E 1.45700263E-02-4.84823280E-06 7.38614777E-10-4.22831194E-14
 2
 -3.06046242E2.12730484E 2.20008426E 2.74019559E-02-1.31342003E-05 3

2.57150371E-09-6.21509091E-14-2.79933966E 1.55883508E
 4
 CH3COCH2 2/14/13 THERMC 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1387.000 21
 1.09524298E 1.11458668E-02-3.86262877E-06 6.05088857E-10-3.53293362E-14
 2
 -9.60833727E3.15622776E 1.13381826E 3.25095045E-02-2.10424651E-05 3
 6.64421151E-09-8.12618901E-13-6.04868361E 2.17158655E
 4
 CH3COCH2O2 2/14/13 THERMC 3H 50 3 0G 300.000 5000.000
 1397.000 31
 1.65756401E 1.06465489E-02-3.61368681E-06 5.59053564E-10-3.23832271E-14
 2
 -2.42541401E5.45304899E 1.19378141E 4.98027161E-02-4.17999508E-05 3
 1.74527607E-08-2.88198761E-12-1.93244224E 2.67877493E
 4
 CH3COCH2O 2/ 8/13 THERMC 3H 50 2 0G 300.000 5000.000
 2002.000 21
 9.84061707E 1.59181106E-02-5.85164644E-06 9.56160073E-10-5.75477263E-14
 2
 -2.11214823E2.12330791E 5.85960137E 1.78954926E-02 7.41506398E-07 3
 -5.40032753E-09 1.47393197E-12-1.90714739E 2.70987883E
 4
 C3KET21 2/14/13 THERMC 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1394.000 41
 1.75768076E 1.20311704E-02-4.11633942E-06 6.40149366E-10-3.72127562E-14
 2
 -4.15502347E6.09097100E8.74352903E-01 6.12501498E-02-5.51474542E-05 3
 2.48491014E-08-4.42613472E-12-3.58060819E 3.59306224E
 4
 C4H10 8/12/15 C 4H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1392.000 31
 1.24923813E 2.15951935E-02-7.34277611E-06 1.13529859E-09-6.56730149E-14
 2
 -2.17598985E4.41546866E9.20862487E-02 4.69703816E-02-2.54761945E-05 3
 6.35894738E-09-5.16005946E-13-1.69556758E 2.49101571E
 4
 PC4H9 8/12/15 C 4H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1393.000 31
 1.18547949E 1.96962095E-02-6.71054229E-06 1.03891144E-09-6.01513573E-14
 2
 3.38182243E3.72343446E 4.09644702E-01 4.29511341E-02-2.36582809E-05 3
 6.15744917E-09-5.64300671E-13 7.74319150E 2.55312526E
 4
 SC4H9 8/12/15 C 4H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1682.000 31
 9.25139144E 2.24301385E-02-7.82648592E-06 1.23559460E-09-7.26249864E-14
 2
 3.11148804E2.16080436E 9.42662332E-01 3.77414530E-02-1.58911963E-05 3
 1.75489317E-09 2.89725750E-13 6.20542636E 2.42126605E
 4
 PC4H9O C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 31
 1.53371588E 1.92789649E-02-6.56856538E-06 1.01724003E-09-5.89183466E-14
 2
 -1.41958782E5.45071855E 1.84659093E 4.61054365E-02-2.44856516E-05 3
 5.11293268E-09-1.07538298E-13-9.09206746E 1.95237441E
 4

SC4H90 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1411.000 31
 1.52130012E 1.90029969E-02-6.39004701E-06 9.80774402E-10-5.64493733E-14
 2
 -1.59888805E5.43195369E 2.01772535E 4.70083969E-02-2.74726645E-05 3
 7.36290028E-09-6.30414237E-13-1.11892176E 1.74371746E
 4
 PC4H902 8/12/15 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1391.000 41
 1.66120049E 2.04752336E-02-7.01415262E-06 1.09010510E-09-6.32913959E-14
 2
 -1.57901735E5.79272276E 1.80541406E 5.26493060E-02-3.30870383E-05 3
 1.04593484E-08-1.32305701E-12-1.03866773E 2.24829685E
 4
 SC4H902 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1403.000 41
 1.68209433E 1.98834074E-02-6.71755569E-06 1.03411636E-09-5.96371075E-14
 2
 -1.75815350E5.95731156E 2.27751066E 5.44334651E-02-3.82988187E-05 3
 1.42447767E-08-2.18864515E-12-1.25909100E 1.83237264E
 4
 PC4H902H 8/12/15 C 4H 100 2 0G 300.000 5000.000
 1393.000 51
 1.75610913E 2.17832847E-02-7.46366287E-06 1.16012068E-09-6.73630029E-14
 2
 -3.30036118E6.38547212E 1.04177717E 5.85996659E-02-3.84212378E-05 3
 1.28728231E-08-1.75491358E-12-2.70744200E 2.55179528E
 4
 SC4H902H C 4H 100 2 0G 300.000 5000.000
 1402.000 51
 1.78075939E 2.12546017E-02-7.20960281E-06 1.11291271E-09-6.43060022E-14
 2
 -3.48455718E6.58011470E 1.44010868E 6.05300206E-02-4.36262678E-05 3
 1.66226146E-08-2.61556930E-12-2.92631492E 2.17354113E
 4
 C4H8OOH1-2 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1389.000 51
 1.67810269E 1.99677597E-02-6.85257220E-06 1.06628911E-09-6.19616154E-14
 2
 -9.14762760E5.68667893E 2.91878364E 4.86143951E-02-2.81342168E-05 3
 7.64456491E-09-7.32889491E-13-3.94464787E 1.89326241E
 4
 C4H8OOH1-3 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1396.000 51
 1.61247782E 2.02420980E-02-6.88631475E-06 1.06534945E-09-6.16599545E-14
 2
 -9.16802012E5.26575415E 2.46292502E 4.70131194E-02-2.42145198E-05 3
 4.65407810E-09 1.62198662E-14-3.95787917E 2.24569578E
 4
 C4H8OOH1-4 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1393.000 51
 1.69217927E 1.99305696E-02-6.85727522E-06 1.06879474E-09-6.21774931E-14
 2
 -7.87920857E5.76630146E 1.35984095E 5.52812385E-02-3.75640846E-05 3
 1.32624209E-08-1.93623296E-12-2.34455867E 2.63197893E
 4
 C4H8OOH2-1 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1404.000 51

1.77648250E 1.87777052E-02-6.36410476E-06 9.81958228E-10-5.67252066E-14
 2
 -9.93851667E6.28169590E 2.32205003E 5.55032280E-02-3.97237996E-05 3
 1.47353739E-08-2.22481777E-12-4.67331585E 1.98332327E
 4
 C4H8OOH2-3 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1403.000 51
 1.70353922E 1.92729887E-02-6.50684653E-06 1.00126173E-09-5.77270961E-14
 2
 -1.09437234E5.87403112E 3.30289851E 5.08231524E-02-3.39615358E-05 3
 1.17622237E-08-1.66012808E-12-6.13671017E 1.51726178E
 4
 C4H8OOH2-4 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1403.000 51
 1.72354039E 1.91946365E-02-6.49946502E-06 1.00210964E-09-5.78559962E-14
 2
 -9.71158144E5.98986150E 1.82672511E 5.69912331E-02-4.24389492E-05 3
 1.67119278E-08-2.70635765E-12-4.54629884E 2.22051948E
 4
 C4H8O1-2 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1463.000 21
 1.41886108E 1.63162740E-02-5.16581368E-06 7.60173986E-10-4.24548403E-14
 2
 -2.02839382E5.12817914E4.29657099E 6.75906816E-02-5.89614134E-05 3
 2.59401158E-08-4.45926746E-12-1.48799944E 4.47755567E
 4
 C4H8O1-3 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1447.000 11
 1.32076917E 1.77467973E-02-5.69933762E-06 8.47771212E-10-4.77345874E-14
 2
 -2.11717546E4.78386420E5.37284363E 6.62224444E-02-5.35318273E-05 3
 2.19451842E-08-3.54479816E-12-1.54144887E 4.98345472E
 4
 C4H8O1-4 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1484.000 01
 1.22763349E 1.89105920E-02-6.09113637E-06 9.08066245E-10-5.12149503E-14
 2
 -2.92260872E4.41235671E7.78117916E 6.98405060E-02-5.45315920E-05 3
 2.13029617E-08-3.24666872E-12-2.28996340E 6.17620955E
 4
 C4H8O2-3 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1403.000 21
 1.06341771E 2.41442268E-02-1.13123977E-05 2.25480711E-09-1.54043041E-13
 2
 -2.10383343E3.36763636E4.48183187E 6.89313360E-02-6.15371646E-05 3
 2.73743747E-08-4.85890996E-12-1.68924193E 4.38882874E
 4
 C4H8OOH1-2O2 C 4H 90 4 0G 300.000 5000.000
 1400.000 61
 2.15734750E 2.04528589E-02-6.99497777E-06 1.08597818E-09-6.30071127E-14
 2
 -2.88428166E7.84560716E 3.02241018E 6.53862812E-02-4.89645658E-05 3
 1.90437784E-08-3.02309317E-12-2.25805572E 2.05729328E
 4
 C4H8OOH1-3O2 C 4H 90 4 0G 300.000 5000.000
 1400.000 61
 2.15734750E 2.04528589E-02-6.99497777E-06 1.08597818E-09-6.30071127E-14
 2

-2.88428166E7.84560716E 3.02241018E 6.53862812E-02-4.89645658E-05 3
 1.90437784E-08-3.02309317E-12-2.25805572E 2.05729328E
 4
 C4H8OOH1-4O2 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1387.000 71
 2.26393370E 1.98017374E-02-6.92349554E-06 1.09100182E-09-6.39617643E-14
 2
 -2.75442161E8.40747892E 2.91974455E 6.34948347E-02-4.29699499E-05 3
 1.42283155E-08-1.84506244E-12-2.04867301E 2.26279495E
 4
 C4H8OOH2-1O2 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1400.000 61
 2.15734750E 2.04528589E-02-6.99497777E-06 1.08597818E-09-6.30071127E-14
 2
 -2.88428166E7.84560716E 3.02241018E 6.53862812E-02-4.89645658E-05 3
 1.90437784E-08-3.02309317E-12-2.25805572E 2.05729328E
 4
 C4H8OOH2-3O2 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1408.000 61
 2.19463055E 1.97307584E-02-6.65765380E-06 1.02424556E-09-5.90486257E-14
 2
 -3.07772334E8.12053531E 3.34683971E 6.67468082E-02-5.25088611E-05 3
 2.14288389E-08-3.53381793E-12-2.47340662E 1.73189003E
 4
 C4H8OOH2-4O2 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1400.000 61
 2.15734750E 2.04528589E-02-6.99497777E-06 1.08597818E-09-6.30071127E-14
 2
 -2.88428166E7.84560716E 3.02241018E 6.53862812E-02-4.89645658E-05 3
 1.90437784E-08-3.02309317E-12-2.25805572E 2.05729328E
 4
 C4H71-2,4OOH C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1398.000 71
 2.18629952E 1.99359398E-02-6.85103949E-06 1.06712096E-09-6.20561893E-14
 2
 -2.10042547E7.80706874E 2.99387028E 6.52913914E-02-4.87958562E-05 3
 1.88107554E-08-2.95256716E-12-1.46021097E 2.27763716E
 4
 C4H72-1,3OOH C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1395.000 71
 2.14626449E 2.02946207E-02-6.97889021E-06 1.08750673E-09-6.32605387E-14
 2
 -2.22196721E7.60671568E 3.85542428E 6.05523559E-02-4.18122063E-05 3
 1.46680029E-08-2.07881996E-12-1.60359412E 1.87734959E
 4
 C4H72-1,4OOH C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1387.000 71
 2.10228668E 2.10127561E-02-7.30349553E-06 1.14623341E-09-6.70076491E-14
 2
 -2.02908167E7.29927491E 3.41714555E 5.89885977E-02-3.76843121E-05 3
 1.18450422E-08-1.46347291E-12-1.38437952E 2.27094787E
 4
 C4H71-2,3OOH C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1406.000 71
 2.22828679E 1.92253507E-02-6.52860872E-06 1.00881573E-09-5.83408336E-14
 2
 -2.29719991E8.11231836E 3.30790561E 6.66513240E-02-5.21744859E-05 3

2.10434152E-08-3.42495389E-12-1.67536738E 1.95806784E
 4
 C4H7O1-3OOH-4 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1418.000 31
 1.87250111E 1.88463312E-02-6.40165949E-06 9.89754621E-10-5.72727585E-14
 2
 -3.29825730E7.18225468E5.40949665E 8.05102667E-02-6.64646030E-05 3
 2.73711905E-08-4.44856733E-12-2.53005240E 5.56327196E
 4
 C4H7O1-3OOH-2 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1425.000 31
 1.97110479E 1.79060432E-02-6.05724664E-06 9.34110479E-10-5.39628469E-14
 2
 -3.52532541E7.83129016E4.68244067E 8.03419743E-02-6.67264700E-05 3
 2.74081300E-08-4.41623778E-12-2.75307409E 5.04193128E
 4
 C4H7O1-2OOH-4 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1417.000 41
 1.96187267E 1.77382423E-02-6.03563743E-06 9.34268374E-10-5.41073277E-14
 2
 -3.21917914E7.50295988E3.06056578E 7.52777235E-02-6.16382083E-05 3
 2.51520765E-08-4.05109146E-12-2.49310387E 4.48871201E
 4
 C4H7O1-4OOH-2 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1470.000 21
 1.74906412E 1.87794733E-02-6.05491558E-06 9.03185679E-10-5.09571870E-14
 2
 -4.22716632E6.51860330E5.17426936E 7.89225917E-02-6.62654132E-05 3
 2.77698767E-08-4.54377840E-12-3.53780833E 5.35508489E
 4
 C4H7O1-2OOH-3 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1435.000 41
 1.83476383E 1.72627711E-02-5.53440131E-06 8.21396496E-10-4.61479654E-14
 2
 -3.29223599E6.69919656E9.44964311E-01 7.31026695E-02-6.71227799E-05 3
 3.12252290E-08-5.67206759E-12-2.74510619E 3.25427282E
 4
 C4H7O2-3OOH-1 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1424.000 41
 2.03028185E 1.69331534E-02-5.71128715E-06 8.79005552E-10-5.07088176E-14
 2
 -3.43451470E7.95919117E3.04171082E 7.75254740E-02-6.55776743E-05 3
 2.74944445E-08-4.52476822E-12-2.70343494E 4.33136810E
 4
 C4H72-1OOH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1381.000 41
 1.80122740E 1.70340943E-02-5.89884086E-06 9.23962123E-10-5.39539803E-14
 2
 -1.74585465E6.55209757E 1.29755275E 5.59252255E-02-4.08890003E-05 3
 1.54880526E-08-2.42412478E-12-1.16046928E 2.43621382E
 4
 NC4KET12 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1389.000 51
 2.17577434E 1.64473301E-02-5.79961988E-06 9.19149624E-10-5.41037382E-14
 2
 -4.47115295E8.37725285E7.24231793E-01 7.26648886E-02-6.04779190E-05 3
 2.54348857E-08-4.30152907E-12-3.72936909E 3.56276963E
 4

1.51554685E 7.57240000E-03-2.72693024E-06 4.38217189E-10-2.60434287E-14
2
-3.41419680E5.01255068E1.32768631E 5.21618601E-02-4.97327645E-05 3
2.31272366E-08-4.20787867E-12-2.90608844E 3.61860491E
4
IC4H10 8/12/15 C 4H 10 0 0G 300.000 5000.000
1397.000 31
1.26422737E 2.14133551E-02-7.26711536E-06 1.12207226E-09-6.48434177E-14
2
-2.28293782E4.66059659E1.07413829E 5.24618320E-02-3.42407949E-05 3
1.18817533E-08-1.73238254E-12-1.79218932E 2.74851665E
4
IC4H9 8/12/15 C 4H 9 0 0G 300.000 5000.000
1397.000 31
1.23261837E 1.92057770E-02-6.52063623E-06 1.00704497E-09-5.82038734E-14
2
2.50995714E4.13478742E 1.20802408E-01 4.73187324E-02-3.16440251E-05 3
1.14229699E-08-1.74784642E-12 6.84032915E 2.44291032E
4
TC4H9 8/12/15 C 4H 9 0 0G 300.000 5000.000
1380.000 31
1.02682832E 2.09965262E-02-7.14945754E-06 1.10648358E-09-6.40498314E-14
2
1.57542675E3.00960941E 1.05841769E 3.41133739E-02-9.03156779E-06 3
-2.95313136E-09 1.41436845E-12 4.22699258E 2.23965051E
4
TC4H9O T08/04C 4 H 9 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
1.27371509E 2.33707342E-02-8.50516678E-06 1.38519973E-09-8.34398061E-14
2
-1.66940150E4.53156321E 2.77057100E 2.68033175E-02 4.12718360E-05 3
-7.22054739E-08 3.02642276E-11-1.27079262E 1.21532856E1.04543262E 4
IC4H9O A08/04C 4 H 9 O 1 0 G 200.000 6000.00 1000.00
1
1.16309708E 2.47981574E-02-9.01550536E-06 1.46714720E-09-8.83214518E-14
2
-1.37854612E3.81956151E 3.80297372E 1.56874209E-02 6.81105412E-05 3
-9.83346774E-08 3.95261902E-11-1.00832243E 9.78963305E7.82602559E 4
IC4H8O 9/ 1/12 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
1394.000 21
1.40433578E 2.05733637E-02-9.09519220E-06 1.73417298E-09-1.14908544E-13
2
-3.62275308E6.90009668E5.02573822E 7.51340960E-02-6.88668822E-05 3
3.12223247E-08-5.60128818E-12-3.07481413E 2.96284295E
4
IC3H7CHO 2/22/96 THERMC 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
1391.000 31
1.37501656E 1.83126722E-02-6.28572629E-06 9.78250756E-10-5.68538653E-14
2
-3.26936771E4.77270548E2.73021382E-01 4.89696307E-02-3.12770049E-05 3
1.00052945E-08-1.27512074E-12-2.76054737E 2.83451139E
4
IC3H7CO 2/22/96 THERMC 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
1390.000 31
1.33305736E 1.61873930E-02-5.56711402E-06 8.67575951E-10-5.04696549E-14
2
-1.37307001E4.33958746E 5.03452639E-01 4.41607510E-02-2.82139091E-05 3

8.93548675E-09-1.11327422E-12-9.07755468E 2.61991461E
 4
 IC3H6CHO 2/22/96 THERMC 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.33102250E 1.62097959E-02-5.57575891E-06 8.69003718E-10-5.05554202E-14
 2
 -7.62177931E4.25050854E 5.21481767E-01 4.43114357E-02-2.86617314E-05 3
 9.30319894E-09-1.20761563E-12-2.99677086E 2.68182130E
 4
 TC3H6CHO 2/22/96 THERMC 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1389.000 21
 1.31013047E 1.66391865E-02-5.68457623E-06 8.81808351E-10-5.11290161E-14
 2
 -1.30638647E4.42705813E 1.87052762E 4.14869677E-02-2.66815701E-05 3
 9.01531610E-09-1.27870633E-12-8.97730744E 1.66174178E
 4
 IC3H5CHO C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 21
 1.33892118E 1.39115420E-02-4.75820958E-06 7.38736618E-10-4.28606559E-14
 2
 -1.97917448E4.60146004E 1.09372823E 4.43315368E-02-3.41918451E-05 3
 1.39369607E-08-2.33791460E-12-1.56745978E 1.94458467E
 4
 TC3H6O2CHO 8/ 2/95 THERMC 4H 70 3 0G 300.000 5000.000 1386.00
 41
 1.85534443E 1.68774389E-02-5.90752965E-06 9.31518085E-10-5.46345187E-14
 2
 -2.85447191E6.82486667E 2.17883383E 5.41595832E-02-3.83435886E-05 3
 1.38308104E-08-2.04190147E-12-2.27394154E 2.00751264E
 4
 IC3H5O2HCHO 8/2/95 THERMC 4H 70 3 0G 300.000 5000.000 1387.00
 51
 2.06288832E 1.48625539E-02-5.25305276E-06 8.33772951E-10-4.91277401E-14
 2
 -2.27589076E7.82962888E 2.05984770E 5.82331716E-02-4.37672100E-05 3
 1.63249918E-08-2.43462051E-12-1.63496250E 2.13687921E
 4
 TC3H6O2HCO 8/ 2/95 THERMC 4H 70 3 0G 300.000 5000.000 1387.00
 51
 2.06472678E 1.48526500E-02-5.25104875E-06 8.33619219E-10-4.91256069E-14
 2
 -2.88719869E7.95951389E 2.03864428E 5.80421003E-02-4.32123528E-05 3
 1.58792094E-08-2.32209543E-12-2.24284673E 2.03680990E
 4
 TC3H6OCHO 8/25/95 THERMC 4H 70 2 0G 300.000 5000.000 1394.00
 31
 1.70371287E 1.54400645E-02-5.28332886E-06 8.21085347E-10-4.76898429E-14
 2
 -2.75871941E6.37271230E 3.70830259E-01 5.38475661E-02-3.82477565E-05 3
 1.32882237E-08-1.79228730E-12-2.18391262E 2.58142112E
 4
 IC3H6CO 03/03/95 THERMC 4H 60 1 0G 300.000 5000.000 1397.00
 41
 1.32548232E 1.40142787E-02-4.78910215E-06 7.42924342E-10-4.30737566E-14
 2
 -2.00529779E4.44810221E 2.28039055E 4.17016989E-02-3.25089661E-05 3
 1.37243419E-08-2.40573132E-12-1.63939712E 1.38187714E
 4

IC3H5CO C 4H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 21
 1.29634401E 1.17954996E-02-4.04361488E-06 6.28771516E-10-3.65209867E-14
 2
 -8.26519462E4.20562575E 1.87306990E 3.95188508E-02-3.11404053E-05 3
 1.28844447E-08-2.18165308E-12 2.85270691E 1.68774016E
 4
 IC3H4CHO-A C 4H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1392.000 11
 1.41736959E 1.09161978E-02-3.69020878E-06 5.69228087E-10-3.29023246E-14
 2
 -1.92867979E5.02663740E 7.64345054E-01 4.45242412E-02-3.61033720E-05 3
 1.48295287E-08-2.43809290E-12 2.44732544E 2.08541848E
 4
 SC4H7OH-I L 2/00C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 31
 1.30299481E 1.83782479E-02-6.18529878E-06 9.49578099E-10-5.46526348E-14
 2
 -3.10723026E4.22891828E 2.70103499E 4.17950180E-02-2.67860575E-05 3
 9.38191037E-09-1.41171285E-12-2.73561190E 1.35316306E
 4
 IC4H9O2 9/ 1/12 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1432.000 41
 1.78793870E 1.82474607E-02-6.01252193E-06 9.11106794E-10-5.20018932E-14
 2
 -1.74569774E6.61552973E 1.77219624E 5.34032789E-02-3.31041810E-05 3
 9.24465657E-09-8.01706642E-13-1.17768774E 2.09581481E
 4
 TC4H9O2 9/ 1/12 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1380.000 41
 1.80863238E 1.99282971E-02-6.98287309E-06 1.10171726E-09-6.46381057E-14
 2
 -2.04420664E6.97533212E 2.63892371E 5.44717499E-02-3.75504698E-05 3
 1.40479250E-08-2.27968600E-12-1.47598933E 1.40325533E
 4
 IC4H8O2H-I 9/ 1/12 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1414.000 51
 1.83915486E 1.73042831E-02-5.66841018E-06 8.55414265E-10-4.86781778E-14
 2
 -9.48569748E6.67673286E 1.86432620E-01 6.26430177E-02-4.83690886E-05 3
 1.88657148E-08-2.91189385E-12-3.59086611E 2.97635367E
 4
 IC4H8O2H-T 9/ 1/12 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1413.000 51
 1.69753885E 1.85198010E-02-6.09075415E-06 9.21673609E-10-5.25502501E-14
 2
 -1.14812757E5.88259039E 3.84374544E 4.36800978E-02-2.07599526E-05 3
 2.51709167E-09 5.41306513E-13-6.50766215E 1.34244877E
 4
 TC4H8O2H-I 9/ 1/12 C 4H 90 2 0G 300.000 5000.000
 1379.000 51
 1.81415374E 1.94699499E-02-6.82750014E-06 1.07773311E-09-6.32519099E-14
 2
 -1.23570939E6.63491602E 3.54378349E 5.25201369E-02-3.69898493E-05 3
 1.44634925E-08-2.47536050E-12-6.98183185E 1.27623539E
 4
 CC4H8O 9/ 1/12 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1431.000 11

1.51841776E 1.64656666E-02-5.33483091E-06 7.98149768E-10-4.51160381E-14
 2
 -3.33923434E7.43746988E6.56746688E 7.87298554E-02-7.33065478E-05 3
 3.40602701E-08-6.15674656E-12-2.71582518E 3.80875851E
 4
 IC4H8OOH-IO2 9/ 1/12 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1367.000 61
 2.24664901E 2.09351287E-02-7.44324128E-06 1.18589255E-09-7.00546897E-14
 2
 -2.94495457E8.54241451E 4.23354857E 5.63088857E-02-3.15672522E-05 3
 7.79536931E-09-6.21665008E-13-2.22782534E 1.52623111E
 4
 IC4H8OOH-TO2 9/ 1/12 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1385.000 61
 2.32464612E 1.88384513E-02-6.40938087E-06 9.92649459E-10-5.75275879E-14
 2
 -3.16533132E8.88301710E 3.36413530E 6.93742776E-02-5.70416393E-05 3
 2.46040165E-08-4.32848680E-12-2.51137558E 1.65767339E
 4
 TC4H8OOH-IO2 9/ 1/12 C 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1385.000 61
 2.32464612E 1.88384513E-02-6.40938087E-06 9.92649459E-10-5.75275879E-14
 2
 -3.16533132E8.88301710E 3.36413530E 6.93742776E-02-5.70416393E-05 3
 2.46040165E-08-4.32848680E-12-2.51137558E 1.65767339E
 4
 IC4KETII 7/19/ 0 THERMC 4H 80 3 OG 300.000 5000.000
 1387.000 51
 1.95143059E 1.82377395E-02-6.38908606E-06 1.00801571E-09-5.91440350E-14
 2
 -4.46884836E7.17167584E 1.15501614E 6.10622345E-02-4.49711323E-05 3
 1.70514654E-08-2.65948602E-12-3.82747956E 2.69612235E
 4
 IC4KETIT 7/19/ 0 THERMC 4H 80 3 OG 300.000 5000.000
 1388.000 51
 2.09369850E 1.71090955E-02-6.01892169E-06 9.52353863E-10-5.59926176E-14
 2
 -4.77819819E8.27717611E 1.14243741E 6.33840797E-02-4.73084738E-05 3
 1.77145373E-08-2.67265475E-12-4.09366796E 2.34844867E
 4
 TIC4H7Q2-I 5/ 6/96 THERMC 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1400.000 71
 2.33848631E 1.87070035E-02-6.44021945E-06 1.00428123E-09-5.84468189E-14
 2
 -2.61180902E8.76610135E 4.48426361E 6.61225007E-02-5.27349018E-05 3
 2.18215585E-08-3.66788946E-12-1.98906586E 1.26719614E
 4
 IIC4H7Q2-I 7/15/96 THERMC 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1394.000 71
 2.30500244E 1.92149194E-02-6.66622576E-06 1.04495725E-09-6.10370520E-14
 2
 -2.32086881E8.39949885E 4.93055661E 6.05819201E-02-4.23665566E-05 3
 1.49122008E-08-2.10978665E-12-1.68415495E 1.36228018E
 4
 IIC4H7Q2-T 7/15/96 THERMC 4H 90 4 OG 300.000 5000.000
 1377.000 71
 2.15070321E 2.05359839E-02-7.12383399E-06 1.11655053E-09-6.52112103E-14
 2

-2.51117508E7.43379783E 8.16274487E 4.34463050E-02-1.76972456E-05 3
 4.88790666E-10 9.03915465E-13-1.96501749E 2.62067299E-01
 4
 IC4H7OOH 4/15/15 C 4H 80 2 OG 300.000 5000.000
 1386.000 41
 1.82897194E 1.67815784E-02-5.80668193E-06 9.08949180E-10-5.30513302E-14
 2
 -1.82046522E6.72111342E 1.31851762E-01 6.19561224E-02-4.99343877E-05 3
 2.09628211E-08-3.59717924E-12-1.21399925E 2.93905962E
 4
 IC4H9O2H 9/ 1/12 C 4H 100 2 OG 300.000 5000.000
 1402.000 51
 1.91651624E 1.93678648E-02-6.41984435E-06 9.76947752E-10-5.59299558E-14
 2
 -3.48790978E7.42063787E5.47969191E-01 6.57428787E-02-4.70123149E-05 3
 1.65991096E-08-2.27331437E-12-2.82180462E 3.12961385E
 4
 TC4H9O2H 9/ 1/12 C 4H 100 2 OG 300.000 5000.000
 1382.000 51
 1.90926853E 2.12697804E-02-7.46252626E-06 1.17841127E-09-6.91795087E-14
 2
 -3.77278405E7.61321196E 4.45573540E-01 6.66153523E-02-5.20932123E-05 3
 2.22301799E-08-4.00189859E-12-3.12260714E 2.37278262E
 4
 IC4H8 8/12/15 C 4H 8 0 OG 300.000 5000.000
 1392.000 21
 1.11444028E 1.81609265E-02-6.17791116E-06 9.55481871E-10-5.52826092E-14
 2
 -7.84024684E3.68508829E 5.72478139E-02 4.17768938E-02-2.49095729E-05 3
 7.54294402E-09-9.23202212E-13-3.72166259E 2.35698905E
 4
 IC4H7 8/12/15 C 4H 7 0 OG 300.000 5000.000
 1384.000 11
 1.18999143E 1.51569859E-02-5.09995449E-06 7.83722199E-10-4.51660275E-14
 2
 1.00363555E4.02286635E2.29578762E-01 4.17842986E-02-2.66885700E-05 3
 8.42205744E-09-1.03175361E-12 1.43946680E 2.54797645E
 4
 IC4H7-I1 5/13/15 C 4H 7 0 OG 300.000 5000.000
 1396.000 21
 1.11158752E 1.55127192E-02-5.23769366E-06 8.05998394E-10-4.64703390E-14
 2
 2.19488297E3.41440480E 9.12464579E-01 3.88654394E-02-2.57575714E-05 3
 9.07760026E-09-1.33946902E-12 2.55635553E 2.08634918E
 4
 IC4H7O2 L 2/00C 4H 70 2 OG 300.000 5000.000
 1404.000 31
 1.45791608E 1.62136068E-02-5.26957103E-06 7.90454323E-10-4.47755051E-14
 2
 -1.20848042E4.56459433E 1.43532045E 4.89026570E-02-3.63600970E-05 3
 1.41906420E-08-2.24557878E-12 3.09284623E 2.41320196E
 4
 IC4H6OOH-I L 2/00C 4H 70 2 OG 300.000 5000.000
 1398.000 31
 1.73601429E 1.42046196E-02-4.65348263E-06 7.02209785E-10-3.99552775E-14
 2
 -1.07509366E6.12822377E 6.06669321E 3.94950065E-02-2.52721718E-05 3

7.84485641E-09-8.98876886E-13 2.87448422E3.78377026E-01
 4
 CCYCCOOC-T1 THERMC 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1394.000 11
 1.68269657E 1.64471921E-02-5.63767184E-06 8.78001611E-10-5.10959632E-14
 2
 -3.65710841E6.74096786E5.29767923E 6.65082201E-02-4.67054235E-05 3
 1.51029775E-08-1.74322091E-12 3.97935712E 5.16412476E
 4
 C2CYCOOC-I1 7/14 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.89745085E 1.50113808E-02-5.30728309E-06 8.42454740E-10-4.96392976E-14
 2
 -6.93111358E9.08581019E2.04718031E 7.26608379E-02-6.82960279E-05 3
 3.27505762E-08-6.23802161E-12-3.71475599E 1.92056057E
 4
 IC4H70 4/ 3/ 0 THERMC 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1386.000 21
 1.33457615E 1.61218588E-02-5.44376403E-06 8.38199374E-10-4.83608280E-14
 2
 6.11443644E4.36818838E 1.74700687E 4.07783436E-02-2.44750243E-05 3
 7.06502958E-09-7.51570589E-13 4.86979233E 1.94535999E
 4
 CVCYCCOC L 2/00C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1397.000 1
 1.14363523E 1.63250968E-02-5.57146218E-06 8.63795613E-10-5.00701899E-14
 2
 -5.44653450E3.87179379E2.45566808E 4.88377067E-02-3.46186324E-05 3
 1.26590643E-08-1.88737988E-12-6.43460880E 3.58434061E
 4
 CCYC2OCO L 2/00C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1401.000 21
 1.64352871E 1.65843210E-02-5.71790511E-06 8.92586562E-10-5.19865043E-14
 2
 -1.60938498E5.96946106E2.97381263E 6.75615160E-02-5.79901709E-05 3
 2.55213006E-08-4.49991674E-12-9.93607156E 4.25127997E
 4
 CCYCCOOC-I2 L 2/00C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1398.000 11
 1.63388791E 1.65879474E-02-5.61829108E-06 8.67331033E-10-5.01476782E-14
 2
 6.66946988E6.40322040E4.55772603E 7.10221387E-02-6.05228430E-05 3
 2.61773944E-08-4.51390528E-12 1.32922215E 4.60828737E
 4
 CHOIC3H6O L 2/00C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1386.000 31
 1.55511970E 1.67360034E-02-5.73573457E-06 8.92095191E-10-5.18351848E-14
 2
 -2.50674335E5.23215658E 2.55559437E-01 5.22086026E-02-3.72283766E-05 3
 1.36714420E-08-2.05638885E-12-1.97284649E 2.99210251E
 4
 IC3H5OOCH2 L 2/00C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1410.000 41
 5.05335676E 3.62904388E-02-1.54012992E-05 2.74341619E-09-1.74718602E-13
 2
 4.08326144E2.55389509E1.26548168E3.61337863E-03 7.31803998E-05 3
 -5.49845697E-08 1.20447492E-11 1.33108969E 5.33428723E
 4

CCYCCO-T1 L 2/00C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1389.000 11
 1.03394781E 1.15180335E-02-3.87496644E-06 5.95744364E-10-3.43539552E-14
 2
 7.17658970E2.89687593E1.39311392E 3.81789194E-02-2.62316288E-05 3
 8.74877238E-09-1.11296763E-12 1.12534953E 3.41877003E
 4
 IC4H8OH-IT C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1391.000 41
 1.29136746E 2.06583409E-02-6.98445966E-06 1.07562552E-09-6.20443876E-14
 2
 -1.81394866E3.84972088E 3.05275715E 3.93926461E-02-1.90686417E-05 3
 3.86408022E-09-1.48005244E-13-1.42263749E 1.60840537E
 4
 IC4H8OH-TI C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 41
 1.46323607E 1.88895981E-02-6.30561450E-06 9.62474230E-10-5.51640163E-14
 2
 -1.87976018E4.93218793E 2.33169342E 5.13017040E-02-4.02698872E-05 3
 1.75150405E-08-3.16001727E-12-1.48318978E 1.55368130E
 4
 IC4H7OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1398.000 31
 1.23304221E 1.83885172E-02-6.06721733E-06 9.19054723E-10-5.24036171E-14
 2
 -2.59452023E3.67418286E 2.04124240E 4.14387207E-02-2.55228632E-05 3
 8.28133017E-09-1.10654457E-12-2.22709637E 1.88699473E
 4
 IC4H8OH 2/14/95 THERMC 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1376.000 41
 1.25605997E 2.10637488E-02-7.15019648E-06 1.10439262E-09-6.38428695E-14
 2
 -1.86203249E3.67889430E 3.29612707E 3.47649647E-02-1.02505618E-05 3
 -2.04641931E-09 1.18879408E-12-1.45627247E 1.58606320E
 4
 IC4H6OH C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 21
 1.53490714E 1.38856699E-02-4.56427754E-06 6.90418690E-10-3.93540403E-14
 2
 -1.20164758E5.55975530E1.46664187E 6.03351671E-02-5.43112644E-05 3
 2.49299933E-08-4.52282491E-12-6.95012413E 3.20768458E
 4
 TQJC4H8OH C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1415.000 51
 2.29681617E 1.65162786E-02-5.50247318E-06 8.39335285E-10-4.81030625E-14
 2
 -4.10051460E9.34897892E6.43419503E-01 8.49131517E-02-8.17210578E-05 3
 3.90979927E-08-7.27092842E-12-3.42375932E 2.84394025E
 4
 TQC4H8OI C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1411.000 51
 2.13200701E 1.80489663E-02-6.06124072E-06 9.29740751E-10-5.34977374E-14
 2
 -3.12966663E8.20046659E 7.45747835E-02 7.46499596E-02-6.42255048E-05 3
 2.80908988E-08-4.87692045E-12-2.47182737E 2.94511549E
 4
 QC4H7OHP C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1416.000 61

2.43481084E 1.50316366E-02-5.01788017E-06 7.66774357E-10-4.40093220E-14
 2
 -3.31922320E9.68211106E1.27864186E 8.94492926E-02-8.78565423E-05 3
 4.22110919E-08-7.83450876E-12-2.58975226E 3.53963909E
 4
 TQC4H7OHI L 2/00C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1404.000 61
 2.08281225E 1.81675094E-02-6.12943202E-06 9.43194119E-10-5.43937008E-14
 2
 -3.37386684E7.74823720E 2.55843807E 6.37086077E-02-4.97169945E-05 3
 1.99225109E-08-3.21373436E-12-2.77526909E 1.95001368E
 4
 CCY(CCO)COH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1412.000 31
 1.91884885E 1.56255714E-02-5.22569800E-06 7.99171074E-10-4.58832445E-14
 2
 -4.71120302E7.84579023E7.10048774E 9.53371808E-02-9.78701612E-05 3
 4.90005646E-08-9.41685766E-12-3.98987202E 5.60924667E
 4
 C2CY(COC)OH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1393.000 31
 1.56829970E 1.92910506E-02-6.63718495E-06 1.03441014E-09-6.01715267E-14
 2
 -4.10598236E5.85686221E 5.92324183E-01 5.52429007E-02-4.02419018E-05 3
 1.57152217E-08-2.57388393E-12-3.58241476E 2.23378086E
 4
 IQJC4H8OH L 2/00C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1410.000 51
 2.11752212E 1.75144254E-02-5.73227292E-06 8.63386596E-10-4.90282414E-14
 2
 -3.98881576E8.19187015E 1.81448831E 7.47452750E-02-7.10895172E-05 3
 3.44973679E-08-6.54646593E-12-3.44023586E 1.77380434E
 4
 IC3H6OHCHO C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1393.000 41
 1.60254376E 1.85402212E-02-6.36973877E-06 9.91732739E-10-5.76472640E-14
 2
 -5.50198923E5.83074874E 1.84080874E 5.29601347E-02-3.94261774E-05 3
 1.59063430E-08-2.69565279E-12-5.01437169E 1.75482756E
 4
 IQC4H8OT C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1405.000 51
 2.04823628E 1.82966721E-02-6.04413378E-06 9.16380548E-10-5.22866551E-14
 2
 -2.94287153E7.53563247E 3.72211529E 6.42864861E-02-5.52809053E-05 3
 2.50036630E-08-4.53471908E-12-2.43110525E 1.21981167E
 4
 IQC4H7OHT C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1413.000 61
 2.19945886E 1.62011186E-02-5.23758492E-06 7.81898296E-10-4.41125515E-14
 2
 -3.07383725E8.16613568E 3.58900054E 7.25591129E-02-7.14080484E-05 3
 3.55250907E-08-6.84991795E-12-2.57241250E 1.23766657E
 4
 CCY(CCOC)OH L 2/00C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1404.000 21
 1.43404718E 1.98311504E-02-6.60657660E-06 1.00779570E-09-5.77614335E-14
 2

-4.30959414E5.30535015E2.84914896E 6.23736856E-02-4.70326536E-05 3
 1.84908286E-08-2.94976027E-12-3.74257004E 3.83163588E
 4
 CH2COHCH2OOH C 3H 60 3 0G 300.000 5000.000
 1398.000 41
 1.87971268E 1.12783442E-02-3.90789058E-06 6.12064651E-10-3.57305453E-14
 2
 -3.61154867E6.94914300E3.89823383E-01 7.01531131E-02-7.42036788E-05 3
 3.84181056E-08-7.63555985E-12-3.07879938E 2.86873505E
 4
 TC3H6OH 8/ 9/ 4 THERMC 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1392.000 31
 1.12222277E 1.36444398E-02-4.51406709E-06 7.10523275E-10-4.22690392E-14
 2
 -1.75350136E3.18911926E 1.09670360E 3.80727565E-02-2.75022497E-05 3
 1.07477493E-08-1.74895773E-12-1.40764487E 2.22475799E
 4
 TQC4H7OHIO2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1402.000 71
 2.82564819E 1.66969871E-02-5.67314614E-06 8.78350442E-10-5.09090253E-14
 2
 -5.66017464E1.15147927E 3.17336206E 7.94005900E-02-6.51165712E-05 3
 2.62035931E-08-4.13406290E-12-4.84943162E 1.77867184E
 4
 TQC4H7OHTO2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1402.000 71
 2.82564819E 1.66969871E-02-5.67314614E-06 8.78350442E-10-5.09090253E-14
 2
 -5.66017464E1.15147927E 3.17336206E 7.94005900E-02-6.51165712E-05 3
 2.62035931E-08-4.13406290E-12-4.84943162E 1.77867184E
 4
 TQC4H7OHIQ-I C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1384.000 71
 2.88466964E 1.66289773E-02-5.74301906E-06 8.98791324E-10-5.24794891E-14
 2
 -4.69249234E1.19117836E 6.09881562E 6.93745451E-02-5.12049498E-05 3
 1.81276221E-08-2.46329781E-12-3.91393707E 2.93862639E
 4
 TQC4H7OHIQ-P C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1400.000 81
 2.81439191E 1.63524649E-02-5.54998081E-06 8.58603978E-10-4.97359401E-14
 2
 -4.84502814E1.11572783E 3.36947511E 7.96855226E-02-6.74365765E-05 3
 2.82233283E-08-4.65270820E-12-4.05567534E 1.92726029E
 4
 IC3H5COHQ C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1504.000 51
 2.07387831E 1.58360934E-02-5.27614462E-06 8.05932218E-10-4.62682425E-14
 2
 -4.41821241E7.94239893E 2.64360992E 5.72485066E-02-3.95907807E-05 3
 1.27775635E-08-1.47241476E-12-3.80099993E 1.77322273E
 4
 CH2CQCOHQ 7/ 1/14 C 3H 60 5 0G 300.000 5000.000
 1418.000 61
 3.86574091E 4.83815026E-04-2.10413843E-07 3.81490832E-11-2.46187754E-15
 2
 -6.56392184E1.61083579E1.61171759E 1.78866440E-01-2.16751308E-04 3

1.15450289E-07-2.27163078E-11-5.21165145E 1.14441286E
 4
 IC3H5Q C 3H 60 2 0G 300.000 5000.000
 1397.000 31
 1.43424294E 1.28053632E-02-4.40584813E-06 6.86848148E-10-3.99675209E-14
 2
 -1.65261025E4.89934539E 1.32903007E 4.49170722E-02-3.51235127E-05 3
 1.41982181E-08-2.33335008E-12-1.21898396E 2.02696565E
 4
 COHQCYC (COC) C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1319.000 51
 2.44599226E 1.64187782E-02-5.74024372E-06 9.05710407E-10-5.31829152E-14
 2
 -6.01811228E1.02049722E 2.40687943E 5.95180442E-02-3.16913659E-05 3
 4.23694824E-09 8.42033474E-13-5.19694864E 1.88941416E
 4
 QCYC (CCOC) OH C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1411.000 41
 2.20860197E 1.83743733E-02-6.29478769E-06 9.78787994E-10-5.68621317E-14
 2
 -5.89652037E8.64964494E2.09099972E 8.02656739E-02-6.69756245E-05 3
 2.79282034E-08-4.60981823E-12-5.12529252E 4.11897260E
 4
 HOCOCQ (CH3) 2 C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1380.000 61
 2.28935401E 1.78627606E-02-6.34627520E-06 1.01068546E-09-5.96885712E-14
 2
 -8.05400680E9.08953779E 1.56326363E 6.77165643E-02-5.14600149E-05 3
 1.99184629E-08-3.16007445E-12-7.30943302E 2.37255421E
 4
 IQC4H7OHTO2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1389.000 71
 2.41720261E 2.09397176E-02-7.29061406E-06 1.14554056E-09-6.70217517E-14
 2
 -5.04772118E8.95996685E 3.83287364E 6.90926177E-02-5.15031144E-05 3
 1.99235553E-08-3.17456897E-12-4.34442789E 1.94648622E
 4
 IQC4H8OTQ-I C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1386.000 71
 2.53249383E 2.00634820E-02-7.01249558E-06 1.10475030E-09-6.47561724E-14
 2
 -4.09610593E9.73592779E 5.90219800E 6.26952142E-02-4.17351838E-05 3
 1.35422162E-08-1.71169663E-12-3.39620020E 7.89290087E
 4
 IQC4H7OHTQ-P C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1391.000 81
 2.45769593E 2.01889393E-02-7.03584537E-06 1.10623327E-09-6.47523225E-14
 2
 -4.25783112E9.05052742E 3.45242802E 7.14541224E-02-5.54616790E-05 3
 2.22754676E-08-3.66067450E-12-3.54133076E 2.23024492E
 4
 CHOC (CH3) OHCH2Q C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1383.000 61
 2.24480753E 1.78753902E-02-6.26904597E-06 9.90084046E-10-5.81417382E-14
 2
 -6.55093075E8.56747327E 2.40933530E 6.13326038E-02-4.03874986E-05 3
 1.22738404E-08-1.32997480E-12-5.83049516E 2.29870742E
 4

CO(CH2OOH) 2 C 3H 60 5 0G 300.000 5000.000
 1393.000 61
 2.43376341E 1.14074110E-02-4.08931881E-06 6.55183244E-10-3.88570518E-14
 2
 -5.16862647E9.01518175E2.47626577E 8.93736793E-02-9.25891121E-05 3
 4.63168490E-08-8.93300309E-12-4.38924057E 4.84479477E
 4
 CH3COCHO C 3H 40 2 0G 300.000 5000.000
 1381.000 21
 1.14371190E 1.06773624E-02-3.68967757E-06 5.77006752E-10-3.36532201E-14
 2
 -3.78079398E3.25054087E 2.08731049E 3.09032484E-02-1.98794164E-05 3
 6.26174519E-09-7.69945504E-13-3.43989451E 1.82839639E
 4
 IC3H5OCH2 6/ 2/14 CZHOUH 7C 40 1 G 298.150 2000.000 1000.00
 1
 6.64731727E 3.08190709E-02-1.73209320E-05 5.01099629E-09-6.00089387E-13
 2
 1.70679921E5.91214819E2.14798958E 7.00225553E-02-8.21595440E-05 3
 5.22589946E-08-1.34176532E-11 3.26474773E 3.55145589E
 4
 IC4H7OOCH3 C 5H 100 2 0G 300.000 5000.000
 1386.000 51
 1.95896715E 2.31057369E-02-8.02911330E-06 1.25969946E-09-7.36169360E-14
 2
 -1.80069088E7.34192482E 1.26784161E 6.82442475E-02-5.30807931E-05 3
 2.27496198E-08-4.11475065E-12-1.16767937E 2.44900544E
 4
 IC4H7OOIC4H7 C 8H 140 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 71
 2.80447245E 3.27505220E-02-1.13220177E-05 1.77027767E-09-1.03211988E-13
 2
 -1.72683337E1.15134796E2.07881710E-01 1.04075647E-01-8.33973077E-05 3
 3.60897624E-08-6.47906520E-12-7.79062693E 3.50446555E
 4
 C4H8-1 C 4H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.10189295E 1.82714177E-02-6.21801907E-06 9.62038611E-10-5.56791341E-14
 2
 -5.80998818E3.47942287E 1.62599556E-01 4.01052746E-02-2.18038592E-05 3
 5.47070727E-09-4.54073315E-13-1.65402601E 2.48169258E
 4
 C4H8-2 8/12/15 C 4H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1383.000 21
 1.08652083E 1.84123129E-02-6.26886673E-06 9.70205962E-10-5.61638967E-14
 2
 -7.09625867E3.51547481E 1.30795510E 3.53136624E-02-1.51866126E-05 3
 1.64112363E-09 3.44257620E-13-3.19767852E 1.81594717E
 4
 C4H71-1 C 4H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1390.000 21
 1.10531750E 1.55668782E-02-5.25853044E-06 8.09627095E-10-4.67015477E-14
 2
 2.39455759E3.31548457E 8.97231085E-01 3.77003788E-02-2.33194855E-05 3
 7.38468124E-09-9.50027900E-13 2.76498158E 2.19835413E
 4
 C4H71-2 C 4H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1381.000 21

1.07105686E 1.63539126E-02-5.63688038E-06 8.79591989E-10-5.12098725E-14
2
2.21011255E3.15300308E 1.56405993E 3.32162309E-02-1.59178310E-05 3
2.92637814E-09-3.02645386E-14 2.57966120E 1.93052496E
4
C4H71-3 1/13/16 C 4H 7 0 0G 300.000 5000.000
1367.000 11
1.16977564E 1.53404517E-02-5.16928607E-06 7.95431212E-10-4.58914150E-14
2
1.07395001E3.82992966E 9.40350126E-01 3.56830321E-02-1.74384567E-05 3
2.78964567E-09 1.78068599E-13 1.49303203E 2.11349333E
4
C4H71-4 C 4H 7 0 0G 300.000 5000.000
1389.000 21
1.03875084E 1.63677264E-02-5.58416036E-06 8.65388736E-10-5.01415385E-14
2
1.93282846E2.86081068E 5.36903096E-01 3.66356251E-02-2.07814610E-05 3
5.74895154E-09-6.05742821E-13 2.30645349E 2.53369983E
4
C4H72-2 8/12/15 C 4H 7 0 0G 300.000 5000.000
1378.000 21
1.05359634E 1.65535631E-02-5.71669066E-06 8.93155269E-10-5.20432637E-14
2
2.08161211E3.11046229E 2.46499885E 2.94957335E-02-1.08904521E-05 3
9.17747264E-11 5.46417906E-13 2.42904093E 1.44728237E
4
C4H71-O 4/ 3/ 0 THERMC 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
1395.000 21
1.53137780E 1.43427017E-02-4.81625517E-06 7.39574839E-10-4.26140814E-14
2
-7.29342884E5.52937859E1.60619192E 5.58562682E-02-4.35595767E-05 3
1.70589279E-08-2.65635180E-12 4.85090326E 3.47112559E
4
PC4H8OH-2 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
1396.000 41
1.47198620E 1.93691825E-02-6.59356634E-06 1.02018538E-09-5.90410746E-14
2
-1.53023402E4.85296396E 1.89476538E 4.87803114E-02-3.26702980E-05 3
1.17119949E-08-1.77100238E-12-1.07455371E 2.06226225E
4
SC4H8OH-1 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
1405.000 41
1.50517242E 1.84748629E-02-6.15327969E-06 9.38017339E-10-5.37214281E-14
2
-1.71974443E5.03733848E 1.78282749E 5.18872497E-02-3.89600849E-05 3
1.57818686E-08-2.64133852E-12-1.28305019E 2.00308244E
4
SC4H8OH-3 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
1403.000 41
1.42453780E 1.89491000E-02-6.27403528E-06 9.52692609E-10-5.44157896E-14
2
-1.81803642E4.56206494E 1.93185505E 4.79506224E-02-3.23719194E-05 3
1.16232751E-08-1.72498918E-12-1.39431370E 2.03995003E
4
C4H71-3OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
1385.000 31
1.42401634E 1.83038695E-02-6.37213444E-06 1.00099740E-09-5.85511411E-14
2

-2.68183960E4.83949774E 7.16707858E-02 5.04772909E-02-3.50356983E-05 3
 1.30539199E-08-2.07783174E-12-2.16983717E 2.82072724E
 4
 C4H71-4OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 31
 1.33437331E 1.82063693E-02-6.15150719E-06 9.47318576E-10-5.46543216E-14
 2
 -2.48479001E4.27998774E2.12276307E-01 4.86358034E-02-3.17241965E-05 3
 1.04986646E-08-1.39007078E-12-2.00365173E 3.04092052E
 4
 C4H71-1OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 31
 1.42586569E 1.71932504E-02-5.74956414E-06 8.79089774E-10-5.04586493E-14
 2
 -2.78051048E4.96581579E4.65981165E-01 5.56573217E-02-4.50578305E-05 3
 1.93726056E-08-3.38967639E-12-2.31007894E 2.79744544E
 4
 C4H71-2OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1404.000 31
 1.50658194E 1.65276030E-02-5.52197706E-06 8.43591643E-10-4.83870716E-14
 2
 -2.99737946E5.53405024E1.28560619E 6.35758020E-02-5.85328191E-05 3
 2.80452715E-08-5.32187122E-12-2.51538600E 2.93802791E
 4
 C4H72-1OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1367.000 31
 1.32893235E 1.93843938E-02-6.80733358E-06 1.07559847E-09-6.31698641E-14
 2
 -2.58627911E4.34782359E 2.94637661E 3.45852975E-02-1.10024787E-05 3
 -1.33281467E-09 9.54964043E-13-2.12241816E 1.55037145E
 4
 C4H72-2OH C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1402.000 31
 1.49411596E 1.66289929E-02-5.55627511E-06 8.48898851E-10-4.86949390E-14
 2
 -3.12496851E5.51730870E1.84033728E-01 5.90104774E-02-5.22507028E-05 3
 2.44135801E-08-4.56518659E-12-2.66717960E 2.36075268E
 4
 SQC4H8OP C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1421.000 51
 2.02482113E 1.90403096E-02-6.41818812E-06 9.86791658E-10-5.68666168E-14
 2
 -2.70686177E7.43734665E 3.92966105E 5.67740736E-02-3.88077818E-05 3
 1.31554059E-08-1.72822772E-12-2.14649445E 1.32313419E
 4
 PQC4H8OS C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1403.000 51
 1.99993833E 1.96391125E-02-6.70755815E-06 1.04036085E-09-6.03187960E-14
 2
 -2.71257575E7.31284601E 2.68979886E 6.10664073E-02-4.46910607E-05 3
 1.68939056E-08-2.59692346E-12-2.12460925E 1.94271757E
 4
 PQC4H7OHS-3 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1404.000 61
 1.89703648E 1.96512375E-02-6.61522830E-06 1.01590849E-09-5.84889733E-14
 2
 -2.92876345E6.40682635E 3.14058820E 5.94343278E-02-4.55414505E-05 3

1.85507067E-08-3.10109441E-12-2.40765022E 1.99412365E
 4
 NC4KET12OH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1384.000 41
 1.68650782E 1.83319076E-02-6.41389893E-06 1.01105283E-09-5.92858731E-14
 2
 -5.27353126E5.97188408E 5.20269850E-01 5.40316915E-02-3.57074151E-05 3
 1.18022134E-08-1.57485744E-12-4.67781081E 2.89999061E
 4
 SQC4H7OHS-4 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1414.000 61
 2.06664415E 1.78772156E-02-5.93193686E-06 9.02005813E-10-5.15691990E-14
 2
 -3.04132233E7.44595459E 3.37952725E 6.50949152E-02-5.59109752E-05 3
 2.49644089E-08-4.44896795E-12-2.51501593E 1.58596901E
 4
 SQC4H8OS C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1424.000 51
 2.05363895E 1.85261859E-02-6.18257770E-06 9.44045247E-10-5.41390400E-14
 2
 -2.90453556E7.66224497E 3.45579406E 6.10420456E-02-4.64106547E-05 3
 1.80687264E-08-2.81124474E-12-2.34835698E 1.39991890E
 4
 NC4KET23OH 7/27/15 C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1386.000 41
 1.54636087E 1.92120108E-02-6.64681122E-06 1.03988604E-09-6.06552757E-14
 2
 -5.57292725E5.19147488E 1.64761234E 4.74122084E-02-2.72508571E-05 3
 7.25755846E-09-6.68682869E-13-5.04946247E 2.37800424E
 4
 SC4H8OH-3O2 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
 1417.000 51
 1.93082953E 1.92156764E-02-6.34250732E-06 9.60912935E-10-5.47939937E-14
 2
 -3.84370805E6.88887622E 1.78918281E 6.62988026E-02-5.52280656E-05 3
 2.40247962E-08-4.18762027E-12-3.30428157E 2.28885942E
 4
 CCY(COCC)OH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1328.000 21
 1.03816782E 2.53052690E-02-1.00511826E-05 1.68204740E-09-9.58092966E-14
 2
 -3.94348914E2.73522595E6.13260697E 7.75376285E-02-6.73066149E-05 3
 2.82841623E-08-4.65470382E-12-3.57825027E 5.53089299E
 4
 C4H7O2-1 9/ 8/14 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1684.000 21
 1.12685690E 2.01724820E-02-7.41925667E-06 1.21275519E-09-7.30115348E-14
 2
 2.13876442E3.15208064E 5.16434924E 2.53427725E-02-1.39669041E-06 3
 -6.00713944E-09 1.76696879E-12 5.03210693E 4.37441148E
 4
 C4H6-1 L10/93C 4.H 6. 0. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1
 7.81179394E 1.79733772E-02-6.61044149E-06 1.05501491E-09-6.19297169E-14
 2
 1.61770171E1.59658015E 2.42819263E 2.49821955E-02 6.27370548E-06 3
 -2.61747866E-08 1.26585079E-11 1.80248564E 1.36683982E 1.98688798E 4

AC3H5OCH2 9/ 8/14 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
1397.000 31
1.19880368E 1.70263516E-02-5.78617265E-06 8.94150465E-10-5.16994613E-14
2
3.48367473E3.35860630E 1.20089076E 4.24760987E-02-2.94114641E-05 3
1.11824860E-08-1.81309530E-12 7.26792055E 2.43628654E
4
C5H10-2 9/ 8/14 C 5H 10 0 0G 300.000 5000.000
1385.000 31
1.39425521E 2.28734997E-02-7.77800113E-06 1.20284861E-09-6.95972140E-14
2
-1.12165700E4.95379542E 5.90528835E-01 4.85275113E-02-2.43231598E-05 3
4.86096027E-09-1.13099201E-13-5.99777644E 2.41816377E
4
CC5H10 9/ 8/14 C 5H 10 0 0G 300.000 5000.000
1394.000 31
1.44242929E 2.26454984E-02-7.73646334E-06 1.19999861E-09-6.95711276E-14
2
-1.14981027E5.30391197E9.64397004E-01 5.68482691E-02-3.66324275E-05 3
1.23008921E-08-1.71392531E-12-5.93502026E 3.02998433E
4
C6H10D24 C 6H 10 0 0G 300.000 5000.000
1393.000 31
1.67662657E 2.32109616E-02-7.93355119E-06 1.23101995E-09-7.13892514E-14
2
-2.93324539E6.44104411E3.63783422E-01 6.36719104E-02-4.53090160E-05 3
1.73368393E-08-2.79133016E-12 3.04087286E 2.75469470E
4
C5H91-3 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
1390.000 21
1.39593933E 2.09180210E-02-7.14307074E-06 1.10781333E-09-6.42268160E-14
2
7.02651017E5.03103610E4.68159636E-01 5.13472600E-02-3.05648794E-05 3
8.82809744E-09-9.61458255E-13 1.23781446E 2.83587835E
4
C5H92-4 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
1384.000 21
1.35637956E 2.11621316E-02-7.20826071E-06 1.11611006E-09-6.46370085E-14
2
5.82258629E4.87323606E 2.55028348E-01 4.69860501E-02-2.40447582E-05 3
4.89006694E-09-1.15557679E-13 1.09775103E 2.46226810E
4
C5H92-5 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
1386.000 31
1.32988753E 2.09845923E-02-7.14999241E-06 1.10717347E-09-6.41183619E-14
2
1.39270369E4.32758927E 9.96363945E-01 4.49148898E-02-2.30951498E-05 3
5.01698735E-09-2.38646470E-13 1.87161506E 2.45616052E
4
C5H91-4 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
1387.000 31
1.29229725E 2.10931621E-02-7.14227112E-06 1.10137556E-09-6.35983966E-14
2
1.38192408E4.00293126E 1.58797615E 4.01577239E-02-1.50062687E-05 3
-3.94608061E-10 1.02064182E-12 1.84683983E 2.34273438E
4
C5H91-5 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
1391.000 31

1.37334869E 2.07003006E-02-7.06962737E-06 1.09638953E-09-6.35591113E-14
2
1.51176253E4.50794850E 2.07676634E-01 4.96049077E-02-3.00621602E-05 3
9.19962077E-09-1.13246061E-12 2.01251866E 2.85856261E
4
C5H9O2-4 9/ 8/14 C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
1376.000 31
1.73707371E 2.09044827E-02-7.30723872E-06 1.15106814E-09-6.74601377E-14
2
-5.48020434E6.50109045E 3.38899911E 4.71704753E-02-2.40389823E-05 3
4.99166621E-09-2.03242522E-13 1.15232772E 1.25183625E
4
SC3H5OCH2-1 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
1382.000 31
1.47022035E 1.55342107E-02-5.45701052E-06 8.62544885E-10-5.06734446E-14
2
1.81294800E5.05120353E 2.35694446E-01 4.67367652E-02-3.04880689E-05 3
9.75216148E-09-1.23281228E-12 7.11668364E 2.81378517E
4
C8H141-5,3-4 C 8H 14 0 0G 300.000 5000.000
1396.000 51
2.30690680E 3.23154042E-02-1.10795683E-05 1.72276354E-09-1.00052582E-13
2
-8.91240214E9.49655754E2.52713194E 9.28837673E-02-6.67176819E-05 3
2.53683579E-08-4.01212661E-12-4.55965940E 4.23180878E
4
C8H141-5,3 8/25/15 C 8H 14 0 0G 300.000 5000.000
1392.000 51
2.25173982E 3.26748629E-02-1.11807923E-05 1.73629966E-09-1.00752481E-13
2
-8.96062790E9.10857551E1.02072126E 8.47808555E-02-5.47568199E-05 3
1.81792070E-08-2.47335881E-12-4.53248586E 3.64247438E
4
C8H142-6 8/25/15 C 8H 14 0 0G 300.000 5000.000
1386.000 51
2.20960852E 3.27887472E-02-1.11700037E-05 1.72970378E-09-1.00179059E-13
2
-9.04951881E8.92942652E 3.43524821E-01 7.72359120E-02-4.34861460E-05 3
1.12949093E-08-9.77995416E-13-8.37798357E 2.98241439E
4
C8H131-5,3-4,TA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
1394.000 41
2.22822575E 3.10651867E-02-1.06940907E-05 1.66739777E-09-9.70243450E-14
2
7.57680613E9.19858764E3.23996819E 9.13494930E-02-6.60037456E-05 3
2.51706078E-08-3.99030974E-12 1.64345368E 4.49498860E
4
C8H131-5,3,TA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
1389.000 41
2.16161787E 3.14326704E-02-1.07786324E-05 1.67632587E-09-9.73755313E-14
2
7.60897211E8.80384104E5.03201172E-01 7.78854227E-02-4.63156182E-05 3
1.32834166E-08-1.42623050E-12 1.58388712E 3.26514434E
4
C8H131-5,3,SA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
1392.000 41
2.21141889E 3.09871348E-02-1.06198459E-05 1.65100088E-09-9.58788408E-14
2

8.08509780E9.01448021E1.32185914E 8.30473789E-02-5.42213233E-05 3
 1.80737386E-08-2.45105483E-12 1.65183103E 3.67169651E
 4
 C8H131-5,3,PA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
 1389.000 41
 2.32085707E 2.97529224E-02-1.01333635E-05 1.56925634E-09-9.09001242E-14
 2
 8.95338901E9.40777602E1.57063382E 8.60080913E-02-5.83884368E-05 3
 2.02048105E-08-2.83115953E-12 1.77015232E 3.95476224E
 4
 C8H132-6,SA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
 1387.000 41
 2.16167233E 3.12260643E-02-1.06640216E-05 1.65409816E-09-9.59112187E-14
 2
 8.03384556E8.72194430E 2.20017932E-01 7.48621425E-02-4.21239973E-05 3
 1.07414215E-08-8.66560315E-13 1.61027987E 2.99517204E
 4
 C8H132-6,PA C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
 1378.000 41
 2.29293875E 2.97187394E-02-1.00712335E-05 1.55505094E-09-8.99129602E-14
 2
 8.77975921E9.24517461E 1.05119796E-01 7.70150350E-02-4.48890925E-05 3
 1.19516688E-08-1.04377517E-12 1.72713386E 3.22058738E
 4
 C6H101-3,3 C 6H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1395.000 31
 1.69678361E 2.28868236E-02-7.78758381E-06 1.20465198E-09-6.97080856E-14
 2
 -2.97276905E6.58632941E3.01310455E-02 6.43105079E-02-4.75083462E-05 3
 1.89877768E-08-3.17681035E-12 2.82367411E 2.49254708E
 4
 C8H131-5,3-4,TAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1394.000 51
 2.70579050E 2.84726632E-02-9.66434779E-06 1.49337149E-09-8.63788413E-14
 2
 -4.43111126E1.12228392E 1.00679908E 8.90191278E-02-6.27963646E-05 3
 2.24161585E-08-3.20587060E-12 4.56422741E 2.76546640E
 4
 C8H131-5,3,TAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 51
 2.16638860E 2.77253448E-02-9.69375951E-06 1.67582120E-09-1.08059396E-13
 2
 -5.70300683E9.33237797E 1.46771925E 7.67800622E-02-5.63189881E-05 3
 2.22689786E-08-3.64813515E-12 1.17475936E 1.45619856E
 4
 C8H131-5,3,SAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1385.000 51
 2.61023602E 3.05036647E-02-1.06268215E-05 1.67026867E-09-9.77389024E-14
 2
 -3.64744193E1.06781316E 1.60953926E 8.39738786E-02-5.49469234E-05 3
 1.84255257E-08-2.56040058E-12 5.33713436E 2.62653941E
 4
 C8H131-5,3,PAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1374.000 51
 2.51902631E 3.15630048E-02-1.10568300E-05 1.74424175E-09-1.02327221E-13
 2
 -1.34401684E1.01448477E 3.91532442E 7.10319966E-02-3.55623644E-05 3

6.98595095E-09-1.83465840E-13 7.22911524E 1.67145758E
 4
 C8H132-6,SAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1381.000 51
 2.54267504E 3.10421548E-02-1.08045689E-05 1.69716523E-09-9.92701997E-14
 2
 -3.28641768E1.02872762E 3.34168622E 7.49917518E-02-4.18382842E-05 3
 1.06108028E-08-8.96488454E-13 5.24458399E 1.86128166E
 4
 C8H132-6,PAO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 2014.000 51
 1.99391776E 3.79081645E-02-1.37893231E-05 2.23770591E-09-1.34044177E-13
 2
 1.42981257E7.07923233E 6.30807632E 5.80374259E-02-1.75637726E-05 3
 -2.70887760E-09 1.61702129E-12 7.07839485E 6.29344560E
 4
 C7H111-5,3,6P C 7H 11 0 0G 300.000 5000.000
 1396.000 41
 1.95787047E 2.54213538E-02-8.68127275E-06 1.34629701E-09-7.80464853E-14
 2
 2.58537943E7.44112330E6.76848821E-01 7.38082653E-02-5.35945220E-05 3
 2.06293915E-08-3.29701110E-12 3.28160434E 3.40518079E
 4
 C7H111-5,1P C 7H 11 0 0G 300.000 5000.000
 1388.000 41
 1.91915682E 2.55013021E-02-8.65881522E-06 1.33796943E-09-7.73784878E-14
 2
 2.60946287E7.21387547E 8.16831855E-01 6.56745024E-02-4.14490949E-05 3
 1.32234876E-08-1.69289568E-12 3.27646149E 2.75442934E
 4
 C4H64,2-10H C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1366.000 21
 1.36259446E 1.70233137E-02-6.00460246E-06 9.51603754E-10-5.60055773E-14
 2
 -7.81498890E4.44948073E 2.50804582E 3.53393033E-02-1.41418095E-05 3
 5.65501810E-10 5.94838384E-13-3.08574102E 1.81061546E
 4
 C4H63,1-10H C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1401.000 21
 1.38675222E 1.54795810E-02-5.17720236E-06 7.91828077E-10-4.54656891E-14
 2
 -1.07655481E4.87820652E5.96640682E-01 5.31885124E-02-4.34791765E-05 3
 1.86514084E-08-3.23780972E-12-6.15543596E 2.74734171E
 4
 C4H63,1-30H C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1380.000 21
 1.33633351E 1.70222596E-02-5.95245190E-06 9.37896168E-10-5.49767305E-14
 2
 -9.90113178E4.54753472E 5.96155469E-01 4.35893351E-02-2.65985265E-05 3
 8.14250262E-09-1.02316366E-12-5.05630797E 2.43923636E
 4
 C4H63,1-20H C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1404.000 21
 1.46899596E 1.48008021E-02-4.94483770E-06 7.55542892E-10-4.33461574E-14
 2
 -1.29448240E5.45653093E1.58903600E 6.17722944E-02-5.78263835E-05 3
 2.78090017E-08-5.26779799E-12-8.17977186E 2.96999338E
 4

C4H5OH-13 9/24/15 C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
1405.000 21
1.40975061E 1.29826578E-02-4.36356696E-06 6.69260196E-10-3.84920001E-14
2
-1.41099189E4.94340793E1.60022758E 6.12386329E-02-6.18933585E-05 3
3.14927455E-08-6.20396658E-12-9.77435172E 3.08328186E
4
SQC4H7OHP-4 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
1410.000 61
1.99207495E 1.89422879E-02-6.39488327E-06 9.84231371E-10-5.67606301E-14
2
-2.89250584E7.01061222E 1.44518283E 6.52944119E-02-5.10380130E-05 3
2.05238910E-08-3.32050656E-12-2.29059890E 2.78546218E
4
CY(CCCO)COH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
1396.000 21
1.34636332E 2.28745777E-02-9.93619553E-06 1.89605197E-09-1.26466856E-13
2
-3.96396606E4.51064489E6.97589766E 7.98392838E-02-7.11131714E-05 3
3.16611877E-08-5.61324136E-12-3.35777839E 6.12093340E
4
NC4KET21OH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
1507.000 41
1.52252911E 1.86615017E-02-6.30658772E-06 9.72355897E-10-5.61770184E-14
2
-5.34759661E5.00397269E 5.46677192E 3.01119974E-02-2.59548850E-06 3
-7.61700554E-09 2.55573161E-12-4.89909104E 6.33307684E
4
C2H5CHOHCO C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
1389.000 41
1.82917246E 1.48007410E-02-5.24974573E-06 8.35220286E-10-4.92942253E-14
2
-3.36703722E7.12363783E2.44749259E 6.46308488E-02-5.10457937E-05 3
1.99850773E-08-3.12214490E-12-2.66670442E 3.95566556E
4
CH3COCOCH3 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
1395.000 41
1.65624631E 1.59037217E-02-5.54554278E-06 8.72274939E-10-5.10735025E-14
2
-3.65884887E6.10833920E1.65607674E 6.08409982E-02-4.85215440E-05 3
1.97794382E-08-3.26305133E-12-3.05158227E 3.58911868E
4
C2H4COCH2OH C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
1462.000 41
1.40828195E 1.76833414E-02-6.09759192E-06 9.52794521E-10-5.55571628E-14
2
-3.37518398E4.08944306E 7.98874348E 1.41152447E-02 1.86299924E-05 3
-1.99223089E-08 5.12983835E-12-2.98706372E1.87192030E 4
CH3COHCO 9/24/15 C 3H 40 2 0G 300.000 5000.000
1410.000 21
1.50110709E 7.26697312E-03-2.42872486E-06 3.71246886E-10-2.13068531E-14
2
-3.87354954E5.41005540E 8.25855205E-01 5.22217422E-02-5.66992291E-05 3
2.94815948E-08-5.81714952E-12-3.50157127E 1.78488731E
4
CH2COHCHO 9/24/15 C 3H 40 2 0G 300.000 5000.000
1406.000 21

1.40200417E 7.95092924E-03-2.63244516E-06 3.99896432E-10-2.28538120E-14
 2
 -3.76808145E4.80457990E 5.76639663E-02 5.16589617E-02-5.49773816E-05 3
 2.83487148E-08-5.57464421E-12-3.39594513E 2.29757289E
 4
 SQC4H7OHP-4O2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1402.000 71
 2.35936348E 2.08588461E-02-7.13602285E-06 1.10820581E-09-6.43133049E-14
 2
 -4.78452356E8.49505816E 2.62618431E 7.26812595E-02-5.64956508E-05 3
 2.25892409E-08-3.65246549E-12-4.08999596E 2.65615323E
 4
 PQC4H7OHS-3O2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1414.000 71
 2.46607662E 1.92947770E-02-6.45433722E-06 9.87246207E-10-5.66889630E-14
 2
 -4.98467067E9.10424907E 2.90986916E 7.76596028E-02-6.68513896E-05 3
 2.93627835E-08-5.12008013E-12-4.31551961E 2.29130715E
 4
 SQC4H7OHS-4O2 C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1414.000 71
 2.46607662E 1.92947770E-02-6.45433722E-06 9.87246207E-10-5.66889630E-14
 2
 -4.98467067E9.10424907E 2.90986916E 7.76596028E-02-6.68513896E-05 3
 2.93627835E-08-5.12008013E-12-4.31551961E 2.29130715E
 4
 C4H7O2-1,3OOH C 4H 90 5 0G 300.000 5000.000
 1425.000 71
 2.54691227E 1.86441036E-02-6.23825706E-06 9.54422873E-10-5.48154425E-14
 2
 -4.01531561E9.60389710E 4.88339443E 7.18219147E-02-5.86792171E-05 3
 2.42823866E-08-3.98538527E-12-3.36575518E 1.24696185E
 4
 NC4KET13OH-2 C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1395.000 61
 2.25434165E 1.76377030E-02-6.14926113E-06 9.67201484E-10-5.66321794E-14
 2
 -6.59724022E8.48522697E 2.13332105E 6.69840817E-02-5.19672275E-05 3
 2.03864253E-08-3.22074763E-12-5.90962942E 2.40964870E
 4
 NC4KET24OH-1 C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1672.000 61
 1.76639507E 2.38921914E-02-8.87612081E-06 1.46065294E-09-8.83476797E-14
 2
 -6.36561283E5.60405234E 7.17383002E 3.72830917E-02-7.30000099E-06 3
 -5.42423663E-09 1.94298976E-12-5.91469605E 3.98040888E
 4
 NC4KET24OH-3 C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1392.000 61
 2.02237496E 1.94540798E-02-6.73928381E-06 1.05529414E-09-6.15931037E-14
 2
 -6.68651215E6.99676945E 2.60979522E 6.11530456E-02-4.50409252E-05 3
 1.73313054E-08-2.75573967E-12-6.07708447E 2.44892030E
 4
 C4H6OHOH1-4-3 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1398.000 51
 2.15163584E 1.55811846E-02-5.27569793E-06 8.14810620E-10-4.71424652E-14
 2

-3.74825726E8.24101150E1.90016482E 7.72727339E-02-6.79667571E-05 3
 2.98158102E-08-5.16343458E-12-3.01649655E 4.06810164E
 4
 C4H6OHOOH2-2-1 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1396.000 51
 2.16656460E 1.59965487E-02-5.52214578E-06 8.62740322E-10-5.02768063E-14
 2
 -4.14875437E8.39377540E 4.72576793E-02 7.85787048E-02-7.68006410E-05 3
 3.79206120E-08-7.33203833E-12-3.51140091E 2.80064858E
 4
 C4H6OHOOH1-3-4 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1391.000 51
 1.93445152E 1.82185729E-02-6.34491630E-06 9.97097673E-10-5.83420009E-14
 2
 -3.79952136E6.88144861E 9.44277749E-01 6.34330602E-02-4.99455695E-05 3
 2.05720571E-08-3.48143957E-12-3.17827282E 2.92923796E
 4
 C4H6OHOOH1-2-3 C 4H 80 3 0G 300.000 5000.000
 1403.000 51
 2.32793098E 1.38280934E-02-4.61330737E-06 7.05319574E-10-4.05174739E-14
 2
 -4.26348237E9.51979841E2.88475927E 9.16099207E-02-9.37152074E-05 3
 4.66406895E-08-8.92736049E-12-3.52899912E 3.92851633E
 4
 HOCH2CHO 9/24/15 C 2H 40 2 0G 300.000 5000.000
 1680.000 21
 7.99598542E 1.20664034E-02-4.43693399E-06 7.25167046E-10-4.36535460E-14
 2
 -4.09020567E1.33754312E 4.35084369E 1.50412895E-02-5.95083030E-07 3
 -3.75736217E-09 1.09353598E-12-3.91654526E 8.09610238E
 4
 C4H71-4OOH C 4H 80 2 0G 300.000 5000.000
 1392.000 41
 1.59871304E 1.86028119E-02-6.40003189E-06 9.97531711E-10-5.80334203E-14
 2
 -1.70152141E5.46227137E 1.31653247E 5.16546159E-02-3.47310922E-05 3
 1.20405755E-08-1.71650639E-12-1.17754576E 2.46384545E
 4
 C4H71-4O2 9/25/15 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.50240251E 1.72860962E-02-5.94297061E-06 9.25861430E-10-5.38461748E-14
 2
 1.92460667E4.85941022E 2.09042625E 4.57130080E-02-2.94815830E-05 3
 9.69604853E-09-1.30061388E-12 4.88932667E 2.15456077E
 4
 C4H61-3OOH4 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1391.000 31
 1.55818475E 1.69176098E-02-5.84009100E-06 9.12401042E-10-5.31699330E-14
 2
 1.20753065E5.36683745E 1.00320366E 4.99893791E-02-3.43100656E-05 3
 1.20104294E-08-1.71132691E-12 5.17744264E 2.49842453E
 4
 C4H601-3OOH4 C 4H 70 3 0G 300.000 5000.000
 1386.000 41
 1.95456291E 1.60358540E-02-5.61768950E-06 8.86341914E-10-5.20072732E-14
 2
 -1.12679434E6.99490153E 3.83045773E 5.07388403E-02-3.42226447E-05 3

1.13486298E-08-1.48529245E-12-5.61786232E 1.51509867E
 4
 C4H6O2-1OOH4 C 4H 70 3 0G 300.000 5000.000
 1364.000 41
 2.05164800E 1.55727845E-02-5.54197222E-06 8.83592649E-10-5.22241946E-14
 2
 -9.30030707E7.46630628E 5.38344712E 4.47089832E-02-2.43630482E-05 3
 5.07835349E-09-1.20805939E-13-3.40711224E 8.84731441E
 4
 HOCH2COCH2 C 3H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1363.000 31
 1.27106963E 1.15513960E-02-3.95951917E-06 6.16237371E-10-3.58328248E-14
 2
 -2.71538154E3.67129478E 4.98634970E 2.51766916E-02-1.10893306E-05 3
 1.12011467E-09 2.89491135E-13-2.40047973E 6.38258616E
 4
 HOCH2CO 9/25/15 C 2H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1487.000 21
 9.43496508E 7.68897340E-03-2.74959280E-06 4.39772312E-10-2.60488233E-14
 2
 -2.29700136E2.04618579E 5.12916864E 9.07172819E-03 6.49228146E-06 3
 -8.56591893E-09 2.31070825E-12-2.06151607E 5.73007596E
 4
 HOCHCHO 9/25/15 C 2H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1680.000 21
 9.99251726E 7.77560619E-03-2.94238616E-06 4.90136333E-10-2.98979778E-14
 2
 -2.20440827E2.73957153E 5.42856274E-01 2.95295948E-02-2.08315490E-05 3
 6.72777461E-09-8.06116446E-13-1.89378452E 2.31681075E
 4
 PC3H4OH-3 9/25/15 C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1378.000 11
 1.15297558E 1.14381097E-02-4.04415495E-06 6.41949269E-10-3.78242456E-14
 2
 -3.45486444E3.65385497E 4.06368169E-01 3.70231405E-02-2.72202689E-05 3
 1.05783475E-08-1.73632514E-12 5.27160824E 2.34781848E
 4
 PC3H4OH-1 9/25/15 C 3H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1403.000 21
 1.09468986E 1.04014540E-02-3.44082448E-06 5.22105632E-10-2.98049266E-14
 2
 4.11530600E3.11161699E 2.07150195E 3.50016810E-02-3.01922013E-05 3
 1.38467853E-08-2.55380109E-12 6.81914209E 1.51916605E
 4
 CH3COCHOH 9/25/15 C 3H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1378.000 31
 1.23884831E 1.23099892E-02-4.32263800E-06 6.83043939E-10-4.01192794E-14
 2
 -2.97609476E3.85682589E 2.11183979E 3.32521318E-02-1.96834015E-05 3
 5.40736760E-09-5.32450556E-13-2.58545486E 1.77643465E
 4
 SC2H2OH 9/25/15 C 2H 30 1 0G 300.000 5000.000
 1410.000 11
 7.99235139E 5.83109353E-03-1.89242965E-06 2.83129118E-10-1.59933287E-14
 2
 9.51237374E1.62058375E 1.63791895E 2.64968839E-02-2.74821415E-05 3
 1.43110557E-08-2.85794966E-12 1.11467016E 1.58714777E
 4

PC4H8OH-1 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1392.000 41
 1.47813217E 1.89692972E-02-6.38671427E-06 9.81341181E-10-5.65332084E-14
 2
 -1.88487062E4.98892364E 7.72566991E-01 5.00429367E-02-3.20163534E-05 3
 1.02913291E-08-1.30709217E-12-1.38421800E 2.58928300E
 4
 PC4H8OH-3 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1398.000 41
 1.45944628E 1.92223378E-02-6.48868808E-06 9.98309067E-10-5.75488987E-14
 2
 -1.52392636E4.85127747E 2.21685429E 4.71340178E-02-3.04254756E-05 3
 1.03165429E-08-1.45043599E-12-1.08208508E 1.83497891E
 4
 C4H7O1-4 9/ 8/14 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.33251126E 1.65057558E-02-5.65235890E-06 8.78319847E-10-5.09914580E-14
 2
 1.91281414E4.28181479E 2.44895430E 3.69423519E-02-1.77510852E-05 3
 2.64537530E-09 2.43666218E-13 6.16385921E 1.73174889E
 4
 PC4H8OH-4 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1401.000 41
 1.41519859E 1.96439700E-02-6.64537615E-06 1.02402720E-09-5.91001981E-14
 2
 -1.56141213E4.50604102E6.95634735E-02 5.20263179E-02-3.44849029E-05 3
 1.17704221E-08-1.63047436E-12-1.06053581E 3.15909567E
 4
 SC4H8OH-2 C 4H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1395.000 41
 1.45514712E 1.92722299E-02-6.50955109E-06 1.00200009E-09-5.77830714E-14
 2
 -2.09909632E4.82454428E 1.96361387E 4.77673982E-02-3.11652479E-05 3
 1.07498897E-08-1.54834306E-12-1.65000330E 1.97286755E
 4
 CH2COHCO 9/25/15 C 3H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1411.000 11
 1.31285142E 6.17948608E-03-1.93387986E-06 2.81892606E-10-1.56244314E-14
 2
 -1.93507932E4.22958094E 1.24341370E 4.71484739E-02-5.44200189E-05 3
 2.95970356E-08-6.01447282E-12-1.65555219E 1.68301276E
 4
 C4H72-2O2 9/29/15 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.63301022E 1.60698895E-02-5.50238293E-06 8.55098973E-10-4.96517196E-14
 2
 -4.70039715E5.78736400E 2.49537080E 4.75680882E-02-3.26452548E-05 3
 1.14069694E-08-1.61494862E-12 1.76383849E 1.67027189E
 4
 C4H71-1O2 9/29/15 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.63738534E 1.62685376E-02-5.62192103E-06 8.78982520E-10-5.12510706E-14
 2
 -1.06318473E5.69005716E 2.02223104E 4.85577506E-02-3.30293697E-05 3
 1.13406677E-08-1.57078109E-12 4.04143594E 2.06106646E
 4
 C4H71-2O2 9/29/15 C 4H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1394.000 31

1.63565639E 1.61768136E-02-5.56610316E-06 8.67700997E-10-5.04886444E-14
2
-3.40245466E5.75260769E 1.42459973E 5.20547601E-02-3.89440869E-05 3
1.51726193E-08-2.42611664E-12 1.68854104E 2.23230947E
4
C3H6OH1-1 10/ 2/15 C 3H 70 1 0G 300.000 5000.000
1388.000 31
1.14795375E 1.45881429E-02-4.88359380E-06 7.47606975E-10-4.29608360E-14
2
-1.46832088E3.36825807E 1.13614529E 3.68850655E-02-2.24073579E-05 3
6.62398992E-09-7.32206246E-13-1.09273174E 2.24919343E
4
PC4H8OH-2O2 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
1407.000 51
1.90513685E 2.00624257E-02-6.76970282E-06 1.04136985E-09-6.00271674E-14
2
-3.65966815E6.71202048E 1.97780900E 6.25692373E-02-4.76730210E-05 3
1.90561997E-08-3.10596799E-12-3.09625439E 2.35880251E
4
SC4H8OH-1O2 C 4H 90 3 0G 300.000 5000.000
1405.000 51
1.88547090E 2.02217653E-02-6.82328766E-06 1.04961552E-09-6.05032676E-14
2
-3.65721162E6.59105449E 1.47037864E 6.38295256E-02-4.92333916E-05 3
1.99704964E-08-3.30499356E-12-3.08602292E 2.63462505E
4
C4H71-3OOCH3 C 5H 100 2 0G 300.000 5000.000
1387.000 51
2.12299326E 2.07003584E-02-6.99464238E-06 1.07836941E-09-6.22999849E-14
2
-1.85005682E8.53499854E5.42404662E-01 7.51511469E-02-6.00684679E-05 3
2.49701271E-08-4.22319878E-12-1.13061371E 3.02981962E
4
C4H72-1OOCH3 C 5H 100 2 0G 300.000 5000.000
1382.000 51
1.92914755E 2.34475159E-02-8.16713690E-06 1.28338262E-09-7.50837828E-14
2
-1.72688938E7.16509708E 2.44675386E 6.21430218E-02-4.39326296E-05 3
1.72567499E-08-2.94950711E-12-1.11431755E 1.94028997E
4
C4H6 C 4H 6 0 0G 300.000 5000.000
1388.000 11
1.01064561E 1.46248415E-02-5.01373934E-06 7.79510645E-10-4.52675769E-14
2
9.96133753E2.97310638E 1.01356056E 3.35722771E-02-1.96279376E-05 3
5.74803850E-09-6.75029065E-13 1.33956759E 1.99957382E
4
C4H612 A 8/83C 4H 6 0 0G 300.000 5000.000
1374.000 11
1.14059885E 1.31489843E-02-4.43542071E-06 6.83028825E-10-3.94289265E-14
2
1.42427294E3.69674067E 9.45515689E-01 3.46162239E-02-1.98590697E-05 3
5.02139421E-09-3.67977164E-13 1.81439079E 2.02191143E
4
C4H6-2 A 8/83C 4H 6 0 0G 300.000 5000.000
1377.000 21
9.60305554E 1.48972169E-02-5.16751230E-06 8.09757170E-10-4.72817668E-14
2

1.24831314E2.87129792E 1.97152408E 2.76790997E-02-1.13396645E-05 3
 1.02970745E-09 2.75290944E-13 1.57283766E 1.42147356E
 4
 C4H5-I H6W/94C 4H 5 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.10229092E 0.94850138E-02-0.90406445E-07-0.12596100E-08 0.24781468E-12
 2
 0.34642812E0.28564529E0.19932900E-01 0.38005672E-01-0.27559450E-04 3
 0.77835551E-08 0.40209383E-12 0.37496223E 0.24394241E
 4
 C4H5-N H6W/94C 4H 5 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.98501978E 0.10779008E-01-0.13672125E-05-0.77200535E-09 0.18366314E-12
 2
 0.38840301E0.26001846E 0.16305321E 0.39830137E-01-0.34000128E-04 3
 0.15147233E-07-0.24665825E-11 0.41429766E 0.23536163E
 4
 C4H5-2 H6W/94C 4H 5 0 0G 300.000 5000.000
 1385.000 11
 1.03230828E 1.17625574E-02-4.00004665E-06 6.18727929E-10-3.58083530E-14
 2
 3.25861413E2.88794317E 2.31011292E 2.83747046E-02-1.63836755E-05 3
 4.46251967E-09-4.30510879E-13 3.55842945E 1.49105965E
 4
 C4H4 H6W/94C 4H 4 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.66507092E 0.16129434E-01-0.71938875E-05 0.14981787E-08-0.11864110E-12
 2
 0.31195992E0.97952118E0.19152479E 0.52750878E-01-0.71655944E-04 3
 0.55072423E-07-0.17286228E-10 0.32978504E 0.31419983E
 4
 C4H3-I AB1/93C 4H 3 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.90978165E 0.92207119E-02-0.33878441E-05 0.49160498E-09-0.14529780E-13
 2
 0.56600574E0.19802597E 0.20830412E 0.40834274E-01-0.62159685E-04 3
 0.51679358E-07-0.17029184E-10 0.58005129E 0.13617462E
 4
 C4H3-N H6W/94C 4H 3 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.54328279E 0.16860981E-01-0.94313109E-05 0.25703895E-08-0.27456309E-12
 2
 0.61600680E0.15673981E0.31684113E 0.46912100E-01-0.68093810E-04 3
 0.53179921E-07-0.16523005E-10 0.62476199E 0.24622559E
 4
 C4H2 D11/99C 4H 2 0 0G 300.000 3000.000 1000.
 1
 0.91576328E 0.55430518E-02-0.13591604E-05 0.18780075E-10 0.23189536E-13
 2
 0.52588039E0.23711460E 0.10543978E 0.41626960E-01-0.65871784E-04 3
 0.53257075E-07-0.16683162E-10 0.54185211E 0.14866591E
 4
 C4H6O25 T 3/97C 4H 60 1 0G 200.000 5000.000 1000.0
 1
 8.60658242E 2.08310051E-02-8.42229481E-06 1.56717640E-09-1.09391202E-13
 2
 -1.76177415E2.32464750E 2.67053463E 4.92586420E-03 8.86967406E-05 3
 -1.26219194E-07 5.23991321E-11-1.46572472E 1.45722395E1.30831522E 4

C2H3CHOCH2 C 4H 6O 1 OG 300.000 5000.000
 1431.000 11
 1.26762790E 1.40819509E-02-4.63473868E-06 7.01090838E-10-3.99438277E-14
 2
 -4.08065264E4.22515995E3.59388437E 5.79063450E-02-4.97163294E-05 3
 2.15818682E-08-3.69199072E-12 8.58852628E 4.28475443E
 4
 C4H4O T03/97C 4H 4O 1 OG 200.000 6000.0 1000.0
 1
 9.38935003E 1.40291241E-02-5.07755110E-06 8.24137332E-10-4.95319963E-14
 2
 -8.68241814E2.79162920E 8.47469463E-01 1.31773796E-02 5.99735901E-05 3
 -9.71562904E-08 4.22733796E-11-5.36785445E 2.14945172E4.17166616E 4
 C4H6O23 T 3/97C 4H 6O 1 OG 200.000 5000.000 1000.0
 1
 8.60658242E 2.08310051E-02-8.42229481E-06 1.56717640E-09-1.09391202E-13
 2
 -1.32392815E2.32464750E 2.67053463E 4.92586420E-03 8.86967406E-05 3
 -1.26219194E-07 5.23991321E-11-1.02787872E 1.45722395E1.30831522E 4
 CH2CHCHCHO C 4H 5O 1 OG 300.000 5000.000
 1385.000 11
 1.39299886E 1.13228814E-02-3.87393567E-06 6.02378620E-10-3.50120301E-14
 2
 -2.39589898E4.79026849E 4.51553480E-01 4.37530418E-02-3.37273602E-05 3
 1.31111496E-08-2.04732021E-12 2.14943141E 2.40835867E
 4
 H2C4O 120189H 2C 4O 1 G 0300.00 4000.00 1000.00
 1
 0.01026888E 0.04896164E-01-0.04885081E-05-0.02708566E-08 0.05107013E-12
 2
 0.02346903E0.02815985E 0.04810971E 0.01313999E 0.09865073E-05 3
 -0.06120720E-07 0.01640003E-10 0.02545803E 0.02113424E
 4
 NC3H7CHO 8/12/15 C 4H 8O 1 OG 300.000 5000.000
 1679.000 31
 1.19789345E 2.04894148E-02-7.24831619E-06 1.15561709E-09-6.84119824E-14
 2
 -3.09272130E3.63929716E 1.24208539E 4.21277518E-02-2.13832135E-05 3
 4.22614614E-09-1.03710908E-13-2.71049353E 2.21567167E
 4
 NC3H7CO C 4H 7O 1 OG 300.000 5000.000
 1496.000 31
 1.34870098E 1.58626861E-02-5.41698905E-06 8.40508889E-10-4.87570090E-14
 2
 -1.30725285E4.38634081E 2.63537828E 3.40368642E-02-1.24118988E-05 3
 -1.17886666E-09 1.16488136E-12-8.65919992E 1.68407569E
 4
 C3H6CHO-1 C 4H 7O 1 OG 300.000 5000.000
 1538.000 31
 1.33449137E 1.59347421E-02-5.43143577E-06 8.41706117E-10-4.87847084E-14
 2
 -6.91281947E4.19662475E 2.21483383E 3.54113290E-02-1.44082892E-05 3
 5.27605922E-11 8.95003230E-13-2.46482792E 2.00076022E
 4
 C3H6CHO-2 C 4H 7O 1 OG 300.000 5000.000
 1439.000 31
 1.27128605E 1.68632757E-02-5.83779932E-06 9.14059755E-10-5.33575736E-14
 2

-8.50165835E3.84620358E 4.01372834E 2.33173718E-02 5.72463585E-06 3
 -1.27182841E-08 3.69912722E-12-4.16766399E 1.30545921E
 4
 C3H6CHO-3 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1678.000 31
 1.21729663E 1.80056550E-02-6.43783092E-06 1.03362049E-09-6.14850407E-14
 2
 -1.08642352E3.80322250E 5.29001237E-01 4.30707499E-02-2.49474118E-05 3
 6.40934608E-09-5.27769846E-13-6.87667117E 2.48856420E
 4
 SC3H5CHO C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 21
 1.33892118E 1.39115420E-02-4.75820958E-06 7.38736618E-10-4.28606559E-14
 2
 -1.97917448E4.60146004E 1.09372823E 4.43315368E-02-3.41918451E-05 3
 1.39369607E-08-2.33791460E-12-1.56745978E 1.94458467E
 4
 SC3H5CO C 4H 50 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 11
 1.29925654E 1.22140721E-02-4.19305277E-06 6.52697685E-10-3.79407376E-14
 2
 -2.74782380E4.51092470E 7.76401404E-01 4.26828436E-02-3.37881191E-05 3
 1.39128174E-08-2.33331638E-12 1.29903132E 1.98102013E
 4
 C2H5COCH3 8/12/15 C 4H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1454.000 31
 1.28183044E 1.79874386E-02-5.94194784E-06 9.01636365E-10-5.14993729E-14
 2
 -3.51711964E4.11609193E 2.57048052E 3.51446793E-02-1.23849584E-05 3
 -1.21280927E-09 1.16163555E-12-3.10194049E 1.61395232E
 4
 C2H5COCH2 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 31
 1.35979480E 1.57187785E-02-5.35200820E-06 8.28428039E-10-4.79645862E-14
 2
 -1.30111973E4.46215708E 1.96643032E 4.10271409E-02-2.56193885E-05 3
 7.86244495E-09-9.26825962E-13-8.80149212E 1.84803948E
 4
 CH2CH2COCH3 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1392.000 31
 1.17915603E 1.70296457E-02-5.75444256E-06 8.86035114E-10-5.11070778E-14
 2
 -9.70683178E3.25532787E 2.36191763E 3.50400641E-02-1.70487065E-05 3
 3.09070210E-09 2.80364847E-14-6.02754073E 1.95184512E
 4
 CH3CHCOCH3 C 4H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1438.000 31
 1.19651378E 1.63142163E-02-5.39879520E-06 8.20454677E-10-4.69197541E-14
 2
 -1.51990676E3.30142593E 3.31082456E 2.83712402E-02-5.64603859E-06 3
 -4.62626296E-09 1.82954207E-12-1.14602301E 1.62217415E
 4
 C2H3COCH3 C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1390.000 21
 1.19989844E 1.52616304E-02-5.26018882E-06 8.20774274E-10-4.77834528E-14
 2
 -2.12170620E3.71383523E 6.55910700E-01 4.19405303E-02-3.00269693E-05 3

1.16578089E-08-1.92100897E-12-1.72216627E 2.38412293E
 4
 CH3CHOOOCOCH3 C 4H 70 3 0G 300.000 5000.000
 1411.000 41
 1.68056216E 1.70791389E-02-5.69439450E-06 8.68878944E-10-4.98008338E-14
 2
 -3.06718613E5.51178960E 4.30171569E 4.62273591E-02-3.12564494E-05 3
 1.08627824E-08-1.51478379E-12-2.63732146E 1.19724375E
 4
 CH2CHOOHCOCH3 C 4H 70 3 0G 300.000 5000.000
 1413.000 51
 1.78031394E 1.60286227E-02-5.38152372E-06 8.25242310E-10-4.74718968E-14
 2
 -2.30767899E5.87370258E 4.45962223E 4.67200276E-02-3.15878907E-05 3
 1.06245787E-08-1.38857032E-12-1.84720686E 1.29655977E
 4
 C2H5CHCO C 4H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1550.000 21
 -2.04040652E 2.93466880E-01-1.15884523E-04 1.95253673E-08-1.19030791E-12
 2
 8.27380036E 1.21233386E2.28307043E 1.70978191E-01-3.53394379E-04 3
 2.78221616E-07-6.77325074E-11-1.04125457E 1.31232921E
 4
 IC4H6Q2-II 9/ 8/14 C 4H 80 4 0G 300.000 5000.000
 1386.000 61
 2.50360805E 1.60230197E-02-5.70704966E-06 9.10412038E-10-5.38294659E-14
 2
 -2.84196401E9.67186452E 2.16408482E-01 8.25572149E-02-7.64540445E-05 3
 3.58211787E-08-6.67718658E-12-2.05694845E 3.36943223E
 4
 C5H10-1 C 5H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1390.000 31
 1.43624894E 2.26076154E-02-7.70500843E-06 1.19329968E-09-6.91126022E-14
 2
 -9.99915627E5.12512094E1.65023816E-01 5.30727359E-02-3.10861587E-05 3
 8.92413402E-09-9.81619602E-13-4.57363143E 2.80570113E
 4
 C5H81-3 9/ 8/14 C 5H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1385.000 21
 1.29945372E 1.92678312E-02-6.58966712E-06 1.02295969E-09-5.93441369E-14
 2
 4.59040047E4.35689825E 1.54882436E 4.15042709E-02-2.14359890E-05 3
 4.71145517E-09-2.42142508E-13 9.05636062E 1.95665910E
 4
 C5H9O1-3 9/ 8/14 C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1379.000 31
 1.78860333E 2.04837367E-02-7.16613461E-06 1.12948597E-09-6.62221468E-14
 2
 -4.33139568E6.72851315E 2.49666166E 5.20326105E-02-3.09828268E-05 3
 9.02567482E-09-1.04311127E-12 1.54758549E 1.70868328E
 4
 BC5H10 9/ 8/14 C 5H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1389.000 31
 1.40426423E 2.27915348E-02-7.74902598E-06 1.19814522E-09-6.93127003E-14
 2
 -1.32160483E5.14469569E 6.04882839E-01 4.96635256E-02-2.66571142E-05 3
 6.47312078E-09-4.84017883E-13-8.06312207E 2.23818263E
 4

CC5H9-A C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1393.000 31
 1.38635892E 2.06362872E-02-7.05717373E-06 1.09539676E-09-6.35381849E-14
 2
 1.36104251E4.72507189E6.78909715E-01 5.37496002E-02-3.61116825E-05 3
 1.28563411E-08-1.92155723E-12 1.87974429E 3.12403382E
 4
 CC5H9-B 9/ 8/14 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1392.000 21
 1.35249511E 2.14363755E-02-7.35304116E-06 1.14368637E-09-6.64363518E-14
 2
 5.41381916E5.00302394E6.91501860E-01 5.09804846E-02-2.96448293E-05 3
 8.28273022E-09-8.57575066E-13 1.07478467E 2.76711552E
 4
 AC5H90-C C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1382.000 31
 1.76789601E 2.05915073E-02-7.18764438E-06 1.13116483E-09-6.62505034E-14
 2
 -6.25146818E6.62131721E 2.04951318E 5.36584877E-02-3.35086710E-05 3
 1.06174235E-08-1.39224338E-12-3.85112518E 1.91077262E
 4
 CC5H90-B 9/ 8/14 C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
 1377.000 31
 1.86974377E 1.84542537E-02-6.18682537E-06 9.48850967E-10-5.46203980E-14
 2
 -7.15897769E7.26540429E 2.75614808E 5.20514036E-02-3.10966938E-05 3
 8.25895065E-09-6.59917121E-13-1.35162741E 1.40990119E
 4
 AC5H10 C 5H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1392.000 31
 1.41931279E 2.26551019E-02-7.70008627E-06 1.19031326E-09-6.88489604E-14
 2
 -1.19491010E5.10688681E5.39429136E-01 5.44489715E-02-3.32707895E-05 3
 1.03047694E-08-1.28363329E-12-6.53967251E 2.90349986E
 4
 AC5H9-A2 C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1385.000 21
 1.50019889E 1.95965428E-02-6.60205927E-06 1.01535593E-09-5.85454957E-14
 2
 5.90081014E5.54528992E9.54047710E-01 5.50153471E-02-3.58307910E-05 3
 1.16444141E-08-1.49086833E-12 1.15959514E 3.08476806E
 4
 AC5H9-C C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1392.000 21
 1.37918110E 2.09644966E-02-7.13793293E-06 1.10480881E-09-6.39628018E-14
 2
 5.09555600E5.01391436E8.41372657E-01 5.27157283E-02-3.27334707E-05 3
 1.01974035E-08-1.26084730E-12 1.04321036E 2.93316754E
 4
 AC5H9-D C 5H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1393.000 31
 1.35607521E 2.07514878E-02-7.06608626E-06 1.09362345E-09-6.33083050E-14
 2
 1.31896844E4.48718988E1.67398152E-01 5.09876974E-02-3.22615638E-05 3
 1.05911843E-08-1.43705463E-12 1.81792947E 2.95710715E
 4
 B2E2M10J C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
 2003.000 31

1.35666458E 2.56547934E-02-9.37226256E-06 1.52518398E-09-9.15378763E-14
 2
 -3.58767067E4.27272791E 5.64762692E 3.43609862E-02-5.60649548E-06 3
 -5.19111402E-09 1.73155461E-12-6.65737793E 3.13825267E
 4
 B13DE2M C 5H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1397.000 21
 1.40757545E 1.82375566E-02-6.20747687E-06 9.60350919E-10-5.55741525E-14
 2
 2.40033881E5.12988284E4.72170009E-01 5.59413257E-02-4.50458826E-05 3
 1.96181377E-08-3.52009647E-12 7.14960489E 2.56276807E
 4
 B13DE2MJ C 5H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1393.000 11
 1.48413344E 1.52425753E-02-5.13559858E-06 7.89787260E-10-4.55353492E-14
 2
 2.02661570E5.54474955E8.98037227E-01 5.65174321E-02-4.76107829E-05 3
 2.09672106E-08-3.73076319E-12 2.52881763E 2.74966602E
 4
 B12DE3M 11/12/12 THERMC 5H 8 0 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.37093177E 1.85726726E-02-6.33115904E-06 9.80719059E-10-5.68099894E-14
 2
 8.59518752E4.88749621E 1.27860173E 4.54917474E-02-2.82334169E-05 3
 8.98449372E-09-1.17220042E-12 1.31637341E 1.87039373E
 4
 B2E3M1OJ C 5H 90 1 0G 300.000 5000.000
 2003.000 31
 1.35666458E 2.56547934E-02-9.37226256E-06 1.52518398E-09-9.15378763E-14
 2
 -3.58767067E4.27272791E 5.64762692E 3.43609862E-02-5.60649548E-06 3
 -5.19111402E-09 1.73155461E-12-6.65737793E 3.13825267E
 4
 TC4H8CHO 9/ 7/95 THERMC 5H 90 1 0G 300.000 5000.000 1397.00
 41
 1.79663933E 1.94207117E-02-6.67409451E-06 1.03969221E-09-6.04702651E-14
 2
 -1.33368585E6.79819424E9.58078294E-01 6.42003258E-02-4.70776827E-05 3
 1.75737698E-08-2.64896151E-12-6.86582501E 3.33781112E
 4
 O2C4H8CHO 9/ 7/95 THERMC 5H 90 3 0G 300.000 5000.000 1395.00
 51
 2.12629904E 2.14072282E-02-7.38342949E-06 1.15281523E-09-6.71508438E-14
 2
 -3.16854524E7.99828703E 1.91847699E 6.67245869E-02-4.80871046E-05 3
 1.78588690E-08-2.71163880E-12-2.49837984E 2.38577867E
 4
 O2HC4H8CO 9/ 7/95 THERMC 5H 90 3 0G 300.000 5000.000 1394.00
 61
 2.38219630E 1.91411448E-02-6.67919154E-06 1.05127303E-09-6.15876805E-14
 2
 -3.23093973E9.42580755E 1.82607262E 6.93466111E-02-4.93125140E-05 3
 1.69848340E-08-2.26117657E-12-2.46578311E 2.41167544E
 4
 C6H101-5 4/12/13 THERMC 6H 10 0 0G 300.000 5000.000
 1413.000 21
 1.60456030E 2.34774145E-02-7.85797929E-06 1.20200542E-09-6.90100029E-14
 2

2.11899382E5.88452460E1.01375402E 6.38242808E-02-4.40653860E-05 3
 1.58295163E-08-2.30830701E-12 7.94033696E 3.25056094E
 4
 C6H9-A 12/ 5/12 THERMC 6H 9 0 0G 300.000 5000.000
 1400.000 21
 1.70842767E 2.08842788E-02-7.14529004E-06 1.10943563E-09-6.43676989E-14
 2
 2.01040204E6.39326012E2.66715213E 7.26196475E-02-6.05323920E-05 3
 2.66000571E-08-4.74613408E-12 2.64415017E 4.02220332E
 4
 H15DE25DM C 8H 14 0 0G 300.000 5000.000
 1395.000 51
 2.25355644E 3.23955734E-02-1.10270814E-05 1.70640907E-09-9.87758061E-14
 2
 -1.04808866E9.19784905E1.71853441E 8.82613783E-02-6.03140500E-05 3
 2.15862289E-08-3.19690882E-12-1.95255748E 3.86048681E
 4
 H15DE25DM-S C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
 1395.000 41
 2.21422958E 3.06966055E-02-1.04617380E-05 1.62037747E-09-9.38578511E-14
 2
 6.56045671E9.04059585E2.04235551E 8.66261688E-02-5.99110976E-05 3
 2.15551630E-08-3.18976697E-12 1.50224279E 3.96917763E
 4
 H15DE25DM-A C 8H 13 0 0G 300.000 5000.000
 1391.000 41
 2.33282646E 2.93694154E-02-9.94258906E-06 1.53368063E-09-8.86030202E-14
 2
 7.37319036E9.55902415E2.21863377E 8.91652629E-02-6.33360636E-05 3
 2.32007379E-08-3.46329567E-12 1.61971179E 4.15116620E
 4
 H15DE25DM-AO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1378.000 51
 2.50985951E 3.15085628E-02-1.10076915E-05 1.73332426E-09-1.01557468E-13
 2
 -2.49465338E1.01097942E 3.03691957E 7.50640438E-02-4.17779534E-05 3
 1.07915725E-08-9.97734397E-13 6.11649780E 2.04746031E
 4
 H15DE25DM-SO C 8H 130 1 0G 300.000 5000.000
 1388.000 51
 2.60152179E 3.04295766E-02-1.05676513E-05 1.65746547E-09-9.68470091E-14
 2
 -4.79568520E1.06442472E 9.30464015E-01 8.71669873E-02-5.99582593E-05 3
 2.15026041E-08-3.21687573E-12 4.19310073E 2.90924508E
 4
 H15DE2M-T C 7H 11 0 0G 300.000 5000.000
 1389.000 41
 1.90144729E 2.61932198E-02-9.01183878E-06 1.40455988E-09-8.17075251E-14
 2
 2.35551101E7.15568628E 3.88856066E-01 6.70215700E-02-4.29671268E-05 3
 1.42489875E-08-1.96105571E-12 3.03627273E 2.95444186E
 4
 IC4H7CHO C 5H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1391.000 31
 1.59171638E 1.93357284E-02-6.70857943E-06 1.05155191E-09-6.14175906E-14
 2
 -2.16140735E5.67616631E1.20982776E 5.92603375E-02-4.26960089E-05 3

1.60356164E-08-2.49347521E-12-1.56205327E 3.53137305E
 4
 L-C6H4 H6W/94C 6H 4 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.12715182E 0.13839662E-01-0.43765440E-05 0.31541636E-09 0.46619026E-13
 2
 0.57031148E0.39464600E 0.29590225E 0.58053318E-01-0.67766756E-04 3
 0.43376762E-07-0.11418864E-10 0.60001371E 0.22318970E
 4
 C-C6H4 H6W/94C 6H 4 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.13849209E 0.78807920E-02 0.18243836E-05-0.21169166E-08 0.37459977E-12
 2
 0.47446340E0.50404953E0.30991268E 0.54030564E-01-0.40839004E-04 3
 0.10738837E-07 0.98078490E-12 0.52205711E 0.37415207E
 4
 C6H3 H6W/94C 6H 3 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.58188343E 0.27933408E-01-0.17825427E-04 0.53702536E-08-0.61707627E-12
 2
 0.85188250E0.92147827E 0.11790619E 0.55547360E-01-0.73076168E-04 3
 0.52076736E-07-0.15046964E-10 0.85647312E 0.19179199E
 4
 C6H2 P 1/93C 6H 2 0 0G 300.000 3000.00 1000.00
 1
 0.13226281E 0.73904302E-02-0.22715381E-05 0.25875217E-09-0.55356741E-14
 2
 0.80565258E0.41201176E0.15932624E 0.80530145E-01-0.14800649E-03 3
 0.13300031E-06-0.45332313E-10 0.83273227E 0.27980873E
 4
 C6H6 G 6/01C 6H 6 0 0G 200.000 6000.000
 1000.000 1
 1.10809576E 2.07176746E-02-7.52145991E-06 1.22320984E-09-7.36091279E-14
 2
 4.30641035E4.00413310E 5.04818632E-01 1.85020642E-02 7.38345881E-05 3
 -1.18135741E-07 5.07210429E-11 8.55247913E 2.16412893E 9.96811598E 4
 FULVENE OC 6H 6 0 0G 200.000 5000.000 1000.00
 0 1
 0.11103525E 0.20600685E-01-0.75302224E-05 0.12388695E-08-0.75415976E-13
 2
 0.20361843E0.36665197E0.71813191E 0.37934312E-01 0.11398837E-04 3
 -0.41333503E-07 0.18055927E-10 0.24223825E 0.27855714E
 4
 C6H5 T04/02C 6H 5 0 0G 200.000 6000.000 1000.
 1
 1.08444762E 1.73212473E-02-6.29233249E-06 1.02369961E-09-6.16216828E-14
 2
 3.55598475E3.53735134E 2.10306633E-01 2.04745507E-02 5.89743006E-05 3
 -1.01534255E-07 4.47105660E-11 3.95468722E 2.52910455E 4.08610970E 4
 C6H5OO 3/26/ 9 THERMC 6H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1403.000 11
 1.67078262E 1.62326229E-02-5.47969630E-06 8.43510060E-10-4.86562431E-14
 2
 8.14242915E6.08346973E2.99164672E 7.03857150E-02-6.34400574E-05 3
 2.91548920E-08-5.30706938E-12 1.41320240E 4.20142955E
 4
 C6H5OOH 3/26/ 9 THERMC 6H 60 2 0G 300.000 5000.000
 1404.000 21

1.92317474E 1.63154699E-02-5.53448904E-06 8.55059974E-10-4.94583790E-14
2
-1.01971012E7.61674471E4.03105975E 7.96101888E-02-7.21655013E-05 3
3.27610696E-08-5.85584239E-12-3.10973017E 4.54324978E
4
C6H5OH L 4/84C 6H 60 1 0G 300.000 5000.000 1000.
1
0.14912073E 0.18378135E-01-0.61983128E-05 0.91983221E-09-0.49209565E-13
2
-0.18375199E0.55924103E0.16956539E 0.52271299E-01-0.72024050E-05 3
-0.35859603E-07 0.20449073E-10-0.13284121E 0.32542160E0.11594207E 4
C6H5O T05/02C 6H 50 1 0G 200.000 6000.000 1000.
1
1.37221720E 1.74688771E-02-6.35504520E-06 1.03492308E-09-6.23410504E-14
2
2.87274751E4.88181680E4.66204455E-01 4.13443975E-02 1.32412991E-05 3
-5.72872769E-08 2.89763707E-11 4.77858391E 2.76990274E 6.49467016E 4
C6H4OH 4/ 9/ 9 THERMC 6H 50 1 0G 300.000 5000.000
1402.000 11
1.73187560E 1.36366984E-02-4.68316332E-06 7.29071204E-10-4.23805358E-14
2
1.14990276E6.89986593E5.99875435E 8.59063379E-02-9.12525636E-05 3
4.72275890E-08-9.35576749E-12 1.78621926E 4.99931427E
4
OC6H4OH 4/ 9/ 9 THERMC 6H 50 2 0G 300.000 5000.000
1403.000 11
2.22718210E 1.21038561E-02-4.18429526E-06 6.54475399E-10-3.81746504E-14
2
-2.34827539E9.61035467E8.02205657E 1.09403210E-01-1.23489276E-04 3
6.56286805E-08-1.31527870E-11-1.55949156E 5.72175202E
4
O-C6H4O2 AK0405C 6H 40 2 0G 270.000 3000.000 1370.00
1
1.23614349E 2.40491397E-02-1.16529057E-05 2.71332785E-09-2.47593219E-13
2
-1.67079717E4.00310857E2.36179712E 6.86058343E-02-6.39129516E-05 3
3.06903009E-08-5.97357785E-12-1.26704431E 3.53724482E
4
P-C6H4O2 AK0405C 6H 40 2 0G 270.000 3000.000 1370.00
1
1.23423732E 2.40612690E-02-1.16565184E-05 2.71393504E-09-2.47643065E-13
2
-2.06185312E4.08244024E2.43170113E 6.87937608E-02-6.41382837E-05 3
3.08126855E-08-5.99832072E-12-1.65696994E 3.48309430E
4
O-OC6H5OJ WKM C 60 2H 5 0G 300.000 5000.000
1400.000 01
1.84625733E 1.57607263E-02-5.44671499E-06 8.51765760E-10-4.96759541E-14
2
-1.72770226E7.28742484E2.65459198E 7.17179095E-02-6.31552372E-05 3
2.81132946E-08-4.97463333E-12 6.45283150E 3.81123139E
4
P-OC6H5OJ WKM C 60 2H 5 0G 300.000 5000.000
1400.000 01
1.82799770E 1.59280974E-02-5.50765220E-06 8.61649836E-10-5.02677539E-14
2
-6.25907994E7.25809444E3.29683290E 7.27365977E-02-6.36158220E-05 3

2.80683553E-08-4.92279426E-12 6.73402222E 4.09349895E
 4
 P-C6H3O2 AK0505C 6H 30 2 0G 270.000 3000.000 1290.00
 1
 1.22963699E 2.15055142E-02-1.07516136E-05 2.57528163E-09-2.41023652E-13
 2
 1.15428998E3.72584002E1.57852347E 6.55376473E-02-6.50308721E-05 3
 3.32026554E-08-6.86665555E-12 1.51750093E 3.31518638E
 4
 C5H6 T 1/90C 5H 6 0 0G 200.000 6000.000 1000.
 1
 0.99757848E 0.18905543E-01-0.68411461E-05 0.11099340E-08-0.66680236E-13
 2
 0.11081693E0.32209454E 0.86108957E 0.14804031E-01 0.72108895E-04 3
 -0.11338055E-06 0.48689972E-10 0.14801755E 0.21353453E 0.16152485E 4
 C5H5 TAK0505C 5H 5 0 0G 298.150 3500.000 969.35
 1
 1.33675715E 3.24793912E-02-1.67587774E-05 4.03514137E-09-3.70739036E-13
 2
 3.00730524E 1.60315806E3.97555452E 7.41370991E-02-1.11803345E-04 3
 9.04628776E-08-2.80999747E-11 3.01769405E 3.67153636E
 4
 C5H6-L 2/ 5/ 9 THERMC 5H 6 0 0G 300.000 5000.000
 1372.000 21
 1.29600892E 1.48953758E-02-5.23622902E-06 8.27916389E-10-4.86464523E-14
 2
 2.38180800E4.25312093E 3.58448213E 3.24459626E-02-1.70150991E-05 3
 4.22715914E-09-4.18452556E-13 2.76514681E 9.60644208E
 4
 C#CCVCCJ GLAR C 5H 5 0 0G 300.000 5000.000
 1396.000 11
 1.41230912E 1.14233190E-02-3.95851276E-06 6.20128961E-10-3.62097887E-14
 2
 4.25158384E5.02942871E6.16143558E-01 5.06466579E-02-4.48561743E-05 3
 2.02459419E-08-3.64542145E-12 4.71532377E 2.71623299E
 4
 C5H7 1/22/ 9 WKM C 5H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1377.000 31
 1.36630213E 1.68061358E-02-5.98746539E-06 9.55341072E-10-5.64951981E-14
 2
 1.27238941E5.46331286E6.75118368E 6.06461693E-02-4.01260152E-05 3
 1.22051562E-08-1.33459844E-12 2.01365277E 5.62694938E
 4
 CVCCJCVC 3/1/95 Z&B C 5H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.40879309E 1.62398907E-02-5.64768950E-06 8.86857524E-10-5.18698993E-14
 2
 1.76798698E5.13735038E2.94595603E 5.68783623E-02-4.31336497E-05 3
 1.68169537E-08-2.67926433E-12 2.35156925E 3.98188778E
 4
 CVCCVCCJ Z&B C 5H 7 0 0G 300.000 5000.000
 1386.000 21
 1.47302883E 1.59030900E-02-5.57729508E-06 8.80604825E-10-5.16963733E-14
 2
 1.74050791E5.42670706E1.60087476E 5.38764703E-02-3.96302225E-05 3
 1.49599474E-08-2.31995284E-12 2.31199746E 3.35492960E
 4

CVCCJCVCOH 10/6/95 Z&B C 5H 70 1 0G 300.000 5000.000
 1397.000 31
 1.67465815E 1.58357240E-02-5.44954706E-06 8.49881387E-10-4.94743246E-14
 2
 -4.30972870E6.19378748E2.91175436E 6.69362484E-02-5.71603047E-05 3
 2.48753749E-08-4.33243894E-12 1.96441523E 4.17454344E
 4
 HOCVCCVO 1/26/ 9 WKM C 3H 40 2 0G 300.000 5000.000
 1413.000 21
 1.66505478E 6.11745137E-03-2.09080785E-06 3.24985683E-10-1.88875073E-14
 2
 -3.82179939E6.36794754E2.01837189E 6.26539783E-02-6.73359280E-05 3
 3.39430425E-08-6.48917648E-12-3.31367523E 3.18162860E
 4
 CVCCVCCOH 1/23/ 9 WKM C 5H 80 1 0G 300.000 5000.000
 1396.000 31
 1.63079670E 1.79957763E-02-6.03115896E-06 9.23992259E-10-5.31254053E-14
 2
 -1.58204603E5.84137244E5.31488384E-01 6.06983915E-02-4.81499862E-05 3
 2.00308244E-08-3.38987282E-12-1.03301302E 3.07961436E
 4
 OC5H70 1/22/ 9 WKM C 5H 70 2 0G 300.000 5000.000
 1375.000 31
 1.65416953E 1.86677673E-02-6.44836048E-06 1.00787611E-09-5.87521858E-14
 2
 -2.82017168E5.47258181E 4.88394767E 4.03401300E-02-1.97774150E-05 3
 3.68903501E-09-3.40202384E-14-2.35295942E 9.97070337E
 4
 OC4H60 1/23/ 9 WKM C 4H 60 2 0G 300.000 5000.000
 1382.000 31
 1.41894774E 1.53345510E-02-5.24594862E-06 8.14655154E-10-4.72759368E-14
 2
 -4.10001835E4.43771751E 4.21628848E 3.57422725E-02-2.04226185E-05 3
 5.63821367E-09-5.88888993E-13-3.72055911E 1.02814620E
 4
 OC4H50 1/23/ 9 WKM C 4H 50 2 0G 300.000 5000.000
 1388.000 21
 1.32138775E 1.37339051E-02-4.62639517E-06 7.10941370E-10-4.09538499E-14
 2
 -2.16535271E3.64185255E 4.60550978E 3.30498712E-02-2.13102363E-05 3
 7.37021089E-09-1.08289438E-12-1.85460831E 1.01599453E
 4
 O2CCHOOJ Z&B C 2H 10 4 0G 300.000 5000.000
 1682.000 01
 1.09910849E 7.46985861E-03-2.75568271E-06 4.51353051E-10-2.72108652E-14
 2
 -3.51335323E2.11652231E 8.91497688E 8.60571847E-03 5.24416766E-07 3
 -2.79301331E-09 7.62963051E-13-3.40867754E8.72978273E 4
 HOCVCCJVO 1/26/ 9 WKM C 3H 30 2 0G 300.000 5000.000
 1414.000 11
 1.52720985E 5.02586331E-03-1.68408578E-06 2.58390706E-10-1.48849424E-14
 2
 -1.98506828E5.54641734E 6.07270082E-01 4.96011303E-02-5.32300885E-05 3
 2.68392951E-08-5.13094510E-12-1.58814562E 1.94817133E
 4
 C5H5OH 5/ 2/91 THE.MC 5H 60 1 0G 300.000 5000.000
 1398.000 11

1.53433477E 1.50754059E-02-5.13553582E-06 7.95807816E-10-4.61311517E-14
2
-1.19645453E5.85204430E4.26822012E 6.62446749E-02-5.68494038E-05 3
2.46858526E-08-4.26820696E-12-5.75581338E 4.47962850E
4
C5H5O 5/16/90 THERMC 5H 50 1 0G 300.000 5000.000
1392.000 01
1.48322894E 1.40483376E-02-4.92302051E-06 7.77041219E-10-4.56103939E-14
2
1.45523665E5.73228191E2.83112840E 5.67277287E-02-4.44757303E-05 3
1.74924447E-08-2.76004847E-12 2.04992154E 3.69634411E
4
C5H4OH T 8/99C 5H 50 1 0G 200.000 6000.000 1000.
1
1.33741248E 1.51996469E-02-5.45685046E-06 8.80944866E-10-5.27493258E-14
2
2.20358027E4.59569069E1.28398054E 4.90298511E-02-1.35844414E-05 3
-2.92983743E-08 1.90820619E-11 6.37364803E 3.08073591E 8.00114499E 4
C5H4O T 8/99C 5H 40 1 0G 200.000 6000.000 1000.
1
1.00806824E 1.61143465E-02-5.83314509E-06 9.46759320E-10-5.68972206E-14
2
1.94364771E2.94521623E 2.64576497E-01 3.34873827E-02 1.67738470E-06 3
-2.96207455E-08 1.54431476E-11 5.11159287E 2.35409513E 6.64245999E 4
C5H3O TAK0905C 5H 30 1 0G 300.000 3500.000 1500.00
1
1.19961781E 1.34287065E-02-5.90045309E-06 1.22553862E-09-9.86114716E-14
2
2.89592010E4.07548249E3.03242604E 5.43937201E-02-4.95018348E-05 3
2.25523751E-08-4.10727920E-12 3.35644081E 3.78374823E
4
CJVCCVCCVO 2/ 5/ 9 THERMC 5H 50 1 0G 300.000 5000.000
1396.000 21
1.62360823E 1.18297101E-02-4.11454219E-06 6.46026823E-10-3.77767639E-14
2
1.93499885E5.83498817E5.06628841E-01 6.04671965E-02-5.97396749E-05 3
2.96804228E-08-5.76240010E-12 2.42765544E 2.82994148E
4
CVCCVCCJVO 2/ 5/ 9 THERMC 5H 50 1 0G 300.000 5000.000
1399.000 11
1.53178248E 1.27352911E-02-4.35882964E-06 6.76912763E-10-3.92771371E-14
2
7.60582726E5.43599625E2.18492198E-01 5.92100223E-02-5.89241174E-05 3
2.97411920E-08-5.85244770E-12 1.20600764E 2.55968530E
4
CJVCCVO 4/ 8/94 THERMC 3H 30 1 0G 300.000 5000.000
1402.000 11
1.07482537E 6.19822688E-03-2.06130981E-06 3.14418872E-10-1.80309517E-14
2
1.51410162E3.01266033E 1.46654466E 3.23390476E-02-3.05588208E-05 3
1.44081861E-08-2.65600505E-12 1.78850058E 1.80850321E
4
CH3COOCH3 T10/07C 3.H 6.0 2. 0.G 200.000 6000.000 1000.
1
8.38776809E 1.90836514E-02-6.82197320E-06 1.09765423E-09-6.55561842E-14
2
-5.40805971E1.64156253E 7.18744749E6.29221513E-03 8.17059377E-05 3
-9.82940778E-08 3.73744521E-11-5.23417155E3.24161798E4.99331833E 4

CH2COOCH3 T10/07C 3.H 5.O 2. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1
 8.38776809E 1.90836514E-02-6.82197320E-06 1.09765423E-09-6.55561842E-14
 2
 -5.40805971E1.64156253E 7.18744749E6.29221513E-03 8.17059377E-05 3
 -9.82940778E-08 3.73744521E-11-5.23417155E3.24161798E4.99331833E 4
 CH3COOCH2 T10/07C 3H 5O 2 0G 200.000 6000.000 1000
 1
 1.02649450E 1.48203457E-02-5.31197051E-06 8.56531776E-10-5.12421924E-14
 2
 -3.12340796E2.66045572E 3.51220985E 1.85582748E-02 2.64110567E-05 3
 -4.93050675E-08 2.14021359E-11-2.86749272E 1.17994305E2.66568964E 4
 CH3COOH g 6/00C 2H 4O 2 0G 200.000 6000.000 1000
 1
 7.67084601E 1.35152602E-02-5.25874333E-06 8.93184479E-10-5.53180543E-14
 2
 -5.57560970E1.54677315E 2.78950201E 9.99941719E-03 3.42572245E-05 3
 -5.09031329E-08 2.06222185E-11-5.34752488E 1.41053123E5.19873137E 4
 HCL ATcT3CCL 1.H 1. 0. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Pelucchi,
 2.75038607E 1.46525702E-03-4.85796370E-07 7.90400572E-11-4.88097333E-15
 2
 -1.18941369E 6.56298585E 3.46434022E 4.74166973E-04-2.00403781E-06 3
 3.32826880E-09-1.45873238E-12-1.21280024E 2.66176266E1.10858645E 4
 CL2 REF ELEMENT ATcT3CCL 2. 0. 0. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Pelucchi,
 4.72497332E4.52025622E-04 2.48339908E-07-1.98734964E-11-1.38247235E-15
 2
 -1.50144014E2.18753211E-01 2.74354106E 7.78656796E-03-1.44041508E-05 3
 1.24869963E-08-4.11292285E-12-1.05955046E 9.41507624E 0.00000000E 4
 CL ATcT3CCL 1. 0. 0. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Pelucchi,
 2.96123231E4.06760214E-04 1.45948930E-07-2.36008477E-11 1.41691234E-15
 2
 1.36901066E 3.02880221E 2.23418328E 1.73391135E-03-1.15488156E-06 3
 -1.12443736E-09 9.89461388E-13 1.38580303E 6.68075708E 1.45892781E 4
 CH3OCOCH2CL C 3.H 5.O 2.CL 1.G 300.000 5000.000 1000.
 1 !Thergas
 0.20981960E0.36826914E-02 0.47411149E-05-0.12643723E-08 0.10616560E-12
 2
 -0.59013078E0.77395508E0.20817319E 0.32793194E-01-0.11491212E-04 3
 -0.90928202E-10 0.31467149E-13-0.50928535E 0.40248562E
 4
 CH2CL g12/99C 1.H 2.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000
 1 !Burcat
 4.58143318E 4.70002394E-03-1.65867811E-06 2.64426164E-10-1.56861143E-14
 2
 1.26224801E 1.40525938E 3.52075492E 4.99532931E-03 4.40178197E-06 3
 -9.08417002E-09 4.03782288E-12 1.30417996E 7.50945133E 1.43363830E 4
 CH3CL tpi91C 1.H 3.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000
 1 !Burcat
 3.97883949E 7.91729094E-03-2.81713927E-06 4.51715634E-10-2.69086155E-14
 2
 -1.16761879E 2.58272676E 3.96611858E5.05692958E-03 4.02006413E-05 3
 -4.82781901E-08 1.86721580E-11-1.10729538E 5.70446517E9.84664159E 4
 COCH2CL C 2.H 2.O 1.CL 1.G 300.000 5000.000 1000.
 1 !Thergas

0.20937170E0.36035231E-02 0.47652043E-05-0.12783560E-08 0.10761518E-12
 2
 -0.62859133E0.81730423E 0.12817848E 0.31598821E-01-0.96675303E-05 3
 -0.15104045E-08 0.53409507E-12-0.54867688E 0.33997749E
 4
 CH2OCOCH2CL C 3.H 4.O 2.CL 1.G 300.000 5000.000 1000.
 1 !Thergas
 0.20937170E0.36035231E-02 0.47652043E-05-0.12783560E-08 0.10761518E-12
 2
 -0.62859133E0.81730423E 0.12817848E 0.31598821E-01-0.96675303E-05 3
 -0.15104045E-08 0.53409507E-12-0.54867688E 0.33997749E
 4
 CH3OCOCHCL C 3.H 4.O 2.CL 1.G 300.000 5000.000 1000.
 1 !Thergas
 0.20937170E0.36035231E-02 0.47652043E-05-0.12783560E-08 0.10761518E-12
 2
 -0.62859133E0.81730423E 0.12817848E 0.31598821E-01-0.96675303E-05 3
 -0.15104045E-08 0.53409507E-12-0.54867688E 0.33997749E
 4
 C2H5CL T06/11C 2.H 5.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 6.77417343E 1.30492053E-02-4.67370081E-06 7.52809912E-10-4.49899075E-14
 2
 -1.65816334E1.05157529E 3.58369774E 5.02103864E-03 4.39001544E-05 3
 -6.22537878E-08 2.56063949E-11-1.49469870E 9.85386437E1.33784192E 4
 C2H3CL T 6/11C 2.H 3.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 6.32341000E 8.52343039E-03-3.04197672E-06 4.88915441E-10-2.91775277E-14
 2
 -4.64920470E7.74958634E 2.27191109E 1.25087140E-02 1.21343633E-05 3
 -2.73077584E-08 1.26573716E-11 1.36544369E 1.47576437E 2.65800390E 4
 CH2CL2 tpi91C 1.H 2.CL 2. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 6.29318149E 5.98773270E-03-2.15635738E-06 3.48717095E-10-2.09014331E-14
 2
 -1.39806830E5.90810756E 3.09078884E 8.35269259E-03 1.25182071E-05 3
 -2.46845519E-08 1.11752358E-11-1.28332020E 1.20563837E1.14733400E 4
 CH2CLCH2CL ATcT/AC 2.CL 2.H 4. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 9.68476700E 1.12630298E-02-4.31576920E-06 7.25209500E-10-4.45818752E-14
 2
 -1.99525878E2.39965067E 4.68235340E 3.93962518E-03 5.07306234E-05 3
 -7.03930514E-08 2.83531047E-11-1.75372415E 6.96581596E1.56436158E 4
 CH3CHCL2 T 6/11C 2.H 4.CL 2. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 9.09567674E 1.08697157E-02-3.86741990E-06 6.20397968E-10-3.69782326E-14
 2
 -1.91148895E1.97555082E 3.18055846E 1.94629497E-02 7.84537538E-06 3
 -2.67053479E-08 1.28978565E-11-1.71561838E 1.25299229E1.53202053E 4
 CH2CH2CL 1-chloro? 3/10C 2.H 4.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat
 6.33557579E 1.05535090E-02-3.72692346E-06 5.94577539E-10-3.52943207E-14
 2
 7.00241054E5.42089862E 4.52093357E 7.18692942E-03 1.81348982E-05 3
 -2.69955922E-08 1.08742755E-11 7.92869711E 6.01920526E 9.70805592E 4
 CH3CHCL 2-chloro 3/10C 2.H 4.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
 1 !Burcat

5.99819049E 1.11132750E-02-3.98843798E-06 6.43305132E-10-3.84817170E-14
2
9.04451655E4.15831190E 4.59020227E 6.37689976E-04 3.84996846E-05 3
-4.91337133E-08 1.91339874E-11 1.01373505E 6.59847208E 1.17863407E 4
CH2CHCL T 6/11C 2.H 3.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
1 !Burcat
6.32341000E 8.52343039E-03-3.04197672E-06 4.88915441E-10-2.91775277E-14
2
-4.64920470E7.74958634E 2.27191109E 1.25087140E-02 1.21343633E-05 3
-2.73077584E-08 1.26573716E-11 1.36544369E 1.47576437E 2.65800390E 4
CH2CCL A 8/05C 2.H 2.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
1 Burcat
6.57992662E 5.50498054E-03-1.93056595E-06 3.06672838E-10-1.81536735E-14
2
3.05524286E7.26735678E 1.75764780E 2.07031239E-02-1.84481964E-05 3
6.31043021E-09 1.19854774E-13 3.17529714E 1.70686824E 3.30467417E 4
COCHCL C 2H 1CL 1O 1G 300.000 5000.000
1399.000 01 !calculated
8.29024695E 3.99811426E-03-1.37968274E-06 2.15495439E-10-1.25557500E-14
2
-7.72259357E1.54230388E 2.95802564E 1.90706224E-02-1.80920125E-05 3
8.68550819E-09-1.64070131E-12-6.12561945E 1.22977899E
4
OCOCH2CL C 2H 2CL 1O 2G 300.000 5000.000
1401.000 01 !calculated
1.07910387E 6.48414134E-03-2.13778115E-06 3.24083787E-10-1.85028088E-14
2
-2.58812850E2.62928405E 3.20096624E 2.66167362E-02-2.27626112E-05 3
9.94465501E-09-1.72870530E-12-2.35203025E 1.35609349E
4
CHCL2 g12/93C 1.H 1.CL 2. 0.G 200.000 6000.000 1000.
1 !Burcat
6.80210912E 2.86000875E-03-1.03664482E-06 1.68416656E-10-1.01027167E-14
2
9.16929806E5.70765415E 3.41194137E 1.40168850E-02-1.42771614E-05 3
6.24721839E-09-6.15096358E-13 9.99583151E 1.12991582E 1.15220260E 4
CHCL T 3/12C 1.H 1.CL 1. 0.G 200.000 6000.000 1000.
1 !Burcat
6.56352786E 3.00134010E-04-9.88996592E-08 1.86048201E-11-1.31979002E-15
2
3.61516077E1.02479287E 4.57769406E9.61303113E-03 4.74564190E-05 3
-5.89051409E-08 2.32661062E-11 3.73197024E 3.42962307E 3.85711245E 4

!CH3COOCH2O2
!CH2COOCH2OOH
!HOOCH2COOCHO
!CH3OCOCH2O2
!CH2OCOCH2OOH
!HOOCH2OCOCHO
END