

! This thermodynamic database was obtained by fitting the thermodynamic properties  
! extracted from the following file: TOT1811.therm  
! The thermodynamic properties are fitted in order to preserve not only the  
! continuity of each function at the intermediate temperature, but also the continuity  
! of the derivatives, from the 1st to the 3rd order  
! The intermediate temperatures are chosen in order to minimize the fitting error.  
! Last update: 1/28/2019

THERMO ALL

270. 1000. 3500.

AR AR 1 G 200.00 3500.00 820.00

1

2.50013931e3.98290200e-07 3.45886082e-10-1.18293971e-13 1.38553174e-17

2

-7.45407891e 4.37897362e 2.49974489e 1.52569132e-06-3.17359231e-09 3

2.74307057e-12-8.58511922e-16-7.45343207e 4.38079817e

4

N2 N 2 G 200.00 3500.00 1050.00

1

2.81166073e 1.67067353e-03-6.79997428e-07 1.32881379e-10-1.02767442e-14

2

-8.69811579e 6.64838050e 3.73100682e1.83159730e-03 4.32324662e-06 3

-3.04378151e-09 7.46071562e-13-1.06287426e 2.16821198e

4

HE HE 1 G 200.00 3500.00 850.00

1

2.50020615e5.42576298e-07 4.63926302e-10-1.57302170e-13 1.82971406e-17

2

-7.45426807e 9.27648988e-01 2.49964853e 2.08151569e-06-4.16682427e-09

3

3.47465907e-12-1.04992675e-15-7.45332012e 9.30248556e-01

4

H2 H 2 G 200.00 3500.00 700.00

1

3.78199881e1.01873259e-03 1.24226233e-06-4.19011898e-10 4.75543793e-14

2

-1.10283023e5.60525910e 2.64204438e 5.49529274e-03-1.27163634e-05 3

1.28749173e-08-4.70027749e-12-9.43236614e5.12231102e-01

4

H H 1 G 200.00 3500.00 860.00

1

2.50031493e7.73406828e-07 6.39345346e-10-2.12551791e-13 2.44479191e-17

2

2.54736474e4.48357228e-01 2.49950544e 2.99164046e-06-5.92759759e-09 3

4.87810165e-12-1.45539320e-15 2.54737866e4.44574018e-01

4

O2 O 2 G 200.00 3500.00 700.00

1

2.82012408e 2.48211357e-03-1.51202094e-06 4.48556201e-10-4.87305668e-14

2

-9.31350148e 7.94914552e 3.74403921e2.79740147e-03 9.80122558e-06 3

-1.03259643e-08 3.79931247e-12-1.06069827e 3.82132646e

4

O 1 G 200.00 3500.00 720.00  
1  
2.62549143e2.08959644e-04 1.33918546e-07-3.85875896e-11 4.38918689e-15  
2  
2.92061519e 4.48358519e 3.14799201e3.11174065e-03 6.18137897e-06 3  
-5.63808798e-09 1.94866016e-12 2.91309118e 2.13446549e  
4  
H2O H 2O 1 G 200.00 3500.00 1420.00  
1  
2.66777075e 3.05768849e-03-9.00442411e-07 1.43361552e-10-1.00857817e-14  
2  
-2.98875645e 6.91191131e 4.06061172e8.65807189e-04 3.24409528e-06 3  
-1.80243079e-09 3.32483293e-13-3.02831314e2.96150481e-01  
4  
OH H 1O 1 G 200.00 3500.00 1700.00  
1  
2.49867369e 1.66635279e-03-6.28251516e-07 1.28346806e-10-1.05735894e-14  
2  
3.88110716e 7.78218862e 3.91354631e1.66275926e-03 2.30920029e-06 3  
-1.02359508e-09 1.58829629e-13 3.40005047e 2.05474719e-01  
4  
H2O2 H 2O 2 G 200.00 3500.00 1800.00  
1  
4.76869639e 3.89237848e-03-1.21382349e-06 1.92615285e-10-1.22581990e-14  
2  
-1.80900220e5.11811777e-01 3.34774224e 7.05005437e-03-3.84522006e-06 3  
1.16720661e-09-1.47618105e-13-1.75784785e 7.17868851e  
4  
HO2 H 1O 2 G 200.00 3500.00 700.00  
1  
3.02391889e 4.46390907e-03-2.23146492e-06 6.12710799e-10-6.64266237e-14  
2  
3.99341609e 9.10699973e 3.61994299e 1.05805705e-03 5.06678941e-06 3  
-6.33800762e-09 2.41597281e-12 3.15898234e 6.44411482e  
4  
CO C 1O 1 G 200.00 3500.00 960.00  
1  
2.79255381e 1.87486886e-03-8.59711926e-07 1.91200070e-10-1.67855286e-14  
2  
-1.41723335e 7.41443560e 3.75723891e2.14465241e-03 5.42079005e-06 3  
-4.17025963e-09 1.11901127e-12-1.43575530e 2.79976799e  
4  
CO2 C 1O 2 G 200.00 3500.00 1450.00  
1  
4.70876468e 2.62914704e-03-9.30606462e-07 1.43892920e-10-7.62581414e-15  
2  
-4.90562639e2.34976452e 2.31684347e 9.22755036e-03-7.75654093e-06 3  
3.28225360e-09-5.48722482e-13-4.83626067e 1.00786234e  
4  
HOCO H 1C 1O 2 G 200.00 3500.00 1570.00  
1  
5.88810541e 3.28985507e-03-9.88703861e-07 1.12295277e-10-2.32818718e-15  
2  
-2.40914384e5.05613727e 2.36661498e 1.22618052e-02-9.56063074e-06 3  
3.75217930e-09-5.81927554e-13-2.29856904e 1.35214769e  
4  
CH4 C 1H 4 G 300.00 3500.00 700.00  
1

5.05346405e-01 1.23697845e-02-4.99807922e-06 1.04392765e-09-8.62897416e-  
 14 2  
 -9.58982501e 1.61752775e 5.23967335e1.46835123e-02 5.29732711e-05 3  
 -5.41668822e-08 1.96318566e-11-1.02526308e4.97649748e 4  
 CH3 C 1H 3 G 300.00 3500.00 1060.00  
 1  
 2.78805104e 6.15233477e-03-2.21179349e-06 3.74402648e-10-2.48151349e-14  
 2  
 1.65862829e 5.77899818e 3.47829310e 3.54764773e-03 1.47408440e-06 3  
 -1.94375955e-09 5.21921232e-13 1.64399516e 2.40875956e  
 4  
 CH2 C 1H 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.81272972e 3.55431388e-03-1.28768523e-06 2.21273744e-10-1.48738147e-14  
 2  
 4.62073492e 6.64284652e 3.76489460e 1.43839191e-03 4.75583077e-07 3  
 -4.31788591e-10 7.58292874e-14 4.58645699e 1.48953153e  
 4  
 CH2 (S) C 1H 2 G 300.00 3500.00 970.00  
 1  
 2.75934299e 3.65468307e-03-1.35589914e-06 2.74980411e-10-2.36795472e-14  
 2  
 5.06429079e 6.11646383e 4.18185434e2.21134314e-03 7.71527541e-06 3  
 -5.95950381e-09 1.58314628e-12 5.03669407e7.03002602e-01  
 4  
 C C 1 G 200.00 3500.00 700.00  
 1  
 2.49472531e 3.92839476e-05-6.70014980e-08 3.71818694e-11-5.07306885e-15  
 2  
 8.54504422e 4.79314254e 2.54495192e2.47725281e-04 5.48018277e-07 3  
 -5.48551250e-10 2.04117331e-13 8.54434105e 4.56874273e  
 4  
 CH C 1H 1 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 2.27990128e 2.16985238e-03-7.07637885e-07 1.23973494e-10-9.56348515e-15  
 2  
 7.11059412e 8.77326061e 3.77264332e1.58547350e-03 2.83512238e-06 3  
 -1.36146058e-09 2.23995332e-13 7.06312492e 8.79407904e-01  
 4  
 CH3O2H C 1H 40 2 G 300.00 3500.00 1090.00  
 1  
 7.33435519e 9.33238534e-03-3.40995713e-06 5.79327692e-10-3.79241109e-14  
 2  
 -1.81046374e1.19553974e 7.70006797e-01 3.34217373e-02-3.65604414e-05 3  
 2.08548532e-08-4.68827401e-12-1.66736094e 2.02794895e  
 4  
 CH3O2 C 1H 30 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 5.64141817e 8.74328281e-03-3.21961406e-06 5.43695218e-10-3.45015008e-14  
 2  
 -1.19010148e3.41914683e 1.44289632e 1.80733314e-02-1.09946545e-05 3  
 3.42333984e-09-4.34452142e-13 3.21366390e 1.93041293e  
 4  
 CH3OH C 1H 40 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.71701530e 1.21538353e-02-5.02107031e-06 1.01068070e-09-8.18460823e-14  
 2

-2.57693409e 9.47420540e 8.47330479e-01 1.63086904e-02-8.48344961e-06  
 3  
 2.29304341e-09-2.59952013e-13-2.50962544e 1.95933297e  
 4  
 CH3O C 1H 30 1 G 300.00 3500.00 1740.00  
 1  
 5.72238062e 5.90227637e-03-1.80340720e-06 2.13335009e-10-5.61816409e-15  
 2  
 -7.86252225e7.49173677e 8.89660985e-01 1.70119767e-02-1.13807351e-05 3  
 3.88280928e-09-5.32841479e-13 1.60316121e 1.85001134e  
 4  
 CH2OH C 1H 30 1 G 300.00 3500.00 1360.00  
 1  
 5.04534950e 6.02727059e-03-2.11386821e-06 3.36085905e-10-2.00987482e-14  
 2  
 -4.03584143e1.57524073e 2.34821579e 1.39600168e-02-1.08632206e-05 3  
 4.62498416e-09-8.08499162e-13-3.30222106e 1.22661977e  
 4  
 CH2O C 1H 20 1 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 1.33335652e 1.00905183e-02-5.12952562e-06 1.25425207e-09-1.19639109e-13  
 2  
 -1.39080170e 1.59916144e 4.32621296e7.01151853e-03 3.15176961e-05 3  
 -3.36478638e-08 1.23454023e-11-1.43270169e 2.62028902e  
 4  
 HCO C 1H 10 1 G 200.00 3500.00 770.00  
 1  
 2.60049318e 5.29278258e-03-2.69184211e-06 7.21357798e-10-7.43521409e-14  
 2  
 4.05725330e 1.07450933e 4.03483979e2.15836864e-03 1.18233875e-05 3  
 -1.18459406e-08 4.00593954e-12 3.83636392e 4.20008770e  
 4  
 HO2CHO C 1H 20 3 G 300.00 3500.00 1750.00  
 1  
 1.00230825e 4.43559488e-03-1.56185338e-06 2.43413972e-10-1.38379570e-14  
 2  
 -3.81313380e2.33591553e 2.47434345e 2.16898555e-02-1.63512196e-05 3  
 5.87745825e-09-8.18701426e-13-3.54892793e 1.72835404e  
 4  
 HOCHO H 2C 10 2 G 200.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.79473661e 8.42765725e-03-3.84722250e-06 8.63389842e-10-7.73674422e-14  
 2  
 -4.73118221e 5.12933885e 1.85206266e 1.27447105e-02-7.44476686e-06 3  
 2.19581368e-09-2.62426309e-13-4.66124595e 1.56434956e  
 4  
 OCHO C 1O 2H 1 G 200.00 3500.00 700.00  
 1  
 2.58373953e 8.99565940e-03-4.55939787e-06 1.11902584e-09-1.07899898e-13  
 2  
 -1.67164582e 1.34890938e 4.25809175e5.72067562e-04 1.59428742e-05 3  
 -1.84069475e-08 6.86566202e-12-1.69508675e 6.00851172e  
 4  
 C2H6 C 2H 6 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 4.07959141e 1.57445261e-02-5.96197393e-06 1.06867182e-09-7.61012340e-14  
 2  
 -1.25948053e1.43089412e2.41778724e-01 2.53475709e-02-1.39645112e-05 3

4.03257452e-09-4.87754387e-13-1.10391121e 2.19572625e  
 4  
 C2H5 C 2H 5 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 5.19791360e 1.11042800e-02-3.71281686e-06 5.47665571e-10-2.89412604e-14  
 2  
 1.17176215e4.91382513e 6.75421801e-01 2.11542617e-02-1.20878017e-05 3  
 3.64951180e-09-4.59753237e-13 1.33457186e 1.95628439e  
 4  
 C2H5O2H C 2H 60 2 G 300.00 3500.00 1450.00  
 1  
 1.00876750e 1.40221806e-02-4.79128015e-06 7.15474133e-10-3.78163629e-14  
 2  
 -2.40669299e2.56733582e5.77204918e-01 4.34425389e-02-3.52261336e-05 3  
 1.47085102e-08-2.45040879e-12-2.09741147e 2.97412031e  
 4  
 C2H5O2 C 2H 50 2 G 300.00 3500.00 1480.00  
 1  
 9.29919683e 1.29334624e-02-4.54028592e-06 7.01327861e-10-3.92078228e-14  
 2  
 -7.64002445e2.14311736e 2.00183268e-01 3.75253910e-02-2.94645378e-05 3  
 1.19284684e-08-1.93568426e-12-4.94671644e 2.60335034e  
 4  
 C2H4 C 2H 4 G 300.00 3500.00 1650.00  
 1  
 4.60402718e 9.50595350e-03-3.15129261e-06 4.53052074e-10-2.23949159e-14  
 2  
 3.97229102e3.77420905e6.02932450e-02 2.08133970e-02-1.34307867e-05 3  
 4.60638301e-09-6.51687481e-13 5.51151676e 2.10642172e  
 4  
 C2H3 C 2H 3 G 300.00 3500.00 1450.00  
 1  
 4.18728376e 7.47581588e-03-2.58984227e-06 4.05265795e-10-2.35022721e-14  
 2  
 3.38403785e 1.51958751e 1.23421214e 1.56222204e-02-1.10171572e-05 3  
 4.27989337e-09-6.91541509e-13 3.46967692e 1.68637048e  
 4  
 C2H2 C 2H 2 G 300.00 3500.00 790.00  
 1  
 4.37267454e 5.47212830e-03-2.03181542e-06 3.75019116e-10-2.77049062e-14  
 2  
 2.58626597e2.43835921e 7.70536907e-01 2.37107998e-02-3.66622044e-05 3  
 2.95989761e-08-9.27579255e-12 2.64317975e 1.40907683e  
 4  
 C2H C 2H 1 G 300.00 3500.00 1710.00  
 1  
 3.41788257e 4.21328989e-03-1.58936946e-06 2.68739191e-10-1.73346359e-14  
 2  
 6.72874491e 5.32512367e 4.60873599e 1.42766785e-03 8.54158643e-07 3  
 -6.83903344e-10 1.21940589e-13 6.68801772e1.05894068e 4  
 C2H5OH C 2H 60 1 G 300.00 3500.00 1580.00  
 1  
 7.32490827e 1.39762977e-02-4.67366748e-06 6.82063684e-10-3.47025038e-14  
 2  
 -3.18909574e1.38313071e4.22291411e-01 3.35894614e-02-2.32937596e-05 3  
 8.53864266e-09-1.27783209e-12-2.94428423e 2.70882146e  
 4

C2H5O C 2H 5O 1 G 300.00 3500.00 700.00  
1  
1.68957255e 2.35453825e-02-1.23415273e-05 3.08911893e-09-2.98016648e-13  
2  
-3.10347953e 1.69410913e 3.27852943e 1.44656289e-02 7.11508755e-06 3  
-1.54409905e-08 6.31987957e-12-3.32593350e 9.84203392e  
4  
PC2H4OH C 2H 5O 1 G 300.00 3500.00 1470.00  
1  
7.18479680e 1.17471700e-02-4.06239751e-06 6.31554725e-10-3.61645074e-14  
2  
-6.24418450e9.60110092e 1.82077785e 2.63431399e-02-1.89562444e-05 3  
7.38613379e-09-1.18490244e-12-4.66716293e 1.83437446e  
4  
SC2H4OH C 2H 5O 1 G 300.00 3500.00 1500.00  
1  
6.63757422e 1.19924585e-02-4.07718738e-06 6.22004997e-10-3.47508084e-14  
2  
-9.66525354e7.65007787e 1.23305393e 2.64045127e-02-1.84892415e-05 3  
7.02736239e-09-1.10231037e-12-8.04389745e 2.06149529e  
4  
C2H4O2H C 2H 5O 2 G 300.00 3500.00 1440.00  
1  
9.66417632e 1.29483231e-02-4.44318337e-06 6.83406482e-10-3.84804393e-14  
2  
1.86599132e2.38806241e 2.23212418e 3.35929124e-02-2.59479639e-05 3  
1.06393234e-08-1.76693824e-12 4.00642234e 1.46847781e  
4  
C2H4O1-2 C 2H 4O 1 G 300.00 3500.00 1520.00  
1  
6.04215804e 1.11433647e-02-3.80167462e-06 5.65226940e-10-2.94248186e-14  
2  
-9.44151524e1.02352918e2.19672856e 3.28246452e-02-2.51976751e-05 3  
9.94943769e-09-1.57288053e-12-6.93689371e 3.29622805e  
4  
C2H3O1-2 C 2H 3O 1 G 200.00 3500.00 1800.00  
1  
7.60993625e 6.11300596e-03-1.59366937e-06 1.28294159e-10 2.98968068e-15  
2  
1.61313302e1.70584528e 7.34197746e-02 2.28608204e-02-1.55501814e-05 3  
5.29737268e-09-7.14937891e-13 1.88444761e 2.37307466e  
4  
CH3CHO C 2H 4O 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
6.22195371e 1.06589270e-02-3.75190329e-06 6.00731628e-10-3.66603824e-14  
2  
-2.30621355e8.31408577e 9.75916637e-01 2.23167871e-02-1.34667868e-05 3  
4.19883662e-09-5.36397187e-13-2.11735621e 2.00785613e  
4  
CH3CO C 2H 3O 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
6.07689016e 8.12979339e-03-2.81854999e-06 4.38698307e-10-2.55171837e-14  
2  
-4.06801047e6.15492453e 1.47388064e 1.83587034e-02-1.13426417e-05 3  
3.59576931e-09-4.63999267e-13-2.41092705e 1.87575232e  
4  
CH2CHO C 2H 3O 1 G 300.00 3500.00 1340.00  
1

6.47703792e 7.91358604e-03-2.83605891e-06 4.62112655e-10-2.83231297e-14  
 2  
 -1.16170812e8.37157286e 7.37868281e-01 2.50454357e-02-2.20135026e-05 3  
 1.00031294e-08-1.80836357e-12 3.76389339e 2.09962837e  
 4  
 CH2CO C 2H 20 1 G 300.00 3500.00 1360.00  
 1  
 5.69523628e 6.46841658e-03-2.33588414e-06 3.83408110e-10-2.36897850e-14  
 2  
 -8.05944305e4.61154403e 2.49503978e 1.58807592e-02-1.27171444e-05 3  
 5.47226119e-09-9.59140718e-13-7.18898960e 1.18115657e  
 4  
 HCCO C 2H 10 1 G 300.00 3500.00 1220.00  
 1  
 5.81420513e 3.89116779e-03-1.41168608e-06 2.35668533e-10-1.49424971e-14  
 2  
 1.94026782e4.94089647e 3.33028661e 1.20351629e-02-1.14247949e-05 3  
 5.70731267e-09-1.13618105e-12 2.00087543e 7.53650387e  
 4  
 HCOOH C 1H 20 2 G 300.00 3500.00 1640.00  
 1  
 5.21581644e 5.48253641e-03-1.72756111e-06 2.25438490e-10-8.81949912e-15  
 2  
 -4.56198641e2.59494560e 1.19691275e 1.52847405e-02-1.06929917e-05 3  
 3.86992247e-09-5.64381082e-13-4.43016637e 1.87820781e  
 4  
 CH3CO3 C 2H 30 3 G 300.00 3500.00 1760.00  
 1  
 1.40469381e 2.48483420e-03 1.65900439e-06-8.55133989e-10 9.82287244e-14  
 2  
 -2.73756816e4.36816973e 2.64892548e 2.83894083e-02-2.04187576e-05 3  
 7.50765465e-09-1.08966739e-12-2.33635811e 1.77505788e  
 4  
 CH3CO3H C 2H 40 3 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 1.23807018e 1.08772145e-02-4.04888397e-06 6.94756696e-10-4.56573670e-14  
 2  
 -7.51809422e3.74730276e2.33886892e 5.83597007e-02-6.14873753e-05 3  
 3.15756660e-08-6.27164715e-12-7.15304886e 3.67067395e  
 4  
 CH2OHCHO C 2H 40 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 8.91045186e 9.14305837e-03-2.53718677e-06 2.39203912e-10 8.50819938e-16  
 2  
 -4.09945450e1.84179622e 1.56305396e 2.54706093e-02-1.61434792e-05 3  
 5.27857147e-09-6.99061342e-13-3.83494818e 2.13476880e  
 4  
 CHOCHO C 2H 20 2 G 300.00 3500.00 1570.00  
 1  
 9.97760259e 4.26981223e-03-1.12729433e-06 7.37809055e-11 5.98360578e-15  
 2  
 -2.96900177e2.75230973e 7.08345765e-01 2.78857532e-02-2.36902952e-05 3  
 9.65467301e-09-1.51963616e-12-2.67794711e 2.13768445e  
 4  
 O2C2H4O2H C 2H 50 4 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.24323243e 1.62358927e-02-6.84260319e-06 1.39267431e-09-1.12911127e-13  
 2

-1.87641105e2.90906767e 5.81911522e 3.09319128e-02-1.90892866e-05 3  
 5.92848299e-09-7.42884555e-13-1.63833552e 6.70139035e  
 4  
 HO2CH2CHO C 2H 40 3 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 1.23807018e 1.08772145e-02-4.04888397e-06 6.94756696e-10-4.56573670e-14  
 2  
 -7.51809422e3.74730276e2.33886892e 5.83597007e-02-6.14873753e-05 3  
 3.15756660e-08-6.27164715e-12-7.15304886e 3.67067395e  
 4  
 CH3OCHO C 2H 40 2 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 5.02910657e2.87377519e-02 6.15808970e-05-2.98073518e-08 4.29774802e-12  
 2  
 -4.07046731e 1.82412181e 2.12034974e-07-1.31715123e-09 2.87530013e-12  
 3  
 2.88411189e-08-1.66481344e-11-4.00005982e 4.07099930e  
 4  
 CH3OCO C 2H 30 2 G 300.00 3500.00 730.00  
 1  
 2.57527318e 2.11166692e-02-1.20149822e-05 3.14849390e-09-3.11411020e-13  
 2  
 -2.07588781e 1.60124236e 4.66126893e 9.68655552e-03 1.14715528e-05 3  
 -1.83003965e-08 7.03409940e-12-2.10634335e 6.60518516e  
 4  
 C3H8 C 3H 8 G 300.00 3500.00 1690.00  
 1  
 8.33847007e 1.79340922e-02-5.80534981e-06 7.91037708e-10-3.43401227e-14  
 2  
 -1.70816233e2.27461799e1.38651266e 4.09518028e-02-2.62352705e-05 3  
 8.85017800e-09-1.22652064e-12-1.37945792e 2.92742161e  
 4  
 IC3H7 C 3H 7 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.05951251e 1.82035621e-02-6.54041321e-06 1.09272144e-09-7.13189353e-14  
 2  
 7.29671818e6.80793083e6.08211221e-01 3.30207259e-02-1.88880497e-05 3  
 5.66592015e-09-7.06485424e-13 9.69709872e 2.92791809e  
 4  
 NC3H7 C 3H 7 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 7.21724982e 1.65877265e-02-5.58902439e-06 8.31338515e-10-4.40999325e-14  
 2  
 8.50975633e1.26938767e1.37086178e-01 3.50892007e-02-2.30432453e-05 3  
 8.14967015e-09-1.19478101e-12 1.08484352e 2.61969991e  
 4  
 C3H6 C 3H 6 G 298.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.31755201e 1.65820017e-02-6.59972302e-06 1.29512916e-09-1.03784375e-13  
 2  
 -3.79456071e1.05616187e8.55987188e-02 3.08112255e-02-1.84574096e-05 3  
 5.68686491e-09-7.13747674e-13 1.92567819e 2.40935687e  
 4  
 C3H5-A C 3H 5 G 298.00 3500.00 1600.00  
 1  
 8.53877792e 1.04611885e-02-3.15379708e-06 3.85306884e-10-1.26413689e-14  
 2  
 1.71766363e2.28181758e3.57888096e-01 3.27028536e-02-2.40053580e-05 3



9.07345729e-09-1.37016487e-12 2.00235695e 2.42845603e  
 4  
 C3H5-S C 3H 5 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.52599516e 1.37686655e-02-5.50691342e-06 1.07278366e-09-8.39560017e-14  
 2  
 2.86430050e9.99635700e 1.54227621e 2.48435965e-02-1.47360226e-05 3  
 4.49097224e-09-5.58704416e-13 3.04371438e 1.69765696e  
 4  
 C3H5-T C 3H 5 G 300.00 3500.00 770.00  
 1  
 1.49331935e 2.33788729e-02-1.18550710e-05 2.86552470e-09-2.68203790e-13  
 2  
 2.87117775e 1.76892214e 2.52238869e 1.80330581e-02-1.44114618e-06 3  
 -6.15086046e-09 2.65919399e-12 2.85533009e 1.29935191e  
 4  
 C3H5O C 3H 5O 1 G 300.00 3500.00 1610.00  
 1  
 9.11079978e 1.37589661e-02-5.15319199e-06 9.32421983e-10-6.74695911e-14  
 2  
 7.77376170e2.10036658e 9.27196847e-01 3.40908988e-02-2.40959865e-05 3  
 8.77622923e-09-1.28545208e-12 1.04088818e 2.23747992e  
 4  
 C3H6O C 3H 6O 1 G 300.00 3500.00 1550.00  
 1  
 9.00938222e 1.57632590e-02-5.29374355e-06 7.64253417e-10-3.74126438e-14  
 2  
 -1.56669515e2.44960178e1.88321638e 4.38731909e-02-3.24969034e-05 3  
 1.24645372e-08-1.92455519e-12-1.22902459e 3.28282089e  
 4  
 CH3CHCHO C 3H 5O 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.70347362e 1.89922318e-02-9.18109977e-06 2.14445657e-09-1.96154637e-13  
 2  
 -6.21094363e1.05801331e 2.92067498e-01 3.32398010e-02-2.10540741e-05 3  
 6.54185446e-09-8.06904344e-13-3.90283743e 2.41197343e  
 4  
 AC4H7OOH C 4H 8O 2 G 300.00 3500.00 1660.00  
 1  
 1.22738272e 2.55483383e-02-9.81265077e-06 1.82078670e-09-1.35039880e-13  
 2  
 -1.24525960e3.36837474e 1.60151447e 5.12647544e-02-3.30503762e-05 3  
 1.11532065e-08-1.54052480e-12-8.90938817e 2.32129081e  
 4  
 CH3CHCO C 3H 4O 1 G 300.00 3500.00 1280.00  
 1  
 6.99681463e 1.49445085e-02-6.71568578e-06 1.45955079e-09-1.25293200e-13  
 2  
 -1.29366480e1.07908059e 1.50068777e 3.21199049e-02-2.68431035e-05 3  
 1.19425808e-08-2.17276001e-12-1.15296395e 1.70816035e  
 4  
 AC3H5OOH C 3H 6O 2 G 298.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.36957657e 1.27112963e-02-4.21186263e-06 6.49030109e-10-3.94931202e-14  
 2  
 -1.11479407e4.31791016e 4.22354618e 3.37606729e-02-2.17530098e-05 3  
 7.14575129e-09-9.41815506e-13-7.73794171e 8.08652616e  
 4

C3H6OH1-2 C 3H 7O 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
8.46016352e 1.89669003e-02-7.38013554e-06 1.39189577e-09-1.05413394e-13  
2  
-1.21581707e1.51603324e 4.08605477e-01 3.68592515e-02-2.22904282e-05 3  
6.91422639e-09-8.72403758e-13-9.25960980e 2.84163793e  
4  
C3H6OH2-1 C 3H 7O 1 G 300.00 3500.00 1590.00  
1  
8.99548234e 1.75103792e-02-6.94615357e-06 1.37004323e-09-1.07539337e-13  
2  
-1.65436320e1.93287236e 1.31207693e 3.68397010e-02-2.51813628e-05 3  
9.01583327e-09-1.30970758e-12-1.41003090e 2.13023225e  
4  
HOC3H6O2 C 3H 7O 3 G 300.00 3500.00 1480.00  
1  
1.24409055e 2.15172909e-02-8.97737594e-06 1.82414691e-09-1.48047122e-13  
2  
-3.10315628e3.23089026e 2.93449048e 4.72103044e-02-3.50175923e-05 3  
1.35539741e-08-2.12943685e-12-2.82176640e 1.72809693e  
4  
SC3H5OH C 3H 6O 1 G 300.00 3500.00 1260.00  
1  
7.83167544e 1.85990426e-02-7.98421836e-06 1.67672190e-09-1.40411942e-13  
2  
-2.22362405e1.56369776e5.71229678e-02 4.36428470e-02-3.77982713e-05 3  
1.74513531e-08-3.27029908e-12-2.02482633e 2.42451084e  
4  
C3H5OH C 3H 6O 1 G 300.00 3500.00 1630.00  
1  
9.39463114e 1.51343106e-02-4.86246276e-06 6.64177249e-10-2.94552530e-14  
2  
-2.20582199e2.45922026e 4.73537667e-01 3.70265645e-02-2.50087087e-05 3  
8.90395064e-09-1.29322418e-12-1.91499434e 2.28055845e  
4  
CH2CCH2OH C 3H 5O 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
7.15397365e 1.62590933e-02-7.06959971e-06 1.52062107e-09-1.30983749e-13  
2  
1.01359982e8.36739478e 2.39300609e 2.68390212e-02-1.58862063e-05 3  
4.78603091e-09-5.84512894e-13 1.18499465e 1.73999548e  
4  
C3H4-P C 3H 4 G 300.00 3500.00 1570.00  
1  
6.45797858e 1.06371316e-02-3.61161722e-06 5.39412691e-10-2.85851275e-14  
2  
1.94136786e1.10770989e 1.72714322e 2.26902153e-02-1.51273023e-05 3  
5.42930020e-09-8.07229635e-13 2.08991609e 1.38804115e  
4  
C3H4-A C 3H 4 G 300.00 3500.00 1420.00  
1  
6.37608366e 1.10282079e-02-3.89476312e-06 6.16686076e-10-3.59564768e-14  
2  
2.00917847e1.13283006e 5.08248696e-01 2.75573205e-02-2.13550933e-05 3  
8.81402419e-09-1.47914981e-12 2.17582498e 1.90382079e  
4  
C3H3 C 3H 3 G 300.00 3500.00 840.00  
1

5.75057762e 1.05635747e-02-4.84060952e-06 1.09040068e-09-9.80036130e-14  
 2  
 4.00565408e5.04125059e 1.75584147e 2.95861278e-02-3.88094543e-05 3  
 2.80498013e-08-8.12163476e-12 4.07276565e 1.35345464e  
 4  
 C3H2 C 3H 2 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 6.42043189e 6.05128866e-03-2.30888141e-06 4.10631875e-10-2.84293474e-14  
 2  
 6.08598164e8.32404334e 2.15397882e 1.95955841e-02-1.84330427e-05 3  
 8.94193413e-09-1.72114805e-12 6.19349626e 1.32451538e  
 4  
 C2H5CHO C 3H 60 1 G 300.00 3500.00 1710.00  
 1  
 9.33264604e 1.46861072e-02-4.56011955e-06 5.69518135e-10-1.90908109e-14  
 2  
 -2.69164882e2.52385565e9.86882752e-02 3.67477080e-02-2.39124009e-05 3  
 8.11426720e-09-1.12212430e-12-2.36909719e 2.53220280e  
 4  
 CH2CH2CHO C 3H 50 1 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 1.38640400e 2.84363938e-02-1.56688640e-05 4.07196321e-09-4.03232083e-13  
 2  
 6.14151634e 2.19844218e 2.41071832e 2.25831692e-02-3.12623980e-06 3  
 -7.87339320e-09 3.86296664e-12 4.70747631e 1.74080446e  
 4  
 RALD3 C 3H 50 1 G 300.00 3500.00 1140.00  
 1  
 -6.08013768e 4.60180078e-02-2.61696720e-05 6.65382129e-09-6.35305357e-13  
 2  
 -2.14966001e 5.90959840e 7.04072886e2.01204450e-05 3.44068124e-05 3  
 -2.87710234e-08 7.13330094e-12-5.14121758e5.92381685e 4  
 C2H3CHO C 3H 40 1 G 300.00 3500.00 1600.00  
 1  
 9.22597839e 1.12038372e-02-3.67974365e-06 5.08180252e-10-2.25803375e-14  
 2  
 -1.23719484e2.08137560e 8.18908043e-01 3.22215131e-02-2.33838148e-05 3  
 8.71820989e-09-1.30539747e-12-9.68168587e 2.36968522e  
 4  
 CH3COCH3 C 3H 60 1 G 300.00 3500.00 1790.00  
 1  
 9.79507855e 1.35932465e-02-4.01642284e-06 4.43034305e-10-7.94380246e-15  
 2  
 -3.07542949e2.70699391e7.54581368e-03 3.54985524e-02-2.23728244e-05 3  
 7.27968292e-09-9.62782995e-13-2.72449554e 2.59292980e  
 4  
 CH3COCH2 C 3H 50 1 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 8.40473847e 1.29432044e-02-4.25667366e-06 6.02254911e-10-2.86748418e-14  
 2  
 -7.89528923e1.63899805e 1.00367440e 3.15622335e-02-2.18217955e-05 3  
 7.96708586e-09-1.18666713e-12-5.54175085e 2.27480006e  
 4  
 NC4H10 C 4H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.54355362e 1.56272553e-02-3.14851999e-06-5.94424210e-11 5.32964638e-14  
 2  
 -2.28455262e6.02417835e1.20836758e 5.26137081e-02-3.39705640e-05 3

1.13561294e-08-1.53219963e-12-1.68537208e 2.98384958e  
 4  
 PC4H9 C 4H 9 G 300.00 3500.00 950.00  
 1  
 3.94763006e 3.16286394e-02-1.12984867e-05 1.11637450e-09 5.54031605e-14  
 2  
 6.05554723e 7.76350061e2.76188385e-01 4.94131381e-02-3.93792741e-05 3  
 2.08221903e-08-5.13033783e-12 6.85807273e 2.79243295e  
 4  
 SC4H9 C 4H 9 G 300.00 3500.00 850.00  
 1  
 3.40122928e 3.20901863e-02-1.12255470e-05 9.71712110e-10 8.30726274e-14  
 2  
 4.66283101e 1.05291639e 2.36336421e-01 4.69837998e-02-3.75083943e-05  
 3  
 2.15857099e-08-5.97986791e-12 5.20086280e 2.52835874e  
 4  
 IC4H10 C 4H 10 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 5.51955795e 3.23747266e-02-1.18655436e-05 1.37455177e-09 1.57073481e-14  
 2  
 -1.97025810e6.34483426e1.85965329e 5.58007941e-02-3.97537191e-05 3  
 1.61302002e-08-2.91200067e-12-1.78430198e 3.09610166e  
 4  
 IC4H9 C 4H 9 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 7.95880517e 2.55088283e-02-8.62221490e-06 8.09648920e-10 4.02033223e-14  
 2  
 3.37759297e1.61084037e1.15582377e 5.10042938e-02-3.53657102e-05 3  
 1.32774789e-08-2.13948724e-12 5.98437685e 3.11244820e  
 4  
 TC4H9 C 4H 9 G 300.00 3500.00 1400.00  
 1  
 7.90871689e 2.55264450e-02-8.65284049e-06 8.24419700e-10 3.80550657e-14  
 2  
 8.35470579e1.73299272e1.29900233e 5.18342142e-02-3.68397361e-05 3  
 1.42467509e-08-2.35878980e-12 3.41363196e 3.01901373e  
 4  
 IC4H8 C 4H 8 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 7.63433967e 2.47722696e-02-1.05415828e-05 2.18152373e-09-1.80119594e-13  
 2  
 -6.21385767e1.72949366e 7.17301599e-01 4.01434653e-02-2.33509125e-05 3  
 6.92571993e-09-8.39035733e-13-3.72372397e 2.01415164e  
 4  
 IC4H7 C 4H 7 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 1.18177117e 3.67769037e-02-1.77031337e-05 3.74786266e-09-2.92191284e-13  
 2  
 1.31214242e 2.00120540e 3.86130010e 2.14653098e-02 1.51074247e-05 3  
 -2.75002882e-08 1.08678626e-11 1.27462902e 8.04059663e  
 4  
 IC4H70 C 4H 70 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.18822163e 1.89918532e-02-7.42296498e-06 1.41442848e-09-1.08683660e-13  
 2  
 1.15971319e3.56333819e 1.50010972e 4.20632012e-02-2.66490883e-05 3

8.53521488e-09-1.09768177e-12 4.89727156e 2.05567447e  
 4  
 C4H8-1 C 4H 8 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.03330449e 1.99470428e-02-7.40538998e-06 1.30472507e-09-9.09598189e-14  
 2  
 -5.56551437e3.07722296e6.91489888e-01 4.44460090e-02-2.78211951e-05 3  
 8.86613439e-09-1.14115556e-12-1.59668184e 2.88948525e  
 4  
 C4H8-2 C 4H 8 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 5.15907399e 2.89997694e-02-1.32974598e-05 2.96139017e-09-2.60424474e-13  
 2  
 -4.76704683e3.39008062e 5.60608454e-01 3.92185817e-02-2.18131368e-05 3  
 6.11534459e-09-6.98473698e-13-3.11159924e 2.14977742e  
 4  
 C4H71-3 C 4H 7 G 300.00 3500.00 1420.00  
 1  
 8.33017754e 1.98466503e-02-6.37614061e-06 5.28652768e-10 3.81103734e-14  
 2  
 1.19533850e1.83767119e1.12550124e 4.64823652e-02-3.45124591e-05 3  
 1.37381920e-08-2.28751273e-12 1.46387978e 3.05571711e  
 4  
 C4H71-4 C 4H 7 G 300.00 3500.00 1530.00  
 1  
 8.45916998e 1.93968541e-02-5.99075605e-06 3.82147970e-10 5.73994809e-14  
 2  
 1.98988324e1.80212793e3.29329052e-01 4.23733221e-02-2.85167051e-05 3  
 1.01973763e-08-1.54639600e-12 2.25881131e 2.81156134e  
 4  
 C4H71-O C 4H 7O 1 G 300.00 3500.00 1600.00  
 1  
 1.37371777e 1.70982846e-02-6.55972544e-06 1.21466090e-09-8.98269615e-14  
 2  
 -3.28789072e4.64105970e1.48200925e 5.51462520e-02-4.22296948e-05 3  
 1.60771481e-08-2.41209059e-12 4.83726091e 3.41662556e  
 4  
 C4H6 C 4H 6 G 200.00 3500.00 1800.00  
 1  
 9.30872521e 1.50139591e-02-5.06688177e-06 7.84148097e-10-4.70262839e-14  
 2  
 8.60829987e2.47389586e 4.65225109e-01 3.46661815e-02-2.14437338e-05 3  
 6.84964885e-09-8.89456944e-13 1.17919599e 2.31239087e  
 4  
 C4H5 C 4H 5 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.90192654e1.91794386e-03 4.88814514e-06-1.91833948e-09 2.24139237e-13  
 2  
 3.48592740e7.70423351e2.01742308e-01 4.07954066e-02-3.07063136e-05 3  
 1.12647934e-08-1.60685144e-12 4.17788367e 2.69857683e  
 4  
 C4H4 C 4H 4 G 300.00 3500.00 1290.00  
 1  
 7.65777119e 1.26498258e-02-4.62248950e-06 7.81217082e-10-5.07629107e-14  
 2  
 3.13366016e1.49692661e 7.13119716e-01 3.41836288e-02-2.96617954e-05 3  
 1.37214268e-08-2.55855550e-12 3.31283217e 2.03030643e  
 4

C4H3 C 4H 3 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 1.30208969e 1.53590364e-03 1.80568200e-06-9.30237204e-10 1.18077198e-13  
 2  
 6.01811751e4.25791500e 2.34662666e 2.83894138e-02-2.35278181e-05 3  
 9.69177543e-09-1.55205057e-12 6.35755930e 1.38680560e  
 4  
 C4H2 C 4H 2 G 300.00 3500.00 720.00  
 1  
 7.13414735e 1.00526308e-02-4.84819206e-06 1.14884604e-09-1.07722834e-13  
 2  
 5.27577824e1.36443516e4.34754087e-01 5.21020832e-02-9.24512179e-05 3  
 8.22627589e-08-2.82722759e-11 5.38477042e 2.03848077e  
 4  
 C6H6 C 6H 6 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.15055544e 1.99961045e-02-7.07935460e-06 1.10673028e-09-6.24178899e-14  
 2  
 4.11452290e4.24445091e6.99882110e 7.24907868e-02-6.29247613e-05 3  
 2.75111779e-08-4.74405754e-12 9.33275680e 5.31863191e  
 4  
 FULVENE C 6H 6 G 200.00 3500.00 1560.00  
 1  
 1.44152220e 1.47750067e-02-3.90939181e-06 2.82308156e-10 1.62511622e-14  
 2  
 1.91167581e5.54965184e3.67012639e 6.11476948e-02-4.84985149e-05 3  
 1.93374890e-08-3.03746371e-12 2.47593868e 3.97971310e  
 4  
 C6H5 C 6H 5 G 300.00 3500.00 1390.00  
 1  
 1.12331261e 1.77269649e-02-6.33615682e-06 1.00236865e-09-5.75481750e-14  
 2  
 3.49856300e3.80075865e6.76261385e 6.95132669e-02-6.22206553e-05 3  
 2.78054854e-08-4.87825263e-12 3.99884457e 5.47375207e  
 4  
 C5H6 C 5H 6 G 200.00 3500.00 1630.00  
 1  
 1.35786764e 1.28174257e-02-3.11961936e-06 1.29368393e-10 2.76958521e-14  
 2  
 9.43770579e5.26289052e4.05866643e 5.60992486e-02-4.29495178e-05 3  
 1.64197154e-08-2.47082363e-12 1.51874796e 4.10783319e  
 4  
 C5H5 C 5H 5 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 4.01652588e 2.68451887e-02-1.26423015e-05 2.78092323e-09-2.35299425e-13  
 2  
 2.91110159e 1.44025731e2.58737467e 6.45817633e-02-9.35063898e-05 3  
 7.97943407e-08-2.77400914e-11 3.00355619e 3.09448142e  
 4  
 MCPTD C 6H 8 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 -1.21144532e 2.92206047e-01-1.95445890e-04 5.59670212e-08-5.79656630e-12  
 2  
 5.40571659e 6.85330239e 7.45334840e 6.43297952e-03 4.26983328e-05 3  
 -3.22345427e-08 6.45365091e-12 7.76192901e1.06683155e 4  
 C10H8 C 10H 8 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1

1.51184828e 3.89675576e-02-1.78248658e-05 3.92092279e-09-3.39215689e-13  
 2  
 1.01121562e6.09041102e8.71832426e 1.08564074e-01-9.40254318e-05 3  
 4.10014902e-08-7.10574258e-12 1.66434413e 6.15987877e  
 4  
 NC3H7O2 C 3H 7O 2 G 300.00 3500.00 1650.00  
 1  
 9.25591855e 2.27563801e-02-9.54934453e-06 1.92559465e-09-1.53946670e-13  
 2  
 -9.34005086e1.86388081e 1.92964396e 4.05170458e-02-2.56954042e-05 3  
 8.44925513e-09-1.14238008e-12-6.92238025e 2.03750491e  
 4  
 IC3H7O2 C 3H 7O 2 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 7.34738699e 2.68252330e-02-1.24179691e-05 2.76645854e-09-2.42147350e-13  
 2  
 -1.06484855e8.92587195e 1.07341266e 4.67426118e-02-3.61291344e-05 3  
 1.53120486e-08-2.73135173e-12-9.06744395e 2.27924165e  
 4  
 C3H7OOH C 3H 8O 2 G 300.00 3500.00 1530.00  
 1  
 1.13871492e 1.97925480e-02-6.62893779e-06 9.67106876e-10-4.94700798e-14  
 2  
 -2.73563036e2.91104777e9.73590405e-01 5.21082072e-02-3.83109566e-05 3  
 1.47719081e-08-2.30515656e-12-2.35739173e 3.57795697e  
 4  
 C3-OQOOH C 3H 6O 3 G 300.00 3500.00 1350.00  
 1  
 1.12132537e 2.34709018e-02-1.13098317e-05 2.59008079e-09-2.30885269e-13  
 2  
 -3.91289882e2.66260028e 8.46220450e-01 5.41880374e-02-4.54399823e-05 3  
 1.94444762e-08-3.35206960e-12-3.63298893e 2.65001343e  
 4  
 CHOCH2CHO C 3H 4O 2 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1  
 1.06304440e 1.18394227e-02-4.21486308e-06 6.67473434e-10-3.88516159e-14  
 2  
 -4.37970340e2.83088260e8.46550190e-01 4.53488948e-02-4.09040660e-05 3  
 1.85211002e-08-3.29681270e-12-4.06523375e 3.06741176e  
 4  
 CH2OHCH2CHO C 3H 6O 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.08721654e 1.63593216e-02-6.08637842e-06 1.10130849e-09-8.02911325e-14  
 2  
 -4.55272952e2.70748520e 2.66105929e 3.46062241e-02-2.12921305e-05 3  
 6.73306853e-09-8.62480026e-13-4.25712970e 1.73653673e  
 4  
 CH3CO2H C 2H 4O 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.06195365e 8.83226600e-03-2.54924379e-06 2.13473353e-10 7.27652554e-15  
 2  
 -5.71972759e3.23726793e7.52613551e-01 3.41037106e-02-2.36087809e-05 3  
 8.01330193e-09-1.07603300e-12-5.31033019e 2.91757692e  
 4  
 HCO3 C 1H 1O 3 G 300.00 3500.00 1490.00  
 1  
 7.67843584e 4.62692543e-03-1.54275270e-06 2.12409842e-10-8.98166116e-15  
 2

-1.61147276e1.27152259e 2.31459990e 1.90264850e-02-1.60389536e-05 3  
 6.69840577e-09-1.09723601e-12-1.45163044e 1.53011516e  
 4  
 HCO3H C 1H 20 3 G 300.00 3500.00 1750.00  
 1  
 1.00230668e 4.43563253e-03-1.56188514e-06 2.43424395e-10-1.38391380e-14  
 2  
 -3.81313332e2.33590722e 2.47434199e 2.16898607e-02-1.63512235e-05 3  
 5.87745807e-09-8.18701091e-13-3.54892796e 1.72835470e  
 4  
 CH2OHCOCH3 C 3H 60 2 G 300.00 3500.00 1460.00  
 1  
 1.16062110e 1.59761333e-02-5.42430575e-06 8.11522092e-10-4.31363774e-14  
 2  
 -4.81919050e3.20429615e 9.15361352e-01 4.52661324e-02-3.55167705e-05 3  
 1.45523736e-08-2.39602191e-12-4.50701769e 2.35800153e  
 4  
 NC3-QOOH C 3H 70 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.29748618e 1.76433870e-02-7.16935406e-06 1.42696153e-09-1.14477043e-13  
 2  
 -5.86411825e3.67690498e 1.55643299e 4.30176732e-02-2.83145926e-05 3  
 9.25853134e-09-1.20219507e-12-1.75348388e 2.50298688e  
 4  
 IC3-QOOH C 3H 70 2 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 1.04498043e 2.29490980e-02-1.05757759e-05 2.34172678e-09-2.03669154e-13  
 2  
 -5.22299426e2.40008692e1.71110877e-01 5.64007993e-02-5.00856593e-05 3  
 2.30818230e-08-4.28636527e-12-2.52528181e 2.97774852e  
 4  
 NC3-OOQOOH C 3H 70 4 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 1.11683562e 2.95822139e-02-1.42526305e-05 3.27126849e-09-2.92476812e-13  
 2  
 -2.00281219e2.06289848e 2.57588692e 5.68598942e-02-4.67260594e-05 3  
 2.04529769e-08-3.70154594e-12-1.78628196e 2.28105329e  
 4  
 IC3-OOQOOH C 3H 70 4 G 300.00 3500.00 1220.00  
 1  
 1.23035624e 2.79964884e-02-1.33482910e-05 3.03524084e-09-2.69271163e-13  
 2  
 -2.25784829e2.78550798e 1.73143844e 6.26591899e-02-5.59663668e-05 3  
 2.63238068e-08-5.04151829e-12-1.99988847e 2.52515831e  
 4  
 CH2COOH C 2H 30 2 G 300.00 3500.00 1440.00  
 1  
 1.01170850e 5.56298782e-03-8.24128628e-07-2.50442742e-11 1.25384218e-14  
 2  
 -3.40138321e2.77197730e 4.26277933e-01 3.24818963e-02-2.88646583e-05 3  
 1.29566824e-08-2.24123357e-12-3.12228797e 2.25664553e  
 4  
 IC4-OQOOH C 4H 80 3 G 300.00 3500.00 1570.00  
 1  
 1.51567879e 2.57227734e-02-1.11020451e-05 2.28943518e-09-1.86269530e-13  
 2  
 -4.30658407e4.59845002e 9.69279338e-01 6.18692920e-02-4.56369355e-05 3



1.69539322e-08-2.52138051e-12-3.86109630e 2.88616666e  
 4  
 NC4-OQOOH C 4H 80 3 G 300.00 3500.00 1330.00  
 1  
 1.18153445e 3.20093755e-02-1.53334982e-05 3.50316407e-09-3.12136547e-13  
 2  
 -4.27660549e2.73083214e 2.51946601e 5.99669047e-02-4.68645461e-05 3  
 1.93082006e-08-3.28300808e-12-4.02933512e 2.01899074e  
 4  
 C4H9OOH C 4H 100 2 G 300.00 3500.00 1780.00  
 1  
 1.73966948e 2.30088698e-02-8.34646932e-06 1.39883190e-09-9.01677554e-14  
 2  
 -3.38614042e6.23628946e 1.12895120e 5.95655969e-02-3.91527000e-05 3  
 1.29367460e-08-1.71066131e-12-2.80700874e 2.54997628e  
 4  
 C5EN-OQOOH-35 C 5H 80 3 G 300.00 3500.00 1580.00  
 1  
 1.69833146e 2.73095032e-02-1.19226853e-05 2.48166925e-09-2.03420392e-13  
 2  
 -3.51234520e5.58041780e 1.44561329e 6.66454559e-02-4.92669442e-05 3  
 1.82387405e-08-2.69662788e-12-3.02135384e 2.62635800e  
 4  
 NEOC5H10-O C 5H 100 1 G 300.00 3500.00 1470.00  
 1  
 1.29296103e 3.16150611e-02-1.35584975e-05 2.81753187e-09-2.32686284e-13  
 2  
 -2.37933924e4.88968549e6.91462638e 8.56129840e-02-6.86584188e-05 3  
 2.78061583e-08-4.48245269e-12-1.79591868e 5.44853543e  
 4  
 NC5H10-O C 5H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.40073101e 3.04405284e-02-1.35854526e-05 2.90305354e-09-2.44985844e-13  
 2  
 -2.55455866e5.25239383e3.79263098e 6.99959530e-02-4.65483064e-05 3  
 1.51115179e-08-1.94060590e-12-1.91376078e 4.38130562e  
 4  
 NC5-OQOOH C 5H 100 3 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.42172630e 3.77707683e-02-1.76257936e-05 3.93443034e-09-3.43954252e-13  
 2  
 -4.65061050e3.85369191e 2.52749929e 7.09332187e-02-5.29049961e-05 3  
 2.06149043e-08-3.30148510e-12-4.32095916e 2.18759162e  
 4  
 NEOC5-OQOOH C 5H 100 3 G 300.00 3500.00 1690.00  
 1  
 2.24459936e 2.37621277e-02-8.83881474e-06 1.53830075e-09-1.04514815e-13  
 2  
 -5.03880249e8.77405631e 1.27283562e 7.38761111e-02-5.33186817e-05 3  
 1.90845993e-08-2.70012112e-12-4.32314975e 2.55178450e  
 4  
 NC5H11OOH C 5H 120 2 G 300.00 3500.00 1630.00  
 1  
 1.66988185e 3.44172712e-02-1.43139761e-05 2.85300849e-09-2.25350876e-13  
 2  
 -3.73755763e5.75775302e 6.24289379e-02 7.52427671e-02-5.18834508e-05 3  
 1.82188468e-08-2.58207455e-12-3.19521133e 3.08116402e  
 4

NC4-QOOH C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1760.00  
 1  
 1.83774568e 1.83354725e-02-6.23923380e-06 9.66797423e-10-5.61281944e-14  
 2  
 -1.29135491e6.55986639e 1.19976578e 5.73756794e-02-3.95121374e-05 3  
 1.35701700e-08-1.84637998e-12-6.86700189e 2.69845517e  
 4  
 NC4H9-OO C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1320.00  
 1  
 8.96630114e 3.41074657e-02-1.57641000e-05 3.50715782e-09-3.06662916e-13  
 2  
 -1.40847395e1.58347447e 9.44281656e-01 5.84166156e-02-4.33881341e-05 3  
 1.74586902e-08-2.94899859e-12-1.19669263e 2.50940293e  
 4  
 IC4H9T-OO C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 9.11667611e 3.41757258e-02-1.58797345e-05 3.54686464e-09-3.10976548e-13  
 2  
 -1.64591648e1.96564028e 4.84069010e-01 6.15808277e-02-4.85048558e-05 3  
 2.08088336e-08-3.73597039e-12-1.42837478e 2.39860330e  
 4  
 IC4T-QOOH C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 1.20890742e 3.03954175e-02-1.40883982e-05 3.13822121e-09-2.74437748e-13  
 2  
 -1.09705556e3.28537329e4.26302142e-01 6.98139255e-02-6.06456912e-05 3  
 2.75777451e-08-5.08536764e-12-7.79165002e 3.05171096e  
 4  
 IC4P-QOOH C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1350.00  
 1  
 1.14809469e 3.08095616e-02-1.41939360e-05 3.14755455e-09-2.74422165e-13  
 2  
 -7.45268236e2.80879239e1.93281563e-01 6.53998681e-02-5.26276099e-05 3  
 2.21271466e-08-3.78916143e-12-4.30064068e 3.17369695e  
 4  
 IC4H9P-OO C 4H 90 2 G 300.00 3500.00 1380.00  
 1  
 8.54295826e 3.45220773e-02-1.59311943e-05 3.53852672e-09-3.08950056e-13  
 2  
 -1.29532173e1.39825068e 7.00555203e-01 5.72536803e-02-4.06394585e-05 3  
 1.54748862e-08-2.47133403e-12-1.07887140e 2.63784632e  
 4  
 NC4-OOQOOH C 4H 90 4 G 300.00 3500.00 1230.00  
 1  
 1.51474113e 3.37812811e-02-1.58996825e-05 3.57608795e-09-3.14486518e-13  
 2  
 -2.85698876e4.24732202e 1.10123476e 7.94599040e-02-7.16053202e-05 3  
 3.37688455e-08-6.45122585e-12-2.51145282e 2.81992196e  
 4  
 IC4T-OOQOOH C 4H 90 4 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 1.39939782e 3.54845223e-02-1.68915059e-05 3.83671077e-09-3.40131615e-13  
 2  
 -2.83614519e3.70531088e 1.55094394e 7.56233423e-02-6.54465302e-05 3  
 2.99415625e-08-5.60320657e-12-2.52755794e 2.56539769e  
 4  
 IC4P-OOQOOH C 4H 90 4 G 300.00 3500.00 1290.00  
 1

1.30518446e 3.65484801e-02-1.74274782e-05 3.96741951e-09-3.52552034e-13  
 2  
 -2.47096139e3.04334702e 1.64511787e 7.19181753e-02-5.85550308e-05 3  
 2.52219687e-08-4.47165071e-12-2.17666784e 2.75020267e  
 4  
 C5EN-QOOH C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1420.00  
 1  
 1.28791275e 3.32930454e-02-1.55378924e-05 3.46674396e-09-3.02869803e-13  
 2  
 3.23011716e3.38507184e 1.34404411e 6.57862381e-02-4.98616876e-05 3  
 1.95812018e-08-3.13992224e-12 6.50608085e 2.58442475e  
 4  
 C5EN-OO C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1280.00  
 1  
 1.00840321e 3.69913036e-02-1.74216180e-05 3.93130749e-09-3.47257402e-13  
 2  
 -8.98415155e1.96513637e 4.09897282e-01 6.72229749e-02-5.28493577e-05 3  
 2.23832553e-08-3.95115346e-12 1.57816336e 2.94089022e  
 4  
 C5EN-OOQOOH-35 C 5H 90 4 G 300.00 3500.00 1160.00  
 1  
 1.36699765e 4.21231934e-02-2.15503712e-05 5.21806335e-09-4.87293013e-13  
 2  
 -1.42354804e3.35883365e 5.24578569e-01 8.74521518e-02-8.01654036e-05 3  
 3.89048636e-08-7.74737927e-12-1.11857480e 3.17816498e  
 4  
 NEOC5H11-OO C 5H 110 2 G 300.00 3500.00 1660.00  
 1  
 1.69989732e 3.01601499e-02-1.19254896e-05 2.25822367e-09-1.69878947e-13  
 2  
 -2.10464569e6.14617731e 1.07910948e 6.85212672e-02-4.65891499e-05 3  
 1.61793724e-08-2.26643749e-12-1.57610621e 2.34108339e  
 4  
 NC5H1200 C 5H 110 2 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.06544848e 4.16170555e-02-1.93382868e-05 4.32113942e-09-3.79088223e-13  
 2  
 -1.98652039e2.50234586e 3.19664881e-01 7.34165014e-02-5.60299551e-05 3  
 2.31373796e-08-3.99759595e-12-1.71781508e 2.75475609e  
 4  
 NC5-QOOH C 5H 110 2 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.36538194e 3.77860020e-02-1.75151081e-05 3.90394425e-09-3.41708560e-13  
 2  
 -1.43879859e3.94678820e5.74283056e-01 8.15647789e-02-6.80290814e-05 3  
 2.98085460e-08-5.32336273e-12-1.06886793e 3.29074336e  
 4  
 NEOC5-QOOH C 5H 110 2 G 300.00 3500.00 1630.00  
 1  
 1.86197530e 2.85111424e-02-1.13969334e-05 2.18137254e-09-1.65768942e-13  
 2  
 -1.50391446e6.74883738e 1.48070310e 7.05701605e-02-5.01015514e-05 3  
 1.80114821e-08-2.59369986e-12-9.45181437e 2.35714319e  
 4  
 NC5-OOQOOH C 5H 110 4 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 1.54638476e 4.30531975e-02-2.04284728e-05 4.63174721e-09-4.10271992e-13  
 2

-3.17413365e4.31406916e 1.43265567e 8.72459280e-02-7.26246112e-05 3  
 3.20312949e-08-5.80388375e-12-2.81774138e 2.79053907e  
 4  
 NEOC5-OOQOOH C 5H 110 4 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.53088279e 2.46008468e-02-8.38584870e-06 1.28446216e-09-7.25492021e-14  
 2  
 -3.52662111e9.88693150e 2.93992987e 7.43095092e-02-4.98097340e-05 3  
 1.66266419e-08-2.20340750e-12-2.72134078e 2.21958278e  
 4  
 C4H6O2 C 4H 60 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 7.01919581e 2.89919962e-02-1.39811163e-05 3.22750474e-09-2.90888809e-13  
 2  
 -4.36055710e7.47846941e 9.15158242e-01 4.25565241e-02-2.52848896e-05 3  
 7.41408744e-09-8.72358628e-13-4.14081175e 2.55578553e  
 4  
 C4H8O C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.12815996e 2.48463701e-02-1.13234700e-05 2.47069946e-09-2.12413507e-13  
 2  
 -2.03756688e3.84267373e2.94845122e 5.64687053e-02-3.76754160e-05 3  
 1.22306795e-08-1.56796629e-12-1.52528505e 3.85892666e  
 4  
 C5H8O C 5H 80 1 G 300.00 3500.00 1330.00  
 1  
 6.70800689e 3.65243774e-02-1.77765821e-05 4.15639147e-09-3.79163308e-13  
 2  
 -5.52771783e9.67918423e5.12640161e 7.21165835e-02-5.79181679e-05 3  
 2.42774871e-08-4.16132414e-12-2.37976516e 5.07899200e  
 4  
 C3H7COOH C 4H 80 2 G 200.00 3500.00 700.00  
 1  
 4.40515914e-01 4.67995984e-02-2.56474571e-05 6.71810247e-09-6.76699908e-  
 13 2  
 -5.67910283e 2.88691254e 2.74376726e 3.36381621e-02 2.55562062e-06 3  
 -2.01419716e-08 8.91618368e-12-5.71134834e 1.85787811e  
 4  
 RBUTANOICA C 4H 70 2 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1  
 1.73105510e 2.08214412e-02-5.87534744e-06 8.11141815e-10-4.42965988e-14  
 2  
 -4.46752677e6.08845640e1.91270927e-01 7.19216512e-02-6.18244824e-05 3  
 2.80369983e-08-5.01251858e-12-3.98797685e 2.90613712e  
 4  
 RBUTANOICB C 4H 70 2 G 300.00 3500.00 1330.00  
 1  
 1.67390060e 2.08960815e-02-6.04821181e-06 9.01140456e-10-5.62675465e-14  
 2  
 -4.21181496e5.49029411e 1.89975131e-01 7.06676031e-02-6.21815068e-05 3  
 2.90381304e-08-5.34517544e-12-3.77161074e 2.96560020e  
 4  
 RBUTANOICC C 4H 70 2 G 300.00 3500.00 1350.00  
 1  
 1.74234031e 2.02889006e-02-5.73193655e-06 8.17887523e-10-4.80325054e-14  
 2  
 -4.13296929e5.90140013e2.82250082e-01 7.27500951e-02-6.40221527e-05 3

2.96031795e-08-5.37864212e-12-3.65491666e 3.17190882e  
 4  
 C4H9COOH C 5H 100 2 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 1.33757149e 2.98971630e-02-1.01935681e-05 1.62026502e-09-9.87673548e-14  
 2  
 -6.46490146e3.87670101e1.66663303e 7.84208661e-02-6.88915961e-05 3  
 3.31783446e-08-6.46128339e-12-6.09185123e 3.70394038e  
 4  
 RPENTANOICA C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1  
 1.73105510e 2.08214412e-02-5.87534744e-06 8.11141815e-10-4.42965988e-14  
 2  
 -4.46752677e6.08845640e1.91270927e-01 7.19216512e-02-6.18244824e-05 3  
 2.80369983e-08-5.01251858e-12-3.98797685e 2.90613712e  
 4  
 RPENTANOICB C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1330.00  
 1  
 1.67390060e 2.08960815e-02-6.04821181e-06 9.01140456e-10-5.62675465e-14  
 2  
 -4.21181496e5.49029411e 1.89975131e-01 7.06676031e-02-6.21815068e-05 3  
 2.90381304e-08-5.34517544e-12-3.77161074e 2.96560020e  
 4  
 RPENTANOICC C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1  
 1.68752424e 2.07142214e-02-5.85208691e-06 8.30942085e-10-4.82432686e-14  
 2  
 -4.22402243e5.58007870e 4.19345893e-01 6.87606347e-02-5.84576489e-05 3  
 2.64297557e-08-4.71955962e-12-3.77313086e 2.87698944e  
 4  
 RPENTANOICD C 5H 90 2 G 300.00 3500.00 1350.00  
 1  
 1.74234031e 2.02889006e-02-5.73193655e-06 8.17887523e-10-4.80325054e-14  
 2  
 -4.13296929e5.90140013e2.82250082e-01 7.27500951e-02-6.40221527e-05 3  
 2.96031795e-08-5.37864212e-12-3.65491666e 3.17190882e  
 4  
 C2H5CHCO C 4H 60 1 G 300.00 3500.00 890.00  
 1  
 8.31862188e2.57769694e-01 2.61215814e-04-9.01558710e-08 1.03226031e-11  
 2  
 -3.03242668e3.76260711e3.77727340e 2.85866049e-01-6.55024203e-04 3  
 5.96166238e-07-1.82464506e-10-8.79357317e 1.93200507e  
 4  
 C4H7COOH-1 C 5H 80 2 G 300.00 3500.00 1390.00  
 1  
 1.45914985e 2.37411908e-02-8.52128600e-06 1.37382525e-09-8.21476936e-14  
 2  
 -5.47249775e4.77236545e3.70209370e-01 6.67964652e-02-5.49838124e-05 3  
 2.36580106e-08-4.09009469e-12-5.05656228e 2.93848838e  
 4  
 C3H5COOH-1 C 4H 60 2 G 200.00 3500.00 1550.00  
 1  
 1.44504456e 1.46458192e-02-4.42635995e-06 5.04453673e-10-1.04234513e-14  
 2  
 -5.00901369e4.84192824e 6.41246525e-01 5.02824620e-02-3.89134336e-05 3  
 1.53376036e-08-2.40286699e-12-4.58092852e 2.42540703e  
 4

C2H3COOH C 3H 40 2 G 200.00 3500.00 1460.00  
 1  
 1.13823887e 1.05518990e-02-3.42025821e-06 4.56644045e-10-1.84567897e-14  
 2  
 -4.41347384e3.25593652e1.89198359e-01 4.22548773e-02-3.59918113e-05 3  
 1.53294994e-08-2.56517859e-12-4.07558350e 2.76459638e  
 4  
 C3H7CHCO C 5H 80 1 G 200.00 3500.00 1790.00  
 1  
 2.49750091e 2.70877993e-03 4.07761020e-06-1.90968267e-09 2.31446696e-13  
 2  
 -2.75749808e1.08302208e4.39957777e-01 5.95020020e-02-4.35144754e-05 3  
 1.58154889e-08-2.24413592e-12-1.84764227e 2.91073066e  
 4  
 CH2CH2COOH C 3H 50 2 G 300.00 3500.00 1350.00  
 1  
 1.27265340e 9.81852657e-03-2.63264121e-06 4.10502000e-10-2.91197594e-14  
 2  
 -3.40661404e3.76757916e 7.25058466e-01 4.53784540e-02-4.21436717e-05 3  
 1.99221220e-08-3.64238272e-12-3.08257420e 2.38260882e  
 4  
 RO2BUTANOIC C 4H 70 4 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 1.45390319e 2.69797332e-02-1.09312485e-05 2.12602294e-09-1.64284673e-13  
 2  
 -3.56893368e4.22613629e 3.26237571e 5.39896881e-02-3.51916871e-05 3  
 1.18108288e-08-1.61410590e-12-3.19229337e 1.79249204e  
 4  
 QBUTANOIC C 4H 70 4 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 9.44680464e 1.40890825e-02-6.70668583e-06 1.51288685e-09-1.32818575e-13  
 2  
 1.91332917e2.81812928e5.88861872e 6.23896285e-02-6.37545748e-05 3  
 3.14592853e-08-6.02777890e-12 2.30284892e 4.94686856e  
 4  
 ZBUTANOIC C 4H 70 6 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.71509971e 3.21642995e-02-1.45265250e-05 3.16055984e-09-2.71089893e-13  
 2  
 -4.87167967e4.94521678e 4.90929016e 6.68925461e-02-5.14714682e-05 3  
 2.06286181e-08-3.36826334e-12-4.52646353e 1.38131161e  
 4  
 KBUTANOIC C 4H 60 5 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 1.50812003e 2.99746636e-02-1.37944087e-05 3.03171374e-09-2.60935207e-13  
 2  
 -6.34178095e4.27051070e4.53521778e 9.53627237e-02-9.55294839e-05 3  
 4.84400889e-08-9.72101336e-12-5.87098692e 5.55092666e  
 4  
 RO2PENTANOIC C 5H 90 4 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 1.45390319e 2.69797332e-02-1.09312485e-05 2.12602294e-09-1.64284673e-13  
 2  
 -3.56893368e4.22613629e 3.26237571e 5.39896881e-02-3.51916871e-05 3  
 1.18108288e-08-1.61410590e-12-3.19229337e 1.79249204e  
 4  
 QPENTANOIC C 5H 90 4 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1

9.44680464e 1.40890825e-02-6.70668583e-06 1.51288685e-09-1.32818575e-13  
 2  
 1.91332917e2.81812928e5.88861872e 6.23896285e-02-6.37545748e-05 3  
 3.14592853e-08-6.02777890e-12 2.30284892e 4.94686856e  
 4  
 ZPENTANOIC C 5H 90 6 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.71509971e 3.21642995e-02-1.45265250e-05 3.16055984e-09-2.71089893e-13  
 2  
 -4.87167967e4.94521678e 4.90929016e 6.68925461e-02-5.14714682e-05 3  
 2.06286181e-08-3.36826334e-12-4.52646353e 1.38131161e  
 4  
 KPENTANOIC C 5H 80 5 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 1.50812003e 2.99746636e-02-1.37944087e-05 3.03171374e-09-2.60935207e-13  
 2  
 -6.34178095e4.27051070e4.53521778e 9.53627237e-02-9.55294839e-05 3  
 4.84400889e-08-9.72101336e-12-5.87098692e 5.55092666e  
 4  
 NC3H7OH C 3H 80 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.10496319e 1.81260731e-02-6.48607610e-06 1.10352513e-09-7.45033698e-14  
 2  
 -3.64580965e3.27312856e2.51644448e-01 4.32400205e-02-2.74143656e-05 3  
 8.85474347e-09-1.15106147e-12-3.23896370e 2.84335795e  
 4  
 CH3CHCH2OH C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 7.63374756e 2.08880310e-02-8.76974163e-06 1.80199756e-09-1.48384024e-13  
 2  
 -1.08851839e1.05293244e 2.18301336e 3.30007737e-02-1.88636939e-05 3  
 5.54049839e-09-6.67620249e-13-8.92291955e 1.89711862e  
 4  
 CH3CH2CHOH C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.06992300e 1.62004106e-02-6.03307514e-06 1.08996004e-09-7.93898637e-14  
 2  
 -1.44167384e2.94436050e 9.48802516e-01 3.78680272e-02-2.40894223e-05 3  
 7.77749601e-09-1.00821430e-12-1.09065845e 2.33277424e  
 4  
 CH2CH2CH2OH C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.10024651e 1.50905454e-02-5.07771786e-06 7.82747262e-10-4.56159151e-14  
 2  
 -1.15495011e2.90815232e 2.77594410e-01 3.89235914e-02-2.49385895e-05 3  
 8.13862564e-09-1.06726569e-12-7.68854770e 2.89637142e  
 4  
 CH3CH2CH2O C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.66433268e 2.45624525e-02-1.14187516e-05 2.58003280e-09-2.29895788e-13  
 2  
 -7.91390086e8.44862881e 1.62185706e 3.57679539e-02-2.07566695e-05 3  
 6.03852088e-09-7.10241355e-13-6.09860964e 1.88423012e  
 4  
 IC3H7OH C 3H 80 1 G 300.00 3500.00 1490.00  
 1  
 1.02736687e 1.89903342e-02-6.50928762e-06 9.85863990e-10-5.35101895e-14  
 2

-3.77812744e2.92304676e1.25951086e 4.99518902e-02-3.76786393e-05 3  
 1.49318826e-08-2.39344620e-12-3.43443869e 3.10096138e  
 4  
 CH2CHOHCH3 C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1380.00  
 1  
 6.32694430e 2.38762490e-02-1.07376178e-05 2.33737032e-09-2.01069469e-13  
 2  
 -1.14217376e3.95690498e 6.40756936e-01 4.03579515e-02-2.86525118e-05 3  
 1.09919085e-08-1.76892059e-12-9.85234986e 2.53070892e  
 4  
 CH3COHCH3 C 3H 70 1 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 6.71652579e 2.35306498e-02-1.06144747e-05 2.31761627e-09-1.99886320e-13  
 2  
 -1.44175086e7.90476331e 1.21649821e 4.08535713e-02-3.10746182e-05 3  
 1.30578491e-08-2.31410538e-12-1.30205016e 1.99442900e  
 4  
 C3H7CHO C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 -9.77279407e-01 5.24983746e-02-3.09762337e-05 8.32680249e-09-8.38156518e-  
 13 2  
 -2.70767712e 3.27194911e 3.71554479e 2.56822364e-02 2.64869197e-05 3  
 -4.64000103e-08 1.87071338e-11-2.77337665e 1.17531399e  
 4  
 RALD4X C 4H 70 1 G 300.00 3500.00 1140.00  
 1  
 -3.84911251e 5.11968669e-02-2.73583537e-05 6.64027831e-09-6.13455715e-13  
 2  
 -5.69209146e 4.92440537e 6.06312506e 1.64170860e-02 1.84045160e-05 3  
 -2.01216338e-08 5.25538465e-12-7.95208163e 1.24454033e-01  
 4  
 C3H5CHO C 4H 60 1 G 300.00 3500.00 1610.00  
 1  
 9.36564259e 1.99394689e-02-8.24714277e-06 1.63840913e-09-1.29181894e-13  
 2  
 -1.44293663e2.07054000e 2.40474771e-01 4.26106933e-02-2.93694015e-05 3  
 1.03846860e-08-1.48729943e-12-1.14910622e 2.76639767e  
 4  
 RNC3OHOOX C 3H 70 3 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.74667463e 1.57251521e-02-1.09732359e-05 3.61008695e-09-4.15087643e-13  
 2  
 -5.05275840e1.70384641e4.06427158e 1.08016303e-01-8.78825284e-05 3  
 3.20950101e-08-4.37132697e-12-3.55764175e 5.43898920e  
 4  
 QNC3OHOOX C 3H 70 3 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.65507236e 1.64042711e-02-1.14786982e-05 3.72939657e-09-4.24702220e-13  
 2  
 -4.45414828e1.61156347e1.59743882e 1.01177965e-01-8.21234434e-05 3  
 2.98941170e-08-4.05869117e-12-3.08081443e 4.53094659e  
 4  
 ZNC3OHOOX C 3H 70 5 G 300.00 3500.00 1140.00  
 1  
 2.54947978e 2.87030586e-02-3.65256136e-06-1.12208479e-09 2.39300453e-13  
 2  
 -5.46882917e8.79716227e1.83124940e 1.24583926e-01-1.29811597e-04 3



7.26551292e-08-1.59399131e-11-4.84579529e 4.74412435e  
 4  
 KEHYNC3OH C 3H 60 4 G 300.00 3500.00 990.00  
 1  
 2.03864541e 2.59482570e-02 2.17638828e-06-3.94711666e-09 6.27440484e-13  
 2  
 -7.09480080e6.09332091e1.73111577e 1.15312176e-01-1.33223488e-04 3  
 8.72312515e-08-2.23973999e-11-6.65687291e 4.55489913e  
 4  
 RBU100X C 4H 90 3 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 1.45390319e 2.69797332e-02-1.09312485e-05 2.12602294e-09-1.64284673e-13  
 2  
 -3.56893368e4.22613629e 3.26237571e 5.39896881e-02-3.51916871e-05 3  
 1.18108288e-08-1.61410590e-12-3.19229337e 1.79249204e  
 4  
 QBU100X C 4H 90 3 G 300.00 3500.00 1270.00  
 1  
 9.44680464e 1.40890825e-02-6.70668583e-06 1.51288685e-09-1.32818575e-13  
 2  
 1.91332917e2.81812928e5.88861872e 6.23896285e-02-6.37545748e-05 3  
 3.14592853e-08-6.02777890e-12 2.30284892e 4.94686856e  
 4  
 ZBU100X C 4H 90 5 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.71509971e 3.21642995e-02-1.45265250e-05 3.16055984e-09-2.71089893e-13  
 2  
 -4.87167967e4.94521678e 4.90929016e 6.68925461e-02-5.14714682e-05 3  
 2.06286181e-08-3.36826334e-12-4.52646353e 1.38131161e  
 4  
 KEHYBU1 C 4H 80 4 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 1.50812003e 2.99746636e-02-1.37944087e-05 3.03171374e-09-2.60935207e-13  
 2  
 -6.34178095e4.27051070e4.53521778e 9.53627237e-02-9.55294839e-05 3  
 4.84400889e-08-9.72101336e-12-5.87098692e 5.55092666e  
 4  
 RPENT100X C 5H 110 3 G 300.00 3500.00 1690.00  
 1  
 2.06735965e 3.07535003e-02-1.19967966e-05 2.22747934e-09-1.63728823e-13  
 2  
 -5.79272409e7.43003206e 2.17872347e 7.45283477e-02-5.08502115e-05 3  
 1.75542702e-08-2.43100558e-12-5.16759738e 2.46315384e  
 4  
 QPENT100X C 5H 110 3 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 1.99691781e 3.07316205e-02-1.29590658e-05 2.61520663e-09-2.08804310e-13  
 2  
 -3.62027680e6.96874635e 1.91284982e 7.61563458e-02-5.58125803e-05 3  
 2.05831372e-08-3.03395063e-12-3.04608556e 2.57972168e  
 4  
 ZPENT100X C 5H 110 5 G 300.00 3500.00 1380.00  
 1  
 2.07046201e 3.73731215e-02-1.71331760e-05 3.77821832e-09-3.27723702e-13  
 2  
 -5.43479695e6.52594396e 3.53770719e 8.71322894e-02-7.12192280e-05 3  
 2.99067459e-08-5.06115261e-12-4.96099015e 2.30901712e  
 4

KEHYP1OH C 5H 100 4 G 300.00 3500.00 1560.00  
 1  
 1.98034553e 3.06181827e-02-1.26872575e-05 2.52829428e-09-2.00061891e-13  
 2  
 -6.77003656e6.61563411e 2.43438019e 7.51542727e-02-5.55104210e-05 3  
 2.08287915e-08-3.13283388e-12-6.22812142e 2.53631875e  
 4  
 RC6OHOOX C 6H 130 3 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.74667463e 1.57251521e-02-1.09732359e-05 3.61008695e-09-4.15087643e-13  
 2  
 -5.05275840e1.70384641e4.06427158e 1.08016303e-01-8.78825284e-05 3  
 3.20950101e-08-4.37132697e-12-3.55764175e 5.43898920e  
 4  
 QC6OHOOX C 6H 130 3 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.65507236e 1.64042711e-02-1.14786982e-05 3.72939657e-09-4.24702220e-13  
 2  
 -4.45414828e1.61156347e1.59743882e 1.01177965e-01-8.21234434e-05 3  
 2.98941170e-08-4.05869117e-12-3.08081443e 4.53094659e  
 4  
 ZC6OHOOX C 6H 130 5 G 300.00 3500.00 1140.00  
 1  
 2.54947978e 2.87030586e-02-3.65256136e-06-1.12208479e-09 2.39300453e-13  
 2  
 -5.46882917e8.79716227e1.83124940e 1.24583926e-01-1.29811597e-04 3  
 7.26551292e-08-1.59399131e-11-4.84579529e 4.74412435e  
 4  
 KEHYC6OH C 6H 120 4 G 300.00 3500.00 990.00  
 1  
 2.03864541e 2.59482570e-02 2.17638828e-06-3.94711666e-09 6.27440484e-13  
 2  
 -7.09480080e6.09332091e1.73111577e 1.15312176e-01-1.33223488e-04 3  
 8.72312515e-08-2.23974000e-11-6.65687291e 4.55489913e  
 4  
 RALD300 C 3H 50 3 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.58771657e 1.28699615e-02-5.29703385e-06 1.04001953e-09-8.12487153e-14  
 2  
 -2.38887629e5.44666587e 3.38301196e 4.06347476e-02-2.84343556e-05 3  
 9.60939795e-09-1.27144016e-12-1.93908676e 1.31543077e  
 4  
 QALD300 C 3H 50 3 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.09154411e 2.11069264e-02-1.04347901e-05 2.43633158e-09-2.20224945e-13  
 2  
 -1.35446352e2.42468451e 1.81101363e 4.91205495e-02-4.27582013e-05 3  
 1.90124399e-08-3.40793808e-12-1.11774841e 2.20654311e  
 4  
 ZALD300 C 3H 50 5 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.14549191e 1.08256409e-02-3.75393278e-06 5.88014012e-10-3.47282965e-14  
 2  
 -3.59900210e7.93559882e 5.41191662e 4.64767576e-02-3.34631967e-05 3  
 1.15914451e-08-1.56298261e-12-3.02145401e 7.47208817e  
 4  
 ETC3H4O2 C 3H 40 2 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1

1.02920429e 1.38871300e-02-6.12561993e-06 1.30548845e-09-1.09965765e-13  
2  
-3.57026988e2.69350036e 1.17378044e-01 4.67086294e-02-4.58290467e-05 3  
2.26514168e-08-4.41358036e-12-3.31793820e 2.43405589e  
4  
KEA3B3L C 3H 40 4 G 300.00 3500.00 1500.00  
1  
1.56495498e 1.47904716e-02-6.84032431e-06 1.49167146e-09-1.26830372e-13  
2  
-4.74213138e4.92482738e 1.41905666e 5.27384532e-02-4.47883060e-05 3  
1.83574411e-08-2.93779198e-12-4.31521659e 2.51755980e  
4  
RALD4OOX C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1060.00  
1  
1.47280765e 1.68541717e-02-7.08657063e-07-1.32138238e-09 2.25378321e-13  
2  
-2.49490049e4.17540781e2.51677559e 8.19290853e-02-9.27957989e-05 3  
5.65950590e-08-1.34341597e-11-2.12930963e 4.24472035e  
4  
QA4X C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1020.00  
1  
1.57879646e 1.38870673e-02 1.11593612e-06-1.77746725e-09 2.67503333e-13  
2  
-1.92489295e4.33532546e6.30635463e-01 7.82737344e-02-9.35703389e-05 3  
6.01089870e-08-1.49007453e-11-1.58995350e 3.61821314e  
4  
ZA4X C 4H 70 5 G 300.00 3500.00 1030.00  
1  
2.21686912e 9.17757313e-03 7.13282539e-06-4.12053825e-09 5.56292343e-13  
2  
-3.97162883e7.35383816e2.33834122e 1.04350515e-01-1.31468546e-04 3  
8.55890871e-08-2.12178886e-11-3.46678396e 4.54182820e  
4  
KEA4X C 4H 60 4 G 300.00 3500.00 980.00  
1  
1.51486382e 1.43075627e-02 4.47525531e-07-1.46947397e-09 2.26509070e-13  
2  
-1.74087245e3.88103573e 7.77078059e-01 7.29669918e-02-8.93373148e-05 3  
5.96086487e-08-1.53546447e-11-1.45918987e 3.02337683e  
4  
ETALD4X C 4H 60 2 G 300.00 3500.00 1200.00  
1  
9.47104167e 1.56985814e-02-7.47624893e-06 1.72107281e-09-1.55288692e-13  
2  
-3.54471815e2.25395261e 7.88830836e-02 4.70057767e-02-4.66102431e-05 3  
2.34621807e-08-4.68468616e-12-3.31930634e 2.44846029e  
4  
CH3COCHO C 3H 40 2 G 300.00 3500.00 1370.00  
1  
1.06304440e 1.18394227e-02-4.21486308e-06 6.67473434e-10-3.88516159e-14  
2  
-4.37970340e2.83088260e8.46550190e-01 4.53488948e-02-4.09040660e-05 3  
1.85211002e-08-3.29681270e-12-4.06523375e 3.06741176e  
4  
RALD5XOO C 5H 90 3 G 300.00 3500.00 1240.00  
1  
5.00092606e5.34134337e-02 6.46290203e-05-2.28767022e-08 2.64030383e-12  
2

-4.06673538e2.20829583e1.12640294e 1.44242340e-01-1.74470706e-04 3  
 1.05671538e-07-2.32766801e-11-2.54715779e 8.79592039e  
 4  
 QA5X C 5H 90 3 G 300.00 3500.00 1020.00  
 1  
 3.16179276e1.36493914e-02 3.39152688e-05-1.31900642e-08 1.56959131e-12  
 2  
 -3.26152700e1.14322464e3.56697746e 1.24330628e-01-1.68996525e-04 3  
 1.19432023e-07-3.09358223e-11-2.54375494e 5.61211171e  
 4  
 ZA5X C 5H 90 5 G 300.00 3500.00 1030.00  
 1  
 4.82844918e4.15707481e-02 6.14657182e-05-2.30375148e-08 2.73823910e-12  
 2  
 -5.69207575e1.98450742e1.56034005e 2.06537571e-01-2.99857077e-04 3  
 2.10828372e-07-5.40253257e-11-4.37598517e 1.11659857e  
 4  
 KEA5X C 5H 80 4 G 300.00 3500.00 890.00  
 1  
 2.81159854e1.51101029e-02 3.53666256e-05-1.35086149e-08 1.59169633e-12  
 2  
 3.74972700e9.42664385e 2.11579327e-01 1.10302958e-01-1.76003702e-04 3  
 1.44821219e-07-4.28829760e-11 4.24642543e 3.71043837e  
 4  
 RALD6XOO C 6H 110 3 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 5.00092606e5.34134337e-02 6.46290203e-05-2.28767022e-08 2.64030383e-12  
 2  
 -4.06673538e2.20829583e1.12640294e 1.44242340e-01-1.74470706e-04 3  
 1.05671538e-07-2.32766801e-11-2.54715779e 8.79592039e  
 4  
 QA6X C 6H 110 3 G 300.00 3500.00 1020.00  
 1  
 3.16179276e1.36493914e-02 3.39152688e-05-1.31900642e-08 1.56959131e-12  
 2  
 -3.26152700e1.14322464e3.56697746e 1.24330628e-01-1.68996525e-04 3  
 1.19432023e-07-3.09358223e-11-2.54375494e 5.61211171e  
 4  
 ZA6X C 6H 110 5 G 300.00 3500.00 1030.00  
 1  
 4.82844918e4.15707481e-02 6.14657182e-05-2.30375148e-08 2.73823910e-12  
 2  
 -5.69207575e1.98450742e1.56034005e 2.06537571e-01-2.99857077e-04 3  
 2.10828372e-07-5.40253257e-11-4.37598517e 1.11659857e  
 4  
 KEA6X C 6H 100 4 G 300.00 3500.00 890.00  
 1  
 2.81159854e1.51101029e-02 3.53666256e-05-1.35086149e-08 1.59169633e-12  
 2  
 3.74972700e9.42664385e 2.11579328e-01 1.10302958e-01-1.76003702e-04 3  
 1.44821219e-07-4.28829760e-11 4.24642543e 3.71043837e  
 4  
 ETALD6X C 6H 100 2 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 9.47104167e 1.56985814e-02-7.47624893e-06 1.72107281e-09-1.55288692e-13  
 2  
 -3.54471815e2.25395261e 7.88830836e-02 4.70057767e-02-4.66102431e-05 3

2.34621807e-08-4.68468616e-12-3.31930634e 2.44846029e  
 4  
 RIBALDGOO C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1090.00  
 1  
 1.33433414e 1.84987671e-02-1.85145304e-06-9.50437233e-10 1.82631153e-13  
 2  
 -2.33799980e3.43356040e3.50808855e 8.03388770e-02-8.69525216e-05 3  
 5.10991460e-08-1.17553467e-11-1.97063863e 4.84150219e  
 4  
 RIBALDBOO C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1060.00  
 1  
 1.47280765e 1.68541717e-02-7.08657063e-07-1.32138238e-09 2.25378321e-13  
 2  
 -2.49490049e4.17540781e2.51677559e 8.19290853e-02-9.27957989e-05 3  
 5.65950590e-08-1.34341597e-11-2.12930963e 4.24472035e  
 4  
 QIBALDG2 C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 980.00  
 1  
 1.67965085e 1.08043172e-02 4.76341977e-06-3.20053120e-09 4.44231065e-13  
 2  
 -2.25755348e5.02646403e3.01325724e-01 8.05913956e-02-1.02053537e-04 3  
 6.94640652e-08-1.80926558e-11-1.92243593e 3.18771037e  
 4  
 QIBALDG3 C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1050.00  
 1  
 1.47854637e 1.55385624e-02-2.73488731e-07-1.29944016e-09 2.11492594e-13  
 2  
 -1.68282754e3.82904661e2.35309180e 8.08282978e-02-9.35445393e-05 3  
 5.79202745e-08-1.38884395e-11-1.32291787e 4.52293503e  
 4  
 QIBALDB3 C 4H 70 3 G 300.00 3500.00 1020.00  
 1  
 1.57879646e 1.38870673e-02 1.11593612e-06-1.77746725e-09 2.67503333e-13  
 2  
 -1.92489295e4.33532546e6.30635463e-01 7.82737344e-02-9.35703389e-05 3  
 6.01089870e-08-1.49007453e-11-1.58995350e 3.61821314e  
 4  
 ETIBALDGB C 4H 60 2 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 9.47104167e 1.56985814e-02-7.47624893e-06 1.72107281e-09-1.55288692e-13  
 2  
 -3.54471815e2.25395261e 7.88830836e-02 4.70057767e-02-4.66102431e-05 3  
 2.34621807e-08-4.68468616e-12-3.31930634e 2.44846029e  
 4  
 ETIBALDGG C 4H 60 2 G 300.00 3500.00 1200.00  
 1  
 9.47104167e 1.56985814e-02-7.47624893e-06 1.72107281e-09-1.55288692e-13  
 2  
 -3.54471815e2.25395261e 7.88830836e-02 4.70057767e-02-4.66102431e-05 3  
 2.34621807e-08-4.68468616e-12-3.31930634e 2.44846029e  
 4  
 ZIBALDG2 C 4H 70 5 G 300.00 3500.00 1030.00  
 1  
 2.21686912e 9.17757313e-03 7.13282539e-06-4.12053825e-09 5.56292343e-13  
 2  
 -3.97162883e7.35383816e2.33834122e 1.04350515e-01-1.31468546e-04 3  
 8.55890871e-08-2.12178886e-11-3.46678396e 4.54182820e  
 4

ZIBALDG3 C 4H 70 5 G 300.00 3500.00 1080.00  
1  
1.90668858e 1.53920232e-02 1.15889664e-06-1.93815091e-09 2.92451852e-13  
2  
-3.52242064e5.68408680e2.45362850e 9.50976318e-02-1.09543338e-04 3  
6.63965616e-08-1.55257686e-11-3.05757753e 4.86394149e  
4

ZIBALDB3 C 4H 70 5 G 300.00 3500.00 1080.00  
1  
1.90668858e 1.53920232e-02 1.15889664e-06-1.93815091e-09 2.92451852e-13  
2  
-3.52242064e5.68408680e2.45362850e 9.50976318e-02-1.09543338e-04 3  
6.63965616e-08-1.55257686e-11-3.05757753e 4.86394149e  
4

KIA4G2 C 4H 60 4 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
2.35089845e 2.55786721e-03-1.96914845e-06 1.09436465e-09-1.65129977e-13  
2  
-5.44782542e9.88855068e1.84484588e 5.88997125e-02-4.89206862e-05 3  
1.84838231e-08-2.58033254e-12-4.53508752e 3.83347123e  
4

IC3H5CHO C 4H 60 1 G 300.00 3500.00 1370.00  
1  
8.96605760e 2.20962385e-02-1.00901145e-05 2.22139279e-09-1.91792264e-13  
2  
-1.79920102e2.11939239e 6.92941976e-01 4.62513206e-02-3.65372847e-05 3  
1.50910620e-08-2.54027204e-12-1.57251765e 2.13235423e  
4

NC4H7OH C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 1460.00  
1  
1.00981665e 2.15734935e-02-6.74008417e-06 9.16825968e-10-4.16200157e-14  
2  
-2.37290909e2.45741592e2.55531338e-01 4.99397889e-02-3.58835384e-05 3  
1.42243393e-08-2.32030381e-12-2.07058111e 2.92946644e  
4

IC4H7OH C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 1460.00  
1  
1.00981665e 2.15734935e-02-6.74008417e-06 9.16825968e-10-4.16200157e-14  
2  
-2.37290909e2.45741592e2.55531338e-01 4.99397889e-02-3.58835384e-05 3  
1.42243393e-08-2.32030381e-12-2.07058111e 2.92946644e  
4

IC3H7CHO C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
1  
1.25375038e 2.06759832e-02-7.90606663e-06 1.44761601e-09-1.05776578e-13  
2  
-3.22363635e4.10505202e3.44732114e-01 4.93031741e-02-3.17620591e-05 3  
1.02831688e-08-1.33293668e-12-2.75987585e 2.86708279e  
4

RIBALDB C 4H 70 1 G 300.00 3500.00 1090.00  
1  
7.80130143e 2.08311674e-02-4.31906593e-06-1.13870083e-10 8.81387266e-14  
2  
-1.58031223e1.28298252e1.99174484e 5.67689519e-02-5.37747327e-05 3  
3.01342441e-08-6.84950215e-12 5.54571859e 3.52599043e  
4

RIBALDG C 4H 70 1 G 300.00 3500.00 1050.00  
1

9.00440173e 1.88029635e-02-3.43463806e-06-2.58096325e-10 9.53220855e-14  
 2  
 -4.96767967e1.61872934e3.42297331e 6.61453446e-02-7.10666111e-05 3  
 4.26828389e-08-1.01287101e-11-2.35793091e 4.43739411e  
 4  
 N1C4H9OH C 4H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.48230798e 2.16832754e-02-7.46704085e-06 1.19388940e-09-7.36745676e-14  
 2  
 -4.08306213e5.15940698e4.78997489e-01 5.56878916e-02-3.58042210e-05 3  
 1.16891413e-08-1.53134844e-12-3.53218735e 3.12239645e  
 4  
 CH3CH2CHCH2OH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.13530982e 2.45578872e-02-9.82948618e-06 1.91527532e-09-1.49940483e-13  
 2  
 -1.52382167e2.90980437e 1.95582522e 4.54407161e-02-2.72318436e-05 3  
 8.36059288e-09-1.04512348e-12-1.18551985e 2.17619582e  
 4  
 CH2CH2CH2CH2OH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1790.00  
 1  
 1.44669850e 1.91857603e-02-6.39892959e-06 9.65852776e-10-5.40086293e-14  
 2  
 -1.57844512e4.62017057e 4.01250150e-02 5.14245536e-02-3.34146782e-05 3  
 1.10275841e-08-1.45927837e-12-1.06196353e 3.17990977e  
 4  
 CH3CH2CH2CH2O C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 9.76394270e 2.97115921e-02-1.36105451e-05 3.01462692e-09-2.63554924e-13  
 2  
 -1.20864790e2.37714276e 1.13482603e 4.88874069e-02-2.95903908e-05 3  
 8.93308828e-09-1.08556345e-12-8.97999699e 2.29311520e  
 4  
 CH3CH2CH2CHOH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.45806677e 1.95400847e-02-6.85981976e-06 1.13500508e-09-7.38190524e-14  
 2  
 -1.88304378e4.88995705e 7.07705507e-01 5.03688897e-02-3.25504906e-05 3  
 1.06500683e-08-1.39535562e-12-1.38361714e 2.61837951e  
 4  
 CH3CHCH2CH2OH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.10474004e 2.49495870e-02-1.02454957e-05 2.07975625e-09-1.70767943e-13  
 2  
 -1.60937900e2.75546799e8.85955889e-02 4.96962447e-02-3.08677104e-05 3  
 9.71761356e-09-1.23158146e-12-1.20848314e 3.27156533e  
 4  
 N2C4H9OH C 4H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.39850075e 2.35768220e-02-8.73106105e-06 1.51546162e-09-1.02847459e-13  
 2  
 -4.24053999e4.83702850e 1.11912947e-01 5.44059211e-02-3.44219770e-05 3  
 1.10306157e-08-1.42439663e-12-3.74110858e 2.67137971e  
 4  
 CH2CH2CHOHCH3 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.39333095e 2.07599768e-02-7.56097164e-06 1.27900113e-09-8.37238499e-14  
 2

-1.74897435e4.46134901e 9.11733055e-01 4.96968134e-02-3.16750021e-05 3  
 1.02101235e-08-1.32415752e-12-1.28019760e 2.58619981e  
 4  
 CH3CH2CHOHCH2 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.39333095e 2.07599768e-02-7.56097164e-06 1.27900113e-09-8.37238499e-14  
 2  
 -1.74897435e4.46134901e 9.11733055e-01 4.96968134e-02-3.16750021e-05 3  
 1.02101235e-08-1.32415752e-12-1.28019760e 2.58619981e  
 4  
 CH3CHCHOHCH3 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.11524016e 2.52912378e-02-1.05179486e-05 2.12392651e-09-1.71553011e-13  
 2  
 -1.78095410e2.94209720e 6.76902372e-01 4.85701251e-02-2.99170213e-05 3  
 9.30876824e-09-1.16944770e-12-1.40383613e 2.72746153e  
 4  
 CH3CH2COHCH3 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 8.72382272e 3.04342830e-02-1.39185549e-05 3.06043861e-09-2.64689230e-13  
 2  
 -1.80661273e1.71435098e 1.27395834e 5.12730645e-02-3.57774166e-05 3  
 1.32510501e-08-2.04626467e-12-1.59354661e 2.14624055e  
 4  
 TC4H9OH C 4H 100 1 G 300.00 3500.00 1440.00  
 1  
 9.08150387e 3.22201837e-02-1.41979352e-05 3.03249263e-09-2.56658356e-13  
 2  
 -4.23917231e2.36263218e6.99999563e-01 5.93910266e-02-4.25008966e-05 3  
 1.61357155e-08-2.53152343e-12-3.95746501e 2.71305359e  
 4  
 RTC4H8OH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1380.00  
 1  
 8.66823484e 3.01271731e-02-1.35256253e-05 2.94117291e-09-2.52822189e-13  
 2  
 -1.73478965e1.68023720e 1.39901310e-03 5.52484364e-02-4.08313463e-05 3  
 1.61323424e-08-2.64252681e-12-1.49558499e 2.78015457e  
 4  
 IC4H9OH C 4H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.44537517e 2.20810695e-02-7.57959310e-06 1.19533670e-09-7.16167606e-14  
 2  
 -4.15822810e5.13315495e5.45479447e-01 5.54126942e-02-3.53559470e-05 3  
 1.14828752e-08-1.50044155e-12-3.61825578e 2.98474183e  
 4  
 CH3CHCH3CHOH C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1450.00  
 1  
 8.91411879e 2.94184843e-02-1.30488503e-05 2.81020956e-09-2.39749810e-13  
 2  
 -1.71145335e1.85255698e 6.16106328e-01 5.23095531e-02-3.67292664e-05 3  
 1.36977572e-08-2.11691319e-12-1.47081099e 2.45907827e  
 4  
 CH3CC2OHCH3 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 700.00  
 1  
 2.02076660e 4.09903684e-02-2.06486867e-05 5.00507650e-09-4.71523454e-13  
 2  
 -1.40718373e 2.15880988e 3.53447956e 3.23405800e-02-2.11342588e-06 3



-1.26475529e-08 5.83298703e-12-1.42837571e 1.48252122e  
 4  
 CH2CHCH2OHCH3 C 4H 90 1 G 300.00 3500.00 1780.00  
 1  
 1.38129919e 2.02819032e-02-7.03372780e-06 1.12439860e-09-6.86002895e-14  
 2  
 -1.64045579e4.42517079e 2.32452600e-01 5.07999690e-02-3.27511989e-05 3  
 1.07564103e-08-1.42141092e-12-1.15698860e 2.90972641e  
 4  
 MEK C 4H 80 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.00996674e 2.22850926e-02-8.24112797e-06 1.42760366e-09-9.77654879e-14  
 2  
 -3.40270944e2.55002808e 1.67138626e 4.10146063e-02-2.38490560e-05 3  
 7.20831776e-09-9.00642447e-13-3.09929132e 2.01153350e  
 4  
 IC5H11OH C 5H 120 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.75261800e 2.67328515e-02-9.21962742e-06 1.46158882e-09-8.81568439e-14  
 2  
 -4.58408793e6.62686894e6.91392019e-01 6.72163448e-02-4.29558718e-05 3  
 1.39564942e-08-1.82356036e-12-3.92825534e 3.23286106e  
 4  
 RIPENTOHD C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1790.00  
 1  
 1.70732241e 2.46107106e-02-8.47238619e-06 1.33638999e-09-7.97932461e-14  
 2  
 -2.07483024e6.09454399e 1.00429939e-01 6.25387423e-02-4.02556530e-05 3  
 1.31737333e-08-1.73305348e-12-1.46720421e 3.08203067e  
 4  
 RIPENTOHA C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1620.00  
 1  
 1.36179105e 3.09491059e-02-1.25439310e-05 2.45214936e-09-1.90908871e-13  
 2  
 -2.20274849e4.25086987e 6.58084780e-01 6.29486755e-02-4.21731621e-05 3  
 1.46452486e-08-2.07255998e-12-1.78285014e 2.62671274e  
 4  
 RIPENTOHC C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.92685233e 4.18643318e-02-1.95034088e-05 4.40403233e-09-3.91439493e-13  
 2  
 -1.90194846e3.36644885e 1.92978878e 5.29689175e-02-2.87572302e-05 3  
 7.83137359e-09-8.67459112e-13-1.72205417e 2.36787015e  
 4  
 RIPENTO C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.69165783e 2.61557300e-02-9.69137350e-06 1.69534371e-09-1.16943806e-13  
 2  
 -1.93832032e6.31369976e6.20522521e-01 6.51270652e-02-4.21674862e-05 3  
 1.37235336e-08-1.78752573e-12-1.30698469e 3.17774506e  
 4  
 RIPENTOHB C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.43827445e 2.99341363e-02-1.24371812e-05 2.55513031e-09-2.11814101e-13  
 2  
 -2.12442482e4.60019499e6.44588846e-01 6.33282104e-02-4.02655763e-05 3  
 1.28619433e-08-1.64331591e-12-1.58344082e 3.53291130e  
 4

C5H9OH                                    C    5H   100   1        G    300.00   3500.00 1340.00  
 1  
   1.16548800e 2.84084456e-02-9.34259885e-06 1.38886995e-09-7.52324992e-14  
 2  
 -2.70860494e3.10347061e2.19050000e 6.97379382e-02-5.56069562e-05        3  
   2.44059632e-08-4.36946631e-12-2.33754875e 3.98133712e  
 4  
 C4H9CHO                                   C    5H   100   1        G    300.00   3500.00 760.00  
 1  
 -1.78433184e 6.31204388e-02-3.60836199e-05 9.48321924e-09-9.39522549e-13  
 2  
 -2.97113508e 3.92478714e 5.53299033e 2.46082168e-02 3.99273445e-05        3  
 -5.71930654e-08 2.09934658e-11-3.08235838e 5.95416457e  
 4  
 IC5H9OH                                   C    5H   100   1        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1  
   1.44737600e 2.24842469e-02-7.84070236e-06 1.25550752e-09-7.64728175e-14  
 2  
 -4.15571804e5.13573408e4.94150771e-01 5.57462708e-02-3.55590556e-05        3  
   1.15215643e-08-1.50231404e-12-3.61687325e 2.96521147e  
 4  
 IC4H9CHO                                   C    5H   100   1        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1  
   1.47934378e 2.65660103e-02-1.04284281e-05 1.98344196e-09-1.51387846e-13  
 2  
 -3.60342983e5.12505581e 7.73443177e-01 5.77215539e-02-3.63913811e-05        3  
   1.15993505e-08-1.48693069e-12-3.09871002e 2.46285774e  
 4  
 RALD5X                                    C    5H   90    1        G    300.00   3500.00 750.00  
 1  
 -3.04813122e-01 5.67977503e-02-3.24057644e-05 8.50471990e-09-8.41763295e-  
 13        2  
 -5.21420509e 3.41933262e 6.22525357e 2.19707280e-02 3.72482804e-05        3  
 -5.34099865e-08 1.97964722e-11-6.19371509e 4.56811230e  
 4  
 ALDC6                                     C    6H   120   1        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1  
   1.43376050e 3.78182965e-02-1.64821906e-05 3.50929997e-09-2.98005833e-13  
 2  
 -3.75955824e4.53859600e 1.31726275e 6.67523904e-02-4.05939354e-05        3  
   1.24395759e-08-1.53832193e-12-3.29082592e 2.50828483e  
 4  
 RALD6X                                    C    6H   110   1        G    300.00   3500.00 1160.00  
 1  
   5.47459470e-01 6.16901246e-02-2.98352974e-05 6.64392083e-09-5.73135815e-  
 13        2  
 -1.27523068e 2.98980226e 4.05975345e 4.95787661e-02-1.41740579e-05        3  
 -2.35679152e-09 1.36667288e-12-1.35671590e 1.24319397e  
 4  
 C5H11OH                                   C    5H   120   1        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1  
   1.84921366e 2.54355952e-02-8.57802272e-06 1.32118635e-09-7.66433346e-14  
 2  
 -4.51605186e6.98750288e6.77485013e-01 6.80347542e-02-4.40773219e-05        3  
   1.44690750e-08-1.90273897e-12-3.82594548e 3.38749622e  
 4  
 RPENT1OHA                                C    5H   110   1        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1

1.84065773e 2.29900185e-02-7.76357329e-06 1.20244128e-09-7.05741185e-14  
 2  
 -2.32226149e6.80495353e 4.75636951e-01 6.28365526e-02-4.09690184e-05 3  
 1.35007543e-08-1.77867315e-12-1.67674764e 2.89964546e  
 4  
 RPENT1OHB C 5H 110 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.50707231e 2.82315427e-02-1.08918053e-05 2.02927093e-09-1.51568857e-13  
 2  
 -1.95906718e4.76575366e 1.72826109e 5.78814583e-02-3.56000684e-05 3  
 1.11804795e-08-1.42257004e-12-1.47873854e 2.45546514e  
 4  
 ESAN1OH C 6H 140 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.78613474e 1.77437818e-02-2.99502852e-06 1.18974668e-11 2.84572872e-14  
 2  
 -5.19282550e1.19896980e1.83303781e 8.37313045e-02-5.79846308e-05 3  
 2.03784168e-08-2.80022596e-12-4.12382763e 4.08152273e  
 4  
 RESAN1OHA C 6H 130 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.84298178e 1.33218304e-02-9.68178066e-07-3.32583082e-10 4.90833295e-14  
 2  
 -3.02913834e1.20327849e1.87679570e-01 7.69162690e-02-5.39635435e-05 3  
 1.92953301e-08-2.67701572e-12-1.99890844e 3.45560167e  
 4  
 RESAN1OHB C 6H 130 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.97416428e 1.08284395e-02 6.26458140e-07-7.76125692e-10 9.43842404e-14  
 2  
 -2.87904782e1.27477419e8.09485399e-02 7.71008646e-02-5.46005628e-05 3  
 1.96783265e-08-2.74651190e-12-1.80543453e 3.39286664e  
 4  
 NC5H12 C 5H 12 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.12559082e 1.49866375e-02-1.56738310e-06-4.84518439e-10 9.00436513e-14  
 2  
 -2.80668702e9.05497671e1.97000865e 6.65997861e-02-4.45783403e-05 3  
 1.54454657e-08-2.12245414e-12-1.97055401e 3.51537401e  
 4  
 NC5H11 C 5H 11 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 6.93193785e 3.75440987e-02-1.65478566e-05 3.53633643e-09-2.99976701e-13  
 2  
 -1.73087074e8.88710671e3.57520449e 6.08933039e-02-3.60055276e-05 3  
 1.07428812e-08-1.30088570e-12 2.05170050e 4.79797395e  
 4  
 NEOC5H12 C 5H 12 G 300.00 3500.00 1700.00  
 1  
 1.58220811e 2.73824077e-02-1.01392581e-05 1.77707009e-09-1.22756971e-13  
 2  
 -2.85197010e6.62488521e2.62463459e 7.07864445e-02-4.84369376e-05 3  
 1.67957680e-08-2.33138901e-12-2.22478177e 3.25342362e  
 4  
 NEOC5H11 C 5H 11 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 1.43276289e 2.66845577e-02-1.02158264e-05 1.86929104e-09-1.35803312e-13  
 2

-2.94216421e5.15145769e1.29689709e 6.41085720e-02-4.38302105e-05 3  
 1.52882069e-08-2.14462305e-12 2.27642747e 3.18773552e  
 4  
 NC5H10 C 5H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.11929736e 2.82582223e-02-1.13863841e-05 2.22526491e-09-1.74280993e-13  
 2  
 -1.02483443e3.39253533e6.89551965e-01 5.46638348e-02-3.33910611e-05 3  
 1.03751453e-08-1.30620882e-12-5.97063504e 3.03853541e  
 4  
 NC5H9-3 C 5H 9 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 9.88287390e 2.86275350e-02-1.23662428e-05 2.58308509e-09-2.14520963e-13  
 2  
 7.14211639e2.81379758e9.61360662e-01 5.27258341e-02-3.24481586e-05 3  
 1.00208317e-08-1.24754133e-12 1.10460408e 3.05532839e  
 4  
 B1M2 C 5H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.21299340e 2.65376145e-02-1.02995525e-05 1.93064538e-09-1.45051208e-13  
 2  
 -1.11266091e3.96207198e6.39002025e-01 5.49130280e-02-3.39457304e-05 3  
 1.06884890e-08-1.36141838e-12-6.52979211e 2.94874259e  
 4  
 B1M3 C 5H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.31681365e 2.49963287e-02-9.30063098e-06 1.64277853e-09-1.14892348e-13  
 2  
 -1.09953810e4.60629131e8.44094903e-01 5.61346208e-02-3.52492077e-05 3  
 1.12533625e-08-1.44969568e-12-5.95097767e 2.97742066e  
 4  
 B2M2 C 5H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 9.73411699e 3.08235227e-02-1.30972997e-05 2.71635425e-09-2.25270435e-13  
 2  
 -1.14704814e2.74877025e 1.14407401e-01 5.22006552e-02-3.09115767e-05 3  
 9.31423462e-09-1.14164271e-12-8.00738598e 2.45761726e  
 4  
 CYC5H8 C 5H 8 G 300.00 3500.00 1460.00  
 1  
 8.43099916e 2.71082714e-02-1.07932861e-05 1.95387665e-09-1.31111174e-13  
 2  
 -1.09862538e2.37608448e6.56863981e 6.82031726e-02-5.30140751e-05 3  
 2.12327757e-08-3.43229252e-12 3.28126920e 5.42801525e  
 4  
 C5H7 C 5H 7 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 7.72404526e 2.56072196e-02-8.76350315e-06 8.66193956e-10 3.30416653e-14  
 2  
 2.30808142e1.69352935e 2.31765046e-01 4.65646468e-02-3.07468184e-05 3  
 1.11148258e-08-1.75867718e-12 2.52236063e 2.18904247e  
 4  
 LC5H8 C 5H 8 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 8.95829160e 2.51033002e-02-8.43679233e-06 8.19905618e-10 3.11426514e-14  
 2  
 4.67953300e2.40439629e 1.19183501e 4.68276543e-02-3.12245763e-05 3

1.14435811e-08-1.82614328e-12 6.90073958e 1.62025638e  
 4  
 DIALLYL C 6H 10 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 1.46885479e 2.58341295e-02-9.34005191e-06 1.60362032e-09-1.08722036e-13  
 2  
 2.72208305e5.11904321e8.93391062e-01 6.31561390e-02-4.28628150e-05 3  
 1.49859609e-08-2.11206643e-12 7.92645066e 3.19742028e  
 4  
 RC6H9A C 6H 9 G 300.00 3500.00 1310.00  
 1  
 1.02179198e 3.31131696e-02-1.50182300e-05 3.28859653e-09-2.83959224e-13  
 2  
 2.30740211e2.53806643e2.61882183e 7.23093274e-02-5.98993266e-05 3  
 2.61288493e-08-4.64278609e-12 2.64372474e 4.00154625e  
 4  
 CYC6H8 C 6H 8 G 300.00 3500.00 1490.00  
 1  
 8.66772261e 3.45074855e-02-1.63846780e-05 3.69260974e-09-3.24421025e-13  
 2  
 5.74022138e2.73566208e6.91358136e 7.63364895e-02-5.84944135e-05 3  
 2.25336547e-08-3.48567018e-12 1.03834500e 5.40276160e  
 4  
 CYC6H10 C 6H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.51624858e 2.76360017e-02-1.05259858e-05 1.89586361e-09-1.35054774e-13  
 2  
 -9.29985244e6.25064559e6.01517655e 7.46974737e-02-4.97438791e-05 3  
 1.64210093e-08-2.15243611e-12-1.67589399e 5.21114707e  
 4  
 RCYC6H9 C 6H 9 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.41670463e 2.75651338e-02-1.13337615e-05 2.23021652e-09-1.74683445e-13  
 2  
 7.93866332e5.85441979e6.48639356e 7.34616669e-02-4.95808724e-05 3  
 1.63958131e-08-2.14212742e-12 1.53739017e 5.32365273e  
 4  
 CYC6H12 C 6H 12 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.12578097e 4.34354098e-02-2.02455774e-05 4.54245292e-09-4.01195170e-13  
 2  
 -2.30439963e4.47863376e9.43363126e 8.94163897e-02-5.85630607e-05 3  
 1.87341134e-08-2.37225913e-12-1.55950776e 6.72000574e  
 4  
 CYC6H11 C 6H 11 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.12879191e 3.94798364e-02-1.80474738e-05 3.97976998e-09-3.47933572e-13  
 2  
 4.69934404e4.15743644e9.20200373e 8.50129981e-02-5.59917752e-05 3  
 1.80332150e-08-2.29980093e-12 7.84630661e 6.93213721e  
 4  
 NC6H12 C 6H 12 G 300.00 3500.00 1780.00  
 1  
 2.80951655e 5.24635940e-03 6.43208140e-06-3.19131390e-09 4.01093698e-13  
 2  
 -1.79767847e1.24497292e1.85358315e 7.25469181e-02-5.02818725e-05 3  
 1.80498674e-08-2.58221828e-12-7.31503024e 3.72569567e  
 4

NC7H16 C 7H 16 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 3.10696120e 1.73458864e-02-4.57663866e-07-1.06280964e-09 1.59098857e-13  
 2  
 -3.76541592e1.40920498e2.76912812e 9.25430866e-02-6.31219974e-05 3  
 2.21462028e-08-3.06437509e-12-2.54722127e 4.22218230e  
 4  
 NC7H15 C 7H 15 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.58938298e 4.32851195e-02-1.83429598e-05 3.81524631e-09-3.18291961e-13  
 2  
 -8.33589206e5.34387877e1.03213606e 8.08983770e-02-4.96873411e-05 3  
 1.54242764e-08-1.93065725e-12-2.24254435e 3.81680706e  
 4  
 NC7H14 C 7H 14 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.82668105e 3.59607889e-02-1.37346402e-05 2.52229049e-09-1.85248240e-13  
 2  
 -1.87497345e6.92309266e1.22797310e 7.92825302e-02-4.98360912e-05 3  
 1.58931983e-08-2.04231877e-12-1.17316124e 3.62789089e  
 4  
 NC7H13 C 7H 13 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 9.88287390e 2.86275350e-02-1.23662428e-05 2.58308509e-09-2.14520963e-13  
 2  
 7.14211639e2.81379758e9.61360662e-01 5.27258341e-02-3.24481586e-05 3  
 1.00208317e-08-1.24754133e-12 1.10460408e 3.05532839e  
 4  
 IC8H18 C 8H 18 G 300.00 3500.00 1390.00  
 1  
 2.06155885e 4.43694094e-02-1.35968858e-05 1.75327621e-09-6.83090867e-14  
 2  
 -3.76580614e8.42148794e5.96912082e 1.20872170e-01-9.61538218e-05 3  
 4.13489290e-08-7.18982937e-12-3.02675122e 5.27954202e  
 4  
 IC8H17 C 8H 17 G 300.00 3500.00 1530.00  
 1  
 2.65104230e 3.01796816e-02-5.82184988e-06 1.42085775e-11 7.60110768e-14  
 2  
 -1.80373025e1.14981197e3.32961207e 1.08192845e-01-8.23053436e-05 3  
 3.33403496e-08-5.36943681e-12-8.90625182e 4.16697270e  
 4  
 IC8H16 C 8H 16 G 300.00 3500.00 1400.00  
 1  
 1.88616063e 4.14292819e-02-1.28170543e-05 1.66806735e-09-6.58961701e-14  
 2  
 -2.24684067e7.38514297e5.35586582e 1.10622059e-01-8.69521730e-05 3  
 3.69705048e-08-6.36990286e-12-1.56875145e 5.11323812e  
 4  
 DIMEPTD C 7H 12 G 300.00 3500.00 1310.00  
 1  
 1.53755546e 3.27318282e-02-1.05955708e-05 1.52102629e-09-7.69415904e-14  
 2  
 -6.19682930e5.37226047e1.29247814e 8.36265847e-02-6.88720095e-05 3  
 3.11782470e-08-5.73671653e-12-1.82980473e 3.11918394e  
 4  
 C7H8 C 7H 8 G 200.00 3500.00 1740.00  
 1

1.92535108e 1.64137602e-02-3.61135948e-06 2.27424890e-11 5.04456794e-14  
 2  
 -3.67626229e8.27561068e4.42382865e 7.08444256e-02-5.05343469e-05 3  
 1.80008986e-08-2.53262272e-12 4.56345183e 4.45878951e  
 4  
 C6H5OH C 6H 60 1 G 300.00 3500.00 1330.00  
 1  
 1.39867713e 2.02277643e-02-7.36599497e-06 1.21196287e-09-7.46105009e-14  
 2  
 -1.80542263e5.08485812e5.47325436e 7.87541571e-02-7.33732049e-05 3  
 3.42982837e-08-6.29384373e-12-1.28778595e 4.85843830e  
 4  
 C6H5CHO C 7H 60 1 G 200.00 3500.00 1630.00  
 1  
 2.06104936e 1.34209230e-02-2.83635978e-06-5.48103780e-11 5.23167108e-14  
 2  
 -1.43315560e8.70895599e3.50845143e 7.26085180e-02-5.73034718e-05 3  
 2.22221271e-08-3.36439149e-12-6.46877992e 4.10544422e  
 4  
 C7H7 C 7H 7 G 200.00 3500.00 1600.00  
 1  
 1.77148781e 1.72901839e-02-4.74309316e-06 3.88421745e-10 1.27959347e-14  
 2  
 1.68881058e7.24712964e3.23806381e 6.96725387e-02-5.38515508e-05 3  
 2.08502791e-08-3.18436927e-12 2.35930472e 3.84624951e  
 4  
 CH3C6H4 C 7H 7 G 200.00 3500.00 1730.00  
 1  
 1.83842182e 1.52647348e-02-3.43004339e-06 5.73661650e-11 4.21798063e-14  
 2  
 2.84624024e7.44700925e2.82564598e 6.43048832e-02-4.59504033e-05 3  
 1.64428613e-08-2.32566631e-12 3.58010154e 3.94808224e  
 4  
 C6H5O C 6H 50 1 G 300.00 3500.00 1320.00  
 1  
 1.34428169e 1.79658729e-02-6.67332776e-06 1.12237516e-09-7.10809492e-14  
 2  
 4.07683814e4.72500521e4.80707079e 7.32685627e-02-6.95172935e-05 3  
 3.28617518e-08-6.08232653e-12 5.22565416e 4.58618545e  
 4  
 C7H7O2 C 7H 70 2 G 300.00 3500.00 1420.00  
 1  
 1.76964624e 2.58808958e-02-1.00755993e-05 1.78285132e-09-1.17592477e-13  
 2  
 6.43630911e6.45881471e4.45172572e 8.82701582e-02-7.59797497e-05 3  
 3.27237670e-08-5.56493679e-12 1.27263945e 5.00304723e  
 4  
 O2C6H4CH3 C 7H 70 2 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.57011694e 2.91723896e-02-1.27991927e-05 2.73382155e-09-2.31734775e-13  
 2  
 5.63564260e5.46747931e5.21645096e 9.35342985e-02-8.70629336e-05 3  
 4.08177913e-08-7.55557510e-12 1.10742239e 5.17286697e  
 4  
 OC6H4CH2 C 7H 60 1 G 300.00 3500.00 1390.00  
 1  
 1.45795344e 2.32519437e-02-8.58329372e-06 1.38947459e-09-7.81466970e-14  
 2

-5.01093188e5.31869652e4.82277790e 7.90859360e-02-6.88358034e-05 3  
 3.02875608e-08-5.27564421e-12 4.89274964e 4.68072303e  
 4  
 C6H5CH2O C 7H 70 1 G 300.00 3500.00 1650.00  
 1  
 1.54569227e 2.51288522e-02-9.88344275e-06 1.85206220e-09-1.37473827e-13  
 2  
 6.00712849e5.64457004e4.49397764e 7.34946712e-02-5.38523691e-05 3  
 1.96172850e-08-2.82917425e-12 1.25909256e 4.97967788e  
 4  
 BZCOOH C 7H 80 2 G 300.00 3500.00 1550.00  
 1  
 1.78036107e 3.06807111e-02-1.34555335e-05 2.81495360e-09-2.31878498e-13  
 2  
 -1.15055065e6.47324084e3.42659307e 8.54683337e-02-6.64758135e-05 3  
 2.56193751e-08-3.91001099e-12-4.92414334e 4.69952939e  
 4  
 C6H5O2 C 6H 50 2 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.17436568e 2.50264983e-02-1.11158434e-05 2.39771212e-09-2.04780348e-13  
 2  
 1.03023085e3.29345582e2.98072562e 7.03322902e-02-6.33917571e-05 3  
 2.92058730e-08-5.36019590e-12 1.41306479e 4.19652270e  
 4  
 C6H5CO C 7H 50 1 G 300.00 3500.00 1470.00  
 1  
 1.31799087e 2.42895707e-02-1.09067387e-05 2.35371847e-09-2.00195165e-13  
 2  
 5.86598787e4.37756649e1.56203256e 6.44036967e-02-5.18395203e-05 3  
 2.09173383e-08-3.35727336e-12 1.02001186e 3.30251959e  
 4  
 RBBENZ C 14H 13 G 300.00 3500.00 1750.00  
 1  
 5.34298872e2.73976091e-03 1.40930518e-05-5.29858386e-09 5.98002536e-13  
 2  
 9.33192271e2.64139662e8.67312060e 1.39209971e-01-1.07578147e-04 3  
 4.10523491e-08-6.02355932e-12 3.10679755e 7.02252758e  
 4  
 STILB C 14H 12 G 300.00 3500.00 1470.00  
 1  
 3.31295359e 3.16424147e-02-7.88066870e-06 4.81370280e-10 4.43949941e-14  
 2  
 1.37146851e1.52659599e1.11031623e 1.52003498e-01-1.30698101e-04 3  
 5.61808860e-08-9.42831176e-12 2.67190984e 7.77787968e  
 4  
 CYC6-OO C 6H 110 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.87814621e 3.54361927e-02-1.49718784e-05 3.04328286e-09-2.46478319e-13  
 2  
 -1.95252830e7.87240876e6.50623568e 9.16310766e-02-6.18009483e-05 3  
 2.03873828e-08-2.65538109e-12-1.04217118e 5.81382079e  
 4  
 CYC6-QOOH-2 C 6H 110 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.91384147e 3.64873063e-02-1.63612962e-05 3.53264562e-09-3.02111689e-13  
 2  
 -1.43294351e7.86383640e4.87015408e 8.98396814e-02-6.08216088e-05 3



1.99994281e-08-2.58916481e-12-5.68635037e 5.13010187e  
 4  
 CYC6-QOOH-3 C 6H 110 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.09300723e 3.28719793e-02-1.40160778e-05 2.89193638e-09-2.38539838e-13  
 2  
 -1.52994543e8.89349636e7.04914219e 9.50480115e-02-6.58294380e-05 3  
 2.20820698e-08-2.90383614e-12-5.22693704e 6.24943819e  
 4  
 CYC6-QOOH-4 C 6H 110 2 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.09300723e 3.28719793e-02-1.40160778e-05 2.89193638e-09-2.38539838e-13  
 2  
 -1.52994543e8.89349636e7.04914219e 9.50480115e-02-6.58294380e-05 3  
 2.20820698e-08-2.90383614e-12-5.22693704e 6.24943819e  
 4  
 CYC6H10-O-12 C 6H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.29323176e 2.20056554e-02-7.35242350e-06 1.07816406e-09-5.64635919e-14  
 2  
 -2.79806200e1.10525203e1.05629257e 9.64395294e-02-6.93806518e-05 3  
 2.40515820e-08-3.24721608e-12-1.59223324e 7.07580407e  
 4  
 CYC6H10-O-13 C 6H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.18028612e 2.41377428e-02-8.73118284e-06 1.46035609e-09-9.51866869e-14  
 2  
 -2.87387454e1.06217525e1.25990095e 1.00586344e-01-7.24383509e-05 3  
 2.50556035e-08-3.37230438e-12-1.63540719e 7.99725758e  
 4  
 CYC6H10-O-14 C 6H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.14079592e 2.50825461e-02-9.38039634e-06 1.64525432e-09-1.14247640e-13  
 2  
 -3.89741817e1.05728234e1.45960517e 1.05091459e-01-7.60544907e-05 3  
 2.63393633e-08-3.54398501e-12-2.60127378e 8.91329846e  
 4  
 CYC6H10-ONE C 6H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.15965428e 4.02887933e-02-1.86685839e-05 4.15568433e-09-3.64030709e-13  
 2  
 -3.62221493e4.27468435e6.46490380e 8.04253413e-02-5.21157073e-05 3  
 1.65435078e-08-2.08456175e-12-2.97200285e 5.50054734e  
 4  
 C5H9CHO C 6H 100 1 G 300.00 3500.00 1100.00  
 1  
 9.07727161e 2.66919102e-02-7.89644695e-06 7.31227306e-10 1.61730960e-14  
 2  
 -1.68606427e1.54909489e3.32869064e-01 6.09106035e-02-5.45583015e-05 3  
 2.90111392e-08-6.41107960e-12-1.47904117e 3.08044225e  
 4  
 CYC6-OOQOOH-2 C 6H 110 4 G 300.00 3500.00 1770.00  
 1  
 2.93742215e 2.67858800e-02-9.56345992e-06 1.54085681e-09-9.31283790e-14  
 2  
 -3.55499047e1.29752781e4.99061953e 1.04446538e-01-7.53775765e-05 3  
 2.63296013e-08-3.59436348e-12-2.33847510e 5.56593329e  
 4

CYC6-OOQOOH-3                    C    6H   110    4        G    300.00   3500.00 1770.00  
 1  
   2.93742215e 2.67858800e-02-9.56345992e-06 1.54085681e-09-9.31283790e-14  
 2  
 -3.55499047e1.29752781e4.99061953e 1.04446538e-01-7.53775765e-05        3  
   2.63296013e-08-3.59436348e-12-2.33847510e 5.56593329e  
 4  
 CYC6-OOQOOH-4                    C    6H   110    4        G    300.00   3500.00 1770.00  
 1  
   2.93742215e 2.67858800e-02-9.56345992e-06 1.54085681e-09-9.31283790e-14  
 2  
 -3.55499047e1.30447295e4.99061953e 1.04446538e-01-7.53775765e-05        3  
   2.63296013e-08-3.59436348e-12-2.33847510e 5.49648189e  
 4  
 CYC6-OQOOH-2                    C    6H   100    3        G    300.00   3500.00 1460.00  
 1  
   1.17655243e 3.67451403e-02-1.42717448e-05 2.74140448e-09-2.13135508e-13  
 2  
 -3.59903393e5.10812501e1.06696444e 9.82113560e-02-7.74219664e-05        3  
   3.15771221e-08-5.15075839e-12-2.94392700e 6.56457555e  
 4  
 CYC6-OQOOH-3                    C    6H   100    3        G    300.00   3500.00 1460.00  
 1  
   1.16022418e 3.57303662e-02-1.34415882e-05 2.50437459e-09-1.89510289e-13  
 2  
 -3.63821557e4.91587814e8.02402159e 8.95009509e-02-6.86853397e-05        3  
   2.77298319e-08-4.50893790e-12-3.06512867e 5.29538877e  
 4  
 CYC6-OQOOH-4                    C    6H   100    3        G    300.00   3500.00 1460.00  
 1  
   1.16022418e 3.57303662e-02-1.34415882e-05 2.50437459e-09-1.89510289e-13  
 2  
 -3.63821557e4.98532958e8.02402159e 8.95009509e-02-6.86853397e-05        3  
   2.77298319e-08-4.50893790e-12-3.06512867e 5.22593733e  
 4  
 C7DIONE                            C    7H   120    2        G    300.00   3500.00 700.00  
 1  
 -7.55853626e-01 8.24536117e-02-4.58824666e-05 1.18274999e-08-1.15807940e-  
 12        2  
 -3.67546789e 2.64722479e 3.52180416e 5.80098529e-02 6.49701649e-06        3  
 -3.80577221e-08 1.66580713e-11-3.73535510e 7.36075518e  
 4  
 NC7H14O                            C    7H   140    1        G    300.00   3500.00 1490.00  
 1  
   1.37609323e 4.99379374e-02-2.21152348e-05 4.72010363e-09-3.98160015e-13  
 2  
 -3.97917916e4.67908592e7.39181742e 1.06723843e-01-7.92822536e-05        3  
   3.02981881e-08-4.68978493e-12-3.34882722e 6.36941424e  
 4  
 NC7H15-OO                        C    7H   150    2        G    300.00   3500.00 1780.00  
 1  
   2.68006146e 3.35780867e-02-1.17982179e-05 1.89992230e-09-1.16218735e-13  
 2  
 -2.33388920e1.06550436e 1.92333992e 8.94820746e-02-5.89083201e-05        3  
   1.95441553e-08-2.59434135e-12-1.44825822e 2.78126029e  
 4  
 NC7-QOOH                         C    7H   150    2        G    300.00   3500.00 1800.00  
 1

3.67777501e 2.43465391e-02-1.65378816e-05 5.22869887e-09-5.85107382e-13  
 2  
 -2.84549794e1.65059640e2.87358792e 1.12460624e-01-8.99662853e-05 3  
 3.24244039e-08-4.36228864e-12-1.41804977e 4.95416731e  
 4  
 NC7-OOQOOH C 7H 150 4 G 300.00 3500.00 1690.00  
 1  
 2.24694069e 4.29307086e-02-1.68910162e-05 3.18431082e-09-2.38592446e-13  
 2  
 -4.58962940e7.93472401e 2.87430503e 8.93096479e-02-5.80557552e-05 3  
 1.94228666e-08-2.64074567e-12-3.92731495e 2.54699082e  
 4  
 C7KETONE C 7H 140 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 1.82994273e 4.14393597e-02-1.71834162e-05 3.42714287e-09-2.72037363e-13  
 2  
 -4.27848802e6.59785823e2.29236271e-01 8.26141675e-02-5.14957561e-05 3  
 1.61354169e-08-2.03707542e-12-3.61145614e 3.43024100e  
 4  
 NC7-OQOOH C 7H 140 3 G 300.00 3500.00 1670.00  
 1  
 2.27584121e 4.25741258e-02-1.77950010e-05 3.55398723e-09-2.80791799e-13  
 2  
 -5.95329656e8.19251638e 2.24997334e 9.16961348e-02-6.19165659e-05 3  
 2.11673864e-08-2.91752820e-12-5.26831470e 2.75334100e  
 4  
 NC7H15OOH C 7H 160 2 G 300.00 3500.00 1790.00  
 1  
 2.73219585e 3.55870996e-02-1.24650774e-05 2.00089265e-09-1.21997682e-13  
 2  
 -4.84634178e1.12262056e 1.16215154e 9.40447688e-02-6.14519510e-05 3  
 2.02455383e-08-2.67013255e-12-3.90982069e 2.91745387e  
 4  
 IC8H16O C 8H 160 1 G 300.00 3500.00 1730.00  
 1  
 2.92525449e 3.42835226e-02-1.16024061e-05 1.77291875e-09-1.00401812e-13  
 2  
 -4.92824114e1.33818841e8.05235857e 1.20537635e-01-8.63892084e-05 3  
 3.05924957e-08-4.26508057e-12-3.63749148e 6.66033697e  
 4  
 IC8H17-OO C 8H 170 2 G 300.00 3500.00 1600.00  
 1  
 2.43863221e 4.79091863e-02-1.96116165e-05 3.85759153e-09-3.01446048e-13  
 2  
 -3.51809040e9.31491997e7.10506923e-01 1.10651259e-01-7.84323095e-05 3  
 2.83662136e-08-4.13091825e-12-2.71499187e 3.97240936e  
 4  
 IC8-QOOH C 8H 170 2 G 300.00 3500.00 1560.00  
 1  
 2.59202581e 4.65574276e-02-1.91478836e-05 3.78861311e-09-2.97862013e-13  
 2  
 -2.91331926e1.00455337e9.92411233e-01 1.15564272e-01-8.55006187e-05 3  
 3.21444828e-08-4.84207190e-12-2.07364398e 4.13504180e  
 4  
 IC8T-QOOH C 8H 170 2 G 300.00 3500.00 1560.00  
 1  
 2.59202581e 4.65574276e-02-1.91478836e-05 3.78861311e-09-2.97862013e-13  
 2

-2.91331926e1.00455337e9.92411233e-01 1.15564272e-01-8.55006187e-05 3  
 3.21444828e-08-4.84207190e-12-2.07364398e 4.13504180e  
 4  
 IC8-OOQOOH C 8H 170 4 G 300.00 3500.00 1710.00  
 1  
 3.48314225e 3.98146097e-02-1.43978345e-05 2.42273588e-09-1.57988116e-13  
 2  
 -5.01227380e1.45334518e 1.76391327e 1.17165508e-01-8.22495001e-05 3  
 2.88756269e-08-4.02536985e-12-3.88136498e 3.19375985e  
 4  
 IC8-OQOOH C 8H 160 3 G 300.00 3500.00 1770.00  
 1  
 3.33140926e 3.48304479e-02-1.19632189e-05 1.85711682e-09-1.07309433e-13  
 2  
 -6.88276671e1.40834098e 5.55148980e-01 1.08861959e-01-7.47017874e-05 3  
 2.54874628e-08-3.44492892e-12-5.72310011e 3.59135548e  
 4  
 C7H6 C 7H 6 G 300.00 3500.00 1290.00  
 1  
 1.11282362e 2.73165807e-02-1.25329645e-05 2.76951413e-09-2.40721375e-13  
 2  
 3.69620905e3.50553513e3.97785296e 7.41571673e-02-6.69987629e-05 3  
 3.09172135e-08-5.69570188e-12 4.08594615e 4.16694449e  
 4  
 C7H5 C 7H 5 G 300.00 3500.00 1250.00  
 1  
 1.21079560e 2.22665290e-02-9.87308079e-06 2.11666746e-09-1.79360812e-13  
 2  
 5.15977924e3.78517160e2.81419579e 7.00174146e-02-6.71741435e-05 3  
 3.26772342e-08-6.29147417e-12 5.53283304e 3.74688223e  
 4  
 CYC5H4 C 5H 4 G 200.00 3500.00 1310.00  
 1  
 6.52292919e 1.75112106e-02-7.24525264e-06 1.36814029e-09-9.77801928e-14  
 2  
 6.01459587e1.09295465e1.67820638e 4.25528459e-02-3.59188809e-05 3  
 1.59603175e-08-2.88254684e-12 6.22946562e 3.08507210e  
 4  
 C5H3 C 5H 3 G 300.00 3500.00 1370.00  
 1  
 1.06729929e 9.74586302e-03-3.33881730e-06 5.09387247e-10-2.86889361e-14  
 2  
 6.39774214e2.94129104e 3.35962353e 3.10987662e-02-2.67179083e-05 3  
 1.18860739e-08-2.10472664e-12 6.59812846e 8.17219633e  
 4  
 C5H2 C 5H 2 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 1.08586495e 8.25356562e-03-3.15379453e-06 5.51063161e-10-3.71272440e-14  
 2  
 7.89908994e3.35264726e 1.78531794e 3.70577929e-02-3.74445412e-05 3  
 1.86943154e-08-3.63697888e-12 8.12773789e 1.23440607e  
 4  
 C5H5O C 5H 5O 1 G 300.00 3500.00 1450.00  
 1  
 1.05801390e 2.13128784e-02-9.63052935e-06 2.09384798e-09-1.79321203e-13  
 2  
 1.62543411e3.26154734e4.01979397e 6.15885556e-02-5.12950230e-05 3

2.12499370e-08-3.48209517e-12 2.04883217e 4.32455666e  
 4  
 CYC5H4O C 5H 40 1 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 6.34459580e 2.39841575e-02-8.32755386e-06 8.47127646e-10 2.86249491e-14  
 2  
 3.08659308e9.73181560e5.14379340e 6.04552343e-02-5.17455025e-05 3  
 2.38195872e-08-4.52940274e-12 5.98166715e 4.83481228e  
 4  
 C6H4O2 C 6H 40 2 G 300.00 3500.00 1410.00  
 1  
 1.74929578e 1.29021286e-02-2.02976640e-06-3.72417853e-10 8.59745736e-14  
 2  
 -2.22100459e6.49015838e5.23446579e 7.73770890e-02-7.06201498e-05 3  
 3.20580235e-08-5.66410368e-12-1.58009124e 5.25540058e  
 4  
 LC6H6 C 6H 6 G 300.00 3500.00 1250.00  
 1  
 1.28863876e 1.90072460e-02-7.30992555e-06 1.31482494e-09-9.21385778e-14  
 2  
 3.55364843e4.09021933e1.05889384e 6.36321466e-02-6.08598063e-05 3  
 2.98747613e-08-5.80412586e-12 3.90228046e 2.94875281e  
 4  
 C6H4C2H3 C 8H 7 G 200.00 3500.00 1580.00  
 1  
 1.99256075e 1.67315530e-02-4.18312961e-06 2.15370099e-10 3.07179808e-14  
 2  
 3.89930312e8.19571079e3.96125911e 7.72046330e-02-6.15942816e-05 3  
 2.44394849e-08-3.80221157e-12 4.65412811e 4.42096620e  
 4  
 CRESOL C 7H 80 1 G 300.00 3500.00 1310.00  
 1  
 1.22673687e 3.34155282e-02-1.38949870e-05 2.56768165e-09-1.71519558e-13  
 2  
 -2.17187243e3.95715125e4.41843936e 8.43645604e-02-7.22335735e-05 3  
 3.22565297e-08-5.83733026e-12-1.73470426e 4.54334870e  
 4  
 RCRESOLC C 7H 70 1 G 300.00 3500.00 1150.00  
 1  
 1.31541709e 2.50657189e-02-5.32353909e-06-2.12687604e-10 1.25840461e-13  
 2  
 -3.38086419e4.22339553e6.42956807e 9.31830718e-02-9.41722602e-05 3  
 5.12938174e-08-1.10712258e-11 1.12339577e 5.49833260e  
 4  
 RCRESOLO C 7H 70 1 G 300.00 3500.00 1150.00  
 1  
 1.27824814e 2.40796407e-02-4.51347940e-06-4.25076353e-10 1.44988491e-13  
 2  
 -3.97704754e4.00543784e6.60757191e 9.15233043e-02-9.24834754e-05 3  
 5.05720228e-08-1.09413374e-11 4.82664712e 5.62014117e  
 4  
 C6H5CH2OH C 7H 80 1 G 300.00 3500.00 1450.00  
 1  
 1.25818443e 2.64134519e-02-7.93799877e-06 4.38368234e-10 8.64078966e-14  
 2  
 -1.87828963e3.81332334e6.02884975e 7.77532977e-02-6.10481841e-05 3  
 2.48568442e-08-4.12367417e-12-1.33857950e 5.85676633e  
 4

C6H5C2H	C	8H	6	G	200.00	3500.00	1280.00
1							
2							
3							
4							
C6H4C2H	C	8H	5	G	200.00	3500.00	1410.00
1							
2							
3							
4							
C6H5C2H3	C	8H	8	G	200.00	3500.00	1620.00
1							
2							
3							
4							
C6H5C2H5	C	8H	10	G	200.00	3500.00	1660.00
1							
2							
3							
4							
C6H5C2H2	C	8H	7	G	200.00	3500.00	1520.00
1							
2							
3							
4							
C6H5CHCH3	C	8H	9	G	200.00	3500.00	1700.00
1							
2							
3							
4							
XYLENE	C	8H	10	G	200.00	3500.00	1800.00
1							
2							
3							
4							
RXYLENE	C	8H	9	G	200.00	3500.00	1620.00
1							
2							
3							
4							
INDENE	C	9H	8	G	200.00	3500.00	1610.00
1							

2.31048443e 1.91297591e-02-4.53548120e-06 1.22196710e-10 5.15078704e-14  
 2  
 8.53092089e1.04304478e6.87762290e 9.36203608e-02-7.39366630e-05 3  
 2.88597461e-08-4.41084452e-12 1.81852753e 5.46222708e  
 4  
 INDENYL C 9H 7 G 200.00 3500.00 1430.00  
 1  
 2.02650248e 2.20602643e-02-7.28401475e-06 9.93375839e-10-4.12199483e-14  
 2  
 2.49669757e8.59379552e6.82385337e 9.78333502e-02-8.67662727e-05 3  
 3.80480416e-08-6.51930836e-12 3.27143949e 5.44392228e  
 4  
 C10H7 C 10H 7 G 200.00 3500.00 1490.00  
 1  
 2.12397127e 2.27484190e-02-6.96640086e-06 8.04033892e-10-1.68765826e-14  
 2  
 3.76445830e9.11799918e6.45168838e 9.70877508e-02-8.18046543e-05 3  
 3.42887110e-08-5.63511100e-12 4.58966205e 5.34576808e  
 4  
 C10H7OH C 10H 8O 1 G 300.00 3500.00 1730.00  
 1  
 2.61818224e 2.47079229e-02-8.75472975e-06 1.41213209e-09-8.61580367e-14  
 2  
 -1.58338687e1.19314317e3.09194614e 9.23929369e-02-6.74411581e-05 3  
 2.40273261e-08-3.35424965e-12-5.70514482e 3.79602738e  
 4  
 C10H7O C 10H 7O 1 G 200.00 3500.00 1520.00  
 1  
 2.51245261e 2.12349446e-02-5.95579175e-06 5.14900720e-10 1.27936894e-14  
 2  
 2.27944423e1.11444345e6.17635896e 1.03605695e-01-8.72427162e-05 3  
 3.61670606e-08-5.85104839e-12 1.17949133e 5.26703358e  
 4  
 C10H6CH3 C 11H 9 G 200.00 3500.00 1530.00  
 1  
 2.52493034e 2.50352394e-02-6.91797177e-06 5.80757389e-10 1.70685086e-14  
 2  
 3.22365770e1.13732286e6.94188403e 1.09195207e-01-8.94277435e-05 3  
 3.65327276e-08-5.85743643e-12 4.20870803e 5.52614582e  
 4  
 C10H7CH2 C 11H 9 G 200.00 3500.00 1480.00  
 1  
 2.49658354e 2.73321443e-02-8.56500981e-06 1.05181516e-09-3.08784850e-14  
 2  
 2.10853669e1.11434350e7.41870774e 1.14857936e-01-9.72735830e-05 3  
 4.10106319e-08-6.78067861e-12 3.06711917e 5.74984546e  
 4  
 C10H7CHO C 11H 8O 1 G 200.00 3500.00 1700.00  
 1  
 3.52801173e 1.31180999e-02-5.97608673e-07-9.89256296e-10 1.64132767e-13  
 2  
 -1.29136404e1.70276910e6.53399067e 1.11504236e-01-8.74089056e-05 3  
 3.30543895e-08-4.84228574e-12 1.30315629e 5.36397371e  
 4  
 C10H7CH3 C 11H 10 G 200.00 3500.00 1700.00  
 1  
 3.19556671e 1.89589747e-02-2.92887930e-06-5.41537998e-10 1.30075116e-13  
 2

-1.51641167e1.52538802e7.17710534e 1.11036086e-01-8.41733896e-05 3  
 3.13190543e-08-4.55530610e-12 1.17887310e 5.70191587e  
 4  
 CH3C10H6OH C 11H 100 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.91191869e 2.86451308e-02-9.80098219e-06 1.51374083e-09-8.72237945e-14  
 2  
 -2.13626711e1.32660114e1.76841814e 9.72842531e-02-6.70002508e-05 3  
 2.26986551e-08-3.02957300e-12-1.02431333e 3.45100483e  
 4  
 CH3C10H6O C 11H 90 1 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 2.60936624e 3.24954978e-02-1.30480618e-05 2.52260906e-09-1.95492396e-13  
 2  
 -2.87396993e1.14905139e1.85059487e 9.45938472e-02-6.47966864e-05 3  
 2.16887663e-08-2.85745868e-12 7.18596268e 3.63350107e  
 4  
 C12H8 C 12H 8 G 200.00 3500.00 1570.00  
 1  
 2.77000801e 2.26169409e-02-5.57154154e-06 2.34725134e-10 5.00956725e-14  
 2  
 1.79557632e1.32407942e8.95027490e 1.15993641e-01-9.47849497e-05 3  
 3.81172764e-08-5.98215771e-12 2.94639746e 6.09409166e  
 4  
 C12H7 C 12H 7 G 200.00 3500.00 1550.00  
 1  
 2.72643903e 2.07706175e-02-5.09002113e-06 1.94274019e-10 4.95146521e-14  
 2  
 5.03500896e1.28964295e8.21375630e 1.12327125e-01-9.36930927e-05 3  
 3.83031220e-08-6.09707373e-12 6.13483151e 5.77457270e  
 4  
 BIPHENYL C 12H 10 G 200.00 3500.00 1620.00  
 1  
 3.03550325e 2.42378629e-02-5.78855002e-06 1.73424746e-10 6.27217930e-14  
 2  
 7.33500914e1.42781766e7.48580974e 1.17672041e-01-9.23016780e-05 3  
 3.57755350e-08-5.43143103e-12 1.95954420e 5.80338349e  
 4  
 C12H9 C 12H 9 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 2.37129726e 3.27032394e-02-1.16108738e-05 1.80515253e-09-1.00356246e-13  
 2  
 4.00500330e1.02303886e9.58279780e 1.25838261e-01-1.09304953e-04 3  
 4.73501778e-08-8.06277324e-12 4.95726233e 7.02380051e  
 4  
 FLUORENE C 13H 10 G 200.00 3500.00 1580.00  
 1  
 3.04981916e 2.54134515e-02-6.12250971e-06 2.13473325e-10 6.26029968e-14  
 2  
 6.42406071e1.44876912e9.12299946e 1.25720264e-01-1.01350497e-04 3  
 4.03940585e-08-6.29508454e-12 1.89443571e 6.43961494e  
 4  
 C6H5CH2C6H5 C 13H 12 G 200.00 3500.00 1730.00  
 1  
 3.68978946e 2.09448951e-02-2.15140891e-06-1.01983321e-09 1.90993351e-13  
 2  
 1.61235408e1.77722051e9.21937242e 1.27574414e-01-9.46047492e-05 3



3.46076582e-08-4.95748807e-12 1.75689285e 7.00449656e  
 4  
 C14H10 C 14H 10 G 200.00 3500.00 1550.00  
 1  
 3.33910328e 2.79675689e-02-7.16206047e-06 3.83005680e-10 5.29481034e-14  
 2  
 8.53646106e1.60739744e9.79770356e 1.39422372e-01-1.15021548e-04 3  
 4.67741830e-08-7.42949985e-12 2.19249693e 6.65486198e  
 4  
 C14H9 C 14H 9 G 298.15 3500.00 1380.00  
 1  
 2.51054802e 4.12375730e-02-1.71094078e-05 3.35330064e-09-2.55891906e-13  
 2  
 4.20489545e1.12231128e1.15966331e 1.47620510e-01-1.32743035e-04 3  
 5.92149564e-08-1.03757571e-11 5.21787378e 7.66564976e  
 4  
 C16H10 C 16H 10 G 200.00 3500.00 1560.00  
 1  
 3.81807346e 2.83119223e-02-6.73305412e-06 1.57165249e-10 8.21178664e-14  
 2  
 9.09208909e1.88517714e1.17161985e 1.56252776e-01-1.29753106e-04 3  
 5.27298370e-08-8.34298979e-12 2.46599322e 7.43946040e  
 4  
 C16H9 C 16H 9 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 1.61933978e 6.96117135e-02-3.71054120e-05 9.43826012e-09-9.32515878e-13  
 2  
 4.61008358e6.54256239e1.33382684e 1.64875153e-01-1.52343444e-04 3  
 7.13941910e-08-1.34236310e-11 5.34246890e 8.34001921e  
 4  
 C6H5C2H4C6H5 C 14H 14 G 300.00 3500.00 1170.00  
 1  
 6.79293353e 9.36089894e-02-5.25184355e-05 1.38852184e-08-1.40951794e-12  
 2  
 1.04787082e8.65156283e1.16088786e 1.56521168e-01-1.33175074e-04 3  
 5.98434171e-08-1.12296459e-11 1.47847322e 8.30156968e  
 4  
 C18H10 C 18H 10 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 3.55205899e 2.97059393e-02-5.18578691e-06-7.74972602e-10 2.05763862e-13  
 2  
 1.13998056e1.72584615e1.43149505e 1.69106052e-01-1.51409682e-04 3  
 6.73946752e-08-1.17120067e-11 2.56527701e 8.56679583e  
 4  
 C18H9 C 18H 9 G 300.00 3500.00 1110.00  
 1  
 1.00826780e 9.26185738e-02-5.34378516e-05 1.44603235e-08-1.49786389e-12  
 2  
 4.90427510e3.41228885e1.54340436e 1.84570724e-01-1.77697514e-04 3  
 8.90907512e-08-1.83065188e-11 5.47074632e 9.16434687e  
 4  
 BENZYNE C 6H 4 G 300.00 3500.00 1400.00  
 1  
 1.09465819e 1.50373245e-02-5.27844957e-06 8.14607575e-10-4.49073360e-14  
 2  
 5.03301418e3.53782935e3.73796174e 5.69931634e-02-5.02311341e-05 3  
 2.22206478e-08-3.86741452e-12 5.44418140e 4.04070822e  
 4

LC6H5 C 6H 5 G 300.00 3500.00 1140.00  
 1  
 1.23076076e 1.68261951e-02-6.51181367e-06 1.21158890e-09-8.99428205e-14  
 2  
 5.89425072e3.55373249e 1.67614161e-01 5.94226633e-02-6.25597981e-05 3  
 3.39881880e-08-7.27779349e-12 6.17104257e 2.46218080e  
 4  
 C6H2 C 6H 2 G 200.00 3500.00 700.00  
 1  
 9.95239961e 1.43744770e-02-7.32585546e-06 1.80931772e-09-1.74471745e-13  
 2  
 8.06473020e2.49945457e5.39476453e-01 7.43280545e-02-1.35797807e-04 3  
 1.24163557e-07-4.38724145e-11 8.21161647e 2.18805021e  
 4  
 C6H3 C 6H 3 G 300.00 3500.00 1320.00  
 1  
 1.19194523e 1.16137832e-02-4.19264521e-06 6.84693068e-10-4.17887563e-14  
 2  
 8.26280760e3.29876543e 4.46601449e 3.41999583e-02-2.98587533e-05 3  
 1.36473739e-08-2.49684195e-12 8.45957836e 5.04018538e  
 4  
 C6H4 C 6H 4 G 300.00 3500.00 1360.00  
 1  
 1.74447675e 6.21306704e-03-9.80963831e-07 8.00594547e-11-2.88320672e-15  
 2  
 5.49568894e6.59208083e1.17305610e 6.09713718e-02-6.13761529e-05 3  
 2.96855443e-08-5.44506792e-12 6.00209374e 2.96241244e  
 4  
 C8H2 C 8H 2 G 300.00 3500.00 1060.00  
 1  
 1.62719352e 9.99874483e-03-2.93037073e-06 2.89537319e-10 2.52408504e-16  
 2  
 1.07885460e5.89733616e 1.87361690e-01 7.06952486e-02-8.88216497e-05 3  
 5.43092096e-08-1.27402363e-11 1.11295389e 1.95626384e  
 4  
 BIN1B C 20H 10 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 -5.70256699e 1.43432300e-01-8.80724700e-05 2.76799200e-08-3.52289900e-12  
 2  
 2.77808900e 4.34481199e5.70256700e 1.43432300e-01-8.80724700e-05 3  
 2.76799200e-08-3.52289900e-12 2.77808900e 4.34481200e  
 4  
 BIN1A C 20H 16 G 300.00 3500.00 1800.00  
 1  
 -3.24173599e 1.58222900e-01-9.46183500e-05 2.81843100e-08-3.56131000e-12  
 2  
 2.17869900e 3.00825299e3.24173600e 1.58222900e-01-9.46183500e-05 3  
 2.81843100e-08-3.56131000e-12 2.17869900e 3.00825300e  
 4  
 CH2OHCH2OH C 2H 6O 2 G 300.00 3500.00 1510.00  
 1  
 8.58229286e 1.47365725e-02-4.87454255e-06 7.03407966e-10-3.54291380e-14  
 2  
 -5.09140292e1.61663169e4.19778978e-01 3.85831204e-02-2.85631663e-05 3  
 1.11619615e-08-1.76697774e-12-4.81954035e 3.09733167e  
 4  
 GLYCEROL C 3H 8O 3 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1

1.38765805e 2.06689859e-02-7.56631173e-06 1.26540495e-09-8.07916650e-14  
 2  
 -7.51651919e3.83652419e 3.56065369e 5.34179600e-02-4.65531857e-05 3  
 2.18933806e-08-4.17364397e-12-7.25655783e 1.37872736e  
 4  
 C3H4O3 C 3H 40 3 G 300.00 3500.00 1710.00  
 1  
 1.37242810e 1.08811110e-02-3.70124855e-06 5.78901441e-10-3.43205819e-14  
 2  
 -5.77802807e3.99570073e 2.17563103e 3.78954970e-02-2.73980784e-05 3  
 9.81743158e-09-1.38498288e-12-5.38306424e 2.19543274e  
 4  
 FURFURAL C 5H 40 2 G 300.00 3500.00 1430.00  
 1  
 1.05158963e 2.23224229e-02-1.09267096e-05 2.56683236e-09-2.34844996e-13  
 2  
 -2.33303219e2.94000375e1.81996645e 5.68283326e-02-4.71217198e-05 3  
 1.94409630e-08-3.18486783e-12-1.98022652e 3.45255921e  
 4  
 FURAN C 4H 40 1 G 300.00 3500.00 1250.00  
 1  
 8.37486468e 1.95634451e-02-9.90167118e-06 2.37694381e-09-2.20517697e-13  
 2  
 -9.41817580e2.52053385e7.59507782e 7.06672611e-02-7.12262504e-05 3  
 3.50833860e-08-6.76180614e-12-5.42569018e 5.54039923e  
 4  
 CH2CCHCHO C 4H 40 1 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 1.05858550e 1.29956017e-02-4.76361254e-06 7.49449812e-10-3.96847799e-14  
 2  
 3.10513348e2.93262371e 1.05972039e 3.69607201e-02-2.73722149e-05 3  
 1.02289476e-08-1.53017186e-12 6.13444428e 2.10494483e  
 4  
 C4H3O C 4H 30 1 G 300.00 3500.00 1240.00  
 1  
 8.44125907e 1.62911135e-02-8.34126433e-06 2.01436765e-09-1.87394602e-13  
 2  
 1.94535776e2.27855079e5.90872254e 6.25813768e-02-6.43375505e-05 3  
 3.21198979e-08-6.25705795e-12 2.30123730e 4.95317027e  
 4  
 MEFU2 C 5H 60 1 G 300.00 3500.00 1260.00  
 1  
 5.16398170e 3.29529080e-02-1.68209195e-05 4.03716052e-09-3.55511368e-13  
 2  
 -1.31841670e2.67616715e3.74149805e 6.12242723e-02-5.04773056e-05 3  
 2.18447722e-08-3.88876765e-12-1.09399861e 4.23457855e  
 4  
 DMF C 6H 80 1 G 300.00 3500.00 1590.00  
 1  
 1.38889506e 2.49736923e-02-8.98421019e-06 1.42738237e-09-7.97717940e-14  
 2  
 -2.20872034e4.94041110e2.31533181e 6.57391826e-02-4.74422199e-05 3  
 1.75523340e-08-2.61514155e-12-1.69342416e 3.62866615e  
 4  
 DMF-3YL C 6H 70 1 G 300.00 3500.00 1620.00  
 1  
 1.41703395e 2.18230092e-02-7.69511406e-06 1.17891300e-09-6.12376633e-14  
 2

1.19557792e4.86583490e1.12307985e 5.95845385e-02-4.26594930e-05 3  
 1.55675463e-08-2.28170577e-12 1.69108471e 3.25015044e  
 4  
 C6H10O5 C 6H 100 5 G 300.00 3500.00 1220.00  
 1  
 1.54889719e 4.96354386e-02-2.45944508e-05 5.82332583e-09-5.35665861e-13  
 2  
 -1.09180509e4.81819838e7.95116462e 1.26488345e-01-1.19085729e-04 3  
 5.74579043e-08-1.11165221e-11-1.03461116e 6.95642163e  
 4  
 C6H8O4 C 6H 80 4 G 300.00 3500.00 1300.00  
 1  
 1.58073709e 3.77998882e-02-1.77241312e-05 3.97560136e-09-3.49009860e-13  
 2  
 -7.78788467e5.15128322e4.55493836e 1.00453147e-01-9.00163533e-05 3  
 4.10485358e-08-7.47842033e-12-7.25846463e 5.20658817e  
 4  
 C6H6O3 C 6H 60 3 G 300.00 3500.00 1770.00  
 1  
 1.98638073e 1.79335016e-02-5.95408858e-06 8.93593938e-10-4.95459879e-14  
 2  
 -4.95264845e7.44496694e 7.10718581e-01 6.12173180e-02-4.26352889e-05 3  
 1.47094886e-08-2.00094354e-12-4.27462910e 2.88889342e  
 4  
 C5H8O4 C 5H 80 4 G 300.00 3500.00 1230.00  
 1  
 1.19601536e 3.99450842e-02-1.95947372e-05 4.60940116e-09-4.22302288e-13  
 2  
 -8.26385858e2.91875209e6.95683232e 1.01463738e-01-9.46174852e-05 3  
 4.52721372e-08-8.68708604e-12-7.79850073e 6.59920851e  
 4  
 END