

```

1  !
2  !
3  ! "The role of chemistry in the oscillating combustion of hydrocarbons:
4  ! an experimental and theoretical study"
5  ! A. Stagni, Y. Song, L.A. Vandewalle, K.M. Van Geem,
6  ! G.B. Marin, O. Herbinet, F. Battin-Leclerc, T. Faravelli
7  !
8  ! Submitted to Chemical Engineering Journal (March 2019)
9  !
10 !
11 ! Transport properties
12 ! CHEMKIN format
13 !
14 !VERSION: 15_50_1112
15 !AUTHORS: C3
16 !NOTE: SPECIES RE-ARRANGED AS THE SAME ORDER IN MECH, ANALOGIES HAVE BEEN
INDICATED BY CORRESPONDING SPECIES NAME IN COMMENTS. DATA MOSTLY FROM ARAMCO MECH 1.3
17 AR 0 136.500 3.330 0.000 0.000 0.000 !
18 N2 1 97.530 3.621 0.000 1.760 4.000 !
19 HE 0 10.200 2.576 0.000 0.000 0.000 !
20 H2 1 38.000 2.920 0.000 0.790 280.000 !
21 H 0 145.000 2.050 0.000 0.000 0.000 !
22 O2 1 107.400 3.458 0.000 1.600 3.800 !
23 O 0 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000 !
24 H2O 2 572.400 2.605 1.844 0.000 4.000 !
25 OH 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000 !
26 OHV 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000 !
27 H2O2 2 107.400 3.458 0.000 0.000 3.800 !
28 HO2 2 107.400 3.458 0.000 0.000 1.000 !
29 CO 1 98.100 3.650 0.000 1.950 1.800 !
30 CO2 1 244.000 3.763 0.000 2.650 2.100 !
31 HOCO 2 498.000 3.590 0.000 0.000 2.000 !
32 CH4 2 141.400 3.746 0.000 2.600 13.000 !
33 CH3 1 144.000 3.800 0.000 0.000 0.000 !
34 CH2 1 144.000 3.800 0.000 0.000 0.000 !
35 CH2 (S) 1 144.000 3.800 0.000 0.000 0.000 !
36 C 0 71.400 3.298 0.000 0.000 0.000 !
37 CH 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000 !
38 CHV 1 80.000 2.750 0.000 0.000 0.000 !
39 CH3O2H 2 481.800 3.626 0.000 0.000 1.000 !
40 CH3O2 2 481.800 3.626 0.000 0.000 1.000 !
41 CH2O2H 2 238.400 3.496 0.000 0.000 1.500 !
42 CH3OH 2 481.800 3.626 0.000 0.000 1.000 !
43 CH3O 2 417.000 3.690 1.700 0.000 2.000 !
44 CH2OH 2 417.000 3.690 1.700 0.000 2.000 !
45 CH2O 2 498.000 3.590 0.000 0.000 2.000 !
46 HCO 2 498.000 3.590 0.000 0.000 0.000 !
47 HCOH 2 498.000 3.590 0.000 0.000 1.000 !
48 HO2CHO 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000 !
49 HOCH2O2H 2 481.800 3.626 1.700 0.000 1.000 !
50 HOCH2O2 2 481.800 3.626 1.700 0.000 1.000 !
51 OCH2O2H 2 481.800 3.626 1.700 0.000 1.000 !
52 HOCH2O 2 470.600 4.410 0.000 0.000 1.500 !
53 O2CHO 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000 !
54 HOCHO 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000 !
55 OCHO 2 498.000 3.590 0.000 0.000 2.000 !
56 C2H6 2 247.500 4.350 0.000 0.000 1.500 !
57 C2H5 2 247.500 4.350 0.000 0.000 1.500 !
58 C2H5O2H 2 470.600 4.410 0.000 0.000 1.500 !
59 C2H5O2 2 470.600 4.410 0.000 0.000 1.500 !
60 C2H4 2 238.400 3.496 0.000 0.000 1.500 !
61 C2H3 2 265.300 3.721 0.000 0.000 1.000 !
62 CHOCHO 1 440.200 4.010 0.000 0.000 2.000 !
63 C2H3OOH 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000 !
64 C2H3OO 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000
!CH3CO2
65 CHCHO 2 436.000 3.970 0.000 0.000 2.000
!HCCOH
66 C2H2 1 265.300 3.721 0.000 0.000 2.500 !
67 C2H 1 265.300 3.721 0.000 0.000 2.500 !
68 H2CC 2 209.000 4.100 0.000 0.000 2.500 !
69 C2H5OH 2 470.600 4.410 0.000 0.000 1.500 !
70 C2H5O 2 470.600 4.410 0.000 0.000 1.500 !

```

71	PC2H4OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
72	SC2H4OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
73	O2C2H4OH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
74	C2H4O2H	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
75	C2H4O1-2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
76	C2H3O1-2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
77	CH3CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
78	CH3CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
79	CH2CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
80	O2CH2CHO	2	275.049	5.428	0.000	0.000	1.000 !
81	HO2CH2CO	2	279.007	5.505	1.300	0.000	1.000 !
82	C2H3OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
83	C2H2OH	2	224.700	4.162	0.000	0.000	1.000 !
84	CH2CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
85	HCCO	2	150.000	2.500	0.000	0.000	1.000 !
86	HCCOH	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
87	CH3CO3H	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
88	CH3CO3	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
89	CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
90	CH3OCH3	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
91	CH3OCH2	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
92	CH3OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
93	CH3OCH2O2	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
94	CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
95	O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
96	HO2CH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
97	OCH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
98	HOCH2OCO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
99	CH3OCH2O	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
100	CH3OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
101	CH3OCO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
102	CH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
103	C3H8	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
104	IC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
105	NC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
106	NC3H7O2H	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
107	NC3H7O2	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
108	IC3H7O2H	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
109	IC3H7O2	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
110	NC3H7O	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
111	IC3H7O	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
112	C3H6OOH1-2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
113	C3H6OOH1-3	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
114	C3H6OOH2-1	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
115	C3H6OOH1-2O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
116	C3H6OOH1-3O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
117	C3H6OOH2-1O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
118	C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000 !
119	C3KET13	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000 !
120	C3H51-2,3OOH	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
121	C3H52-1,3OOH	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
122	C3H5O1-2OOH-3 !C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
123	C3H5O1-3OOH-2 !C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
124	C3H6O1-2	2	403.600	4.968	2.000	0.000	1.000 !
125	C3H6O1-3	2	403.600	4.968	2.000	0.000	1.000 !
126	C3H6	2	307.800	4.140	0.000	0.000	1.000 !
127	C3H5-A	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000 !
128	C3H5-S	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000 !
129	C3H5-T	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000 !
130	CC3H6 !C3H6	2	307.800	4.140	0.000	0.000	1.000
131	C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000 !
132	CH2CHOCH2 !C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
133	CH3CHCHO	2	387.860	4.687	0.000	0.000	0.000 !
134	AC4H7OOH	2	330.435	5.741	0.000	0.000	1.000 !
135	C3H6OH1-2	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000 !
136	CH3CHCO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000 !
137	AC3H5OOH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
138	C3H6OH2-1	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000 !
139	HOC3H6O2	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000

	!1109							
140	CH2OHCCH3	2	503.072	5.339	1.670	7.016	1.000	
141	SC3H5OH	2	304.276	5.450	0.000	0.000	1.000	!
142	IC3H5OH	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000	!
143	C3H5OH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000	!
144	CH2CCH2OH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000	!
145	C3H4-P	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
146	C3H4-A	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
147	C3H3	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
148	CC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000	1.000	!
149	C3H2	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000	!
150	H2CCC (S)	2	265.300	3.721	0.000	0.000	1.000	!
151	C3H2 (S)	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000	!
152	C3H2C	1	290.616	4.368	0.000	0.000	1.000	!
153	PC3H4OH-2	2	300.783	5.377	0.000	0.000	1.000	!
154	SC3H4OH	2	298.893	5.345	0.000	0.000	1.000	!
155	C3H3O	2	301.263	5.055	0.000	0.000	1.000	!
156	C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000	!
157	C2HCHO	2	343.033	4.884	0.000	0.000	1.000	!
158	C2H5CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000	!
159	C2H5CO	2	424.600	4.820	0.000	0.000	1.000	!
160	CH2CH2CHO	2	424.600	4.820	0.000	0.000	1.000	!
161	C2H3CHO	2	428.800	4.958	2.900	0.000	1.000	!
162	C2H3CO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000	!
163	CH3COCH3	2	435.500	4.860	0.000	0.000	1.000	!
164	CH3COCH2	2	435.500	4.860	0.000	0.000	1.000	!
165	CH3COCH2O2	2	502.115	5.429	0.000	0.000	0.000	!
166	CH3COCH2O	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000	!
167	C3KET21	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
168	C4H10	2	350.900	5.206	0.000	0.000	1.000	!
169	PC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
170	SC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
171	PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
172	SC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
173	PC4H9O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
174	SC4H9O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
175	PC4H9O2H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
176	SC4H9O2H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
177	C4H8OOH1-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
178	C4H8OOH1-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
179	C4H8OOH1-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
180	C4H8OOH2-1	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
181	C4H8OOH2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
182	C4H8OOH2-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
183	C4H8O1-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
184	C4H8O1-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
185	C4H8O1-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
186	C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
187	C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
188	C4H8OOH1-3O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
189	C4H8OOH1-4O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
190	C4H8OOH2-1O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
191	C4H8OOH2-3O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
192	C4H8OOH2-4O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
193	C4H71-2,4OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
194	C4H72-1,3OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
195	C4H72-1,4OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
196	C4H71-2,3OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
197	C4H7O1-3OOH-4 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
198	C4H7O1-3OOH-2 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
199	C4H7O1-2OOH-4 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
200	C4H7O1-4OOH-2 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
201	C4H7O1-2OOH-3 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
202	C4H7O2-3OOH-1	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	

	!NC4KET12							
203	C4H72-10OH !C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
204	NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
205	NC4KET13	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
206	NC4KET14	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
207	NC4KET21	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
208	NC4KET23	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
209	NC4KET24	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
210	C4H71-30OH !C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
211	C4H71-3,40OH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
212	C4H72-3,40OH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
213	HO2CH2CHO !O2CH2CHO	2	275.049	5.428	0.000	0.000	1.000	
214	IC4H10	2	335.700	5.208	0.100	0.000	1.000	!
215	IC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
216	TC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
217	TC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
218	IC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
219	IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
220	IC3H7CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
221	IC3H7CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
222	IC3H6CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
223	TC3H6CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
224	IC3H5CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
225	TC3H6O2CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
226	IC3H5O2HCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
227	TC3H6O2HCO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
228	TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
229	IC3H6CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
230	IC3H5CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
231	IC3H4CHO-A !IC3H5CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
232	SC4H7OH-I !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
233	IC4H9O2	2	502.252	5.430	0.000	0.000	0.000	!
234	TC4H9O2	2	502.252	5.430	0.000	0.000	0.000	!
235	IC4H8O2H-I	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000	!
236	IC4H8O2H-T	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000	!
237	TC4H8O2H-I	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000	!
238	CC4H8O	2	444.197	5.063	0.000	0.000	0.000	!
239	IC4H8OOH-IO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
240	IC4H8OOH-TO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
241	TC4H8OOH-IO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
242	IC4KETII	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000	!
243	IC4KETIT	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000	!
244	TIC4H7Q2-I	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
245	IIC4H7Q2-I	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
246	IIC4H7Q2-T	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000	!
247	IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	!
248	IC4H9O2H	2	505.540	5.450	0.000	0.000	0.000	!
249	TC4H9O2H	2	505.540	5.450	0.000	0.000	0.000	!
250	IC4H8	2	344.500	5.089	0.500	0.000	1.000	!
251	IC4H7	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000	!
252	IC4H7-I1	2	380.022	4.633	0.000	0.000	0.000	!
253	IC4H7O2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
254	IC4H6OOH-I !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
255	CCYCCOOC-T1 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
256	C2CYCOOC-I1 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
257	IC4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
258	CVCYCCOC !IC3H6CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
259	CCYC2OCO !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
260	CCYCCOOC-I2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	

261	CHOIC3H6O !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
262	IC3H5OOCH2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
263	CCYCCO-T1 !C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
264	IC4H8OH-IT !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
265	IC4H8OH-TI !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
266	IC4H7OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
267	IC4H8OH	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
268	IC4H6OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
269	TQJC4H8OH !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
270	TQC4H8OI !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
271	QC4H7OHP !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
272	TQC4H7OHI !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
273	CCY (CCO) COH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
274	C2CY (COC) OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
275	IQJC4H8OH !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
276	IC3H6OHCHO !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
277	IQC4H8OT !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
278	IQC4H7OHT !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
279	CCY (CCOC) OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
280	CH2COHCH2OOH !C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
281	TC3H6OH	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
282	TQC4H7OHI O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
283	TQC4H7OHT O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
284	TQC4H7OHI Q-I !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
285	TQC4H7OHI Q-P !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
286	IC3H5COHQ !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
287	CH2CQCOHQ !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
288	IC3H5Q !AC3H5OOH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000
289	COHQCYC (COC) !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
290	QCYC (CCOC) OH !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
291	HOCOCQ (CH3) 2 !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
292	IQC4H7OHT O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
293	IQC4H8OT Q-I !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
294	IQC4H7OHT Q-P !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
295	CHOC (CH3) OHCH2Q !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
296	CO (CH2OOH) 2 !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
297	CH3COCHO !C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000
298	IC3H5OCH2 !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
299	IC4H7O OCH3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000

300	!C5H10OOH1-2O2 IC4H7OOIC4H7 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
301	C4H8-1	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000 !
302	C4H8-2	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000 !
303	C4H71-1	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
304	C4H71-2	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
305	C4H71-3	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
306	C4H71-4	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
307	C4H72-2	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
308	C4H71-O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
309	PC4H8OH-2 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
310	SC4H8OH-1 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
311	SC4H8OH-3 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
312	C4H71-3OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
313	C4H71-4OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
314	C4H71-1OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
315	C4H71-2OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
316	C4H72-1OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
317	C4H72-2OH !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
318	SQC4H8OP !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
319	PQC4H8OS !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
320	PQC4H7OHS-3 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
321	NC4KET12OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
322	SQC4H7OHS-4 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
323	SQC4H8OS !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
324	NC4KET23OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
325	SC4H8OH-3O2 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
326	CCY (COCC) OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
327	C4H7O2-1 !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
328	C4H6-1 !C4H6	2	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000
329	AC3H5OCH2 !SC3H5OCH2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
330	C5H10-2	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
331	CC5H10	2	437.102	5.017	0.000	0.000	0.000 !
332	C6H10D24 !C6H10	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000
333	C5H91-3	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
334	C5H92-4	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
335	C5H92-5	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
336	C5H91-4	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
337	C5H91-5	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
338	C5H9O2-4	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
339	SC3H5OCH2-1 !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
340	C8H141-5,3-4 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000
341	C8H141-5,3 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000
342	C8H142-6 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000
343	C8H131-5,3-4,TA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000

344	C8H131-5, 3, TA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
345	C8H131-5, 3, SA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
346	C8H131-5, 3, PA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
347	C8H132-6, SA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
348	C8H132-6, PA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
349	C6H101-3, 3 !C6H10	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000
350	C8H131-5, 3-4, TAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
351	C8H131-5, 3, TAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
352	C8H131-5, 3, SAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
353	C8H131-5, 3, PAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
354	C8H132-6, SAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
355	C8H132-6, PAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000
356	C7H111-5, 3, 6P !C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000
357	C7H111-5, 1P !C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000
358	C4H64, 2-1OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
359	C4H63, 1-1OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
360	C4H63, 1-3OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
361	C4H63, 1-2OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
362	C4H5OH-13 !IC3H6CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
363	SQC4H7OHP-4 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
364	CY (CCCO) COH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
365	NC4KET21OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
366	C2H5CHOHCO !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
367	CH3COCOHCH3 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
368	C2H4COCH2OH !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
369	CH3COHCO !C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000
370	CH2COHCHO !C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000
371	SQC4H7OHP-4O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
372	PQC4H7OHS-3O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
373	SQC4H7OHS-4O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
374	C4H7O2-1, 3OOH !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
375	NC4KET13OH-2 !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
376	NC4KET24OH-1 !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
377	NC4KET24OH-3 !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
378	C4H6OHOOH1-4-3 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
379	C4H6OHOOH2-2-1 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
380	C4H6OHOOH1-3-4	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000

381	!NC4KET12 C4H6OHOOH1-2-3	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
382	!NC4KET12 HOCH2CHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
383	!CH3OCHO C4H71-4OOH	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
384	!C4H8O2-3 C4H71-4O2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
385	!TC3H6OCHO C4H61-3OOH4	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
386	!TC3H6OCHO C4H6O1-3OOH4	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
387	!TC3H6O2CHO C4H6O2-1OOH4	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
388	!TC3H6O2CHO HOCH2COCH2	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000
389	!CH3COCH2O HOCH2CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
390	!CH3CO2 HOCHCHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
391	!C3H5O PC3H4OH-3	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
392	!C3H5O PC3H4OH-1	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
393	!CH3COCH2O CH3COCHOH	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000
394	!CH3CO SC2H2OH	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
395	!PC4H9O PC4H8OH-1	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
396	!PC4H9O PC4H8OH-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
397	C4H7O1-4	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
398	!PC4H9O PC4H8OH-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
399	!PC4H9O SC4H8OH-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
400	!HOC*CCJ*O CH2COHCO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000
401	!TC3H6OCHO C4H72-2O2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
402	!TC3H6OCHO C4H71-1O2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
403	!TC3H6OCHO C4H71-2O2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
404	!NC3H7O C3H6OH1-1	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000
405	!C4H8OH-1O2 PC4H8OH-2O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
406	!C4H8OH-1O2 SC4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
407	!C5H10OOH1-2O2 C4H71-3OOCH3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
408	!C5H10OOH1-2O2 C4H72-1OOCH3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
409	C4H6	2	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000 !
410	C4H612	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
411	C4H6-2	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
412	C4H5-I	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
413	C4H5-N	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
414	C4H5-2	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
415	C4H4	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
416	C4H3-I	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
417	C4H3-N	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
418	C4H2	1	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000 !
419	C4H6O25	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
420	C2H3CHOCH2	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
421	FURAN	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
422	C4H6O23	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
423	CH2CHCHCHO	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
424	H2C4O	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
425	NC3H7CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000 !

426	NC3H7CO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
427	C3H6CHO-1	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
428	C3H6CHO-2	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
429	C3H6CHO-3	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
430	SC3H5CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
431	SC3H5CO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
432	C2H5COCH3	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
433	C2H5COCH2	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
434	CH2CH2COCH3	2	440.584	5.040	0.000	0.000	0.000	!
435	CH3CHCOCH3	2	440.584	5.040	0.000	0.000	0.000	!
436	C2H3COCH3	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
437	CH3CHOOCH3	2	546.562	5.698	0.000	0.000	0.000	!
438	CH2CHOOHCOCH3	2	546.562	5.698	0.000	0.000	0.000	!
439	C2H5CHCO	2	436.950	5.016	0.000	0.000	0.000	!
440	IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000	!
441	C5H10-1	2	386.200	5.489	0.400	0.000	1.000	!
442	C5H81-3	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
443	C5H901-3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
444	BC5H10	2	391.400	5.550	0.000	0.000	1.000	!
445	CC5H9-A	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
446	CC5H9-B	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
447	AC5H90-C	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
448	CC5H90-B	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
449	AC5H10	2	386.600	5.532	0.500	0.000	1.000	!
450	AC5H9-A2	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
451	AC5H9-C	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
452	AC5H9-D	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
	!C5H91-3							
453	B2E2M10J	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
	!C5H901-3							
454	B13DE2M	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
	!C5H81-3							
455	B13DE2MJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
	!C5H7							
456	B12DE3M	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
	!C5H81-3							
457	B2E3M10J	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
	!C5H901-3							
458	TC4H8CHO	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
459	O2C4H8CHO	2	588.531	5.942	0.000	0.000	0.000	!
460	O2HC4H8CO	2	588.531	5.942	0.000	0.000	0.000	!
461	C6H101-5	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000	
	!C6H10							
462	C6H9-A	2	346.876	5.564	0.000	0.000	1.000	!
463	H15DE25DM	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	
	!C6H5OOH							
464	H15DE25DM-S	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
	!O2CH2OCH2O2H							
465	H15DE25DM-A	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
	!O2CH2OCH2O2H							
466	H15DE25DM-AO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
	!C4H8OOH1-2O2							
467	H15DE25DM-SO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
	!C4H8OOH1-2O2							
468	H15DE2M-T	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	
	!C6H5OH							
469	IC4H7CHO	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
470	L-C6H4	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000	!
471	C-C6H4	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	!
472	C6H3	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
473	C6H2	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
474	C6H6	2	468.500	5.230	0.000	10.300	1.000	!
475	FULVENE	2	468.500	5.230	0.000	0.000	1.000	!
476	C6H5	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000	!
477	C6H5OO	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	!
478	C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	!
479	C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!

480	C6H5O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
481	C6H4OH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	!
482	OC6H4OH	2	621.100	5.640	0.000	0.000	1.000	!
483	O-C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
484	P-C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
485	O-OC6H5OJ	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
486	P-OC6H5OJ	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
487	P-C6H3O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
488	C5H6	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
489	C5H5	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
490	C5H6-L	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
491	C#CCVCCJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
492	C5H7	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
493	CVCCJCVC	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
494	CVCCVCCJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
495	CVCCJCVCOH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
496	HOCVCCVO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000	!
497	CVCCVCCOH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
498	OC5H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
499	OC4H6O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
500	OC4H5O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
501	O2CCHOOJ	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500	!
502	HOCVCCJVO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000	!
503	C5H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
504	C5H5O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
505	C5H4OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
506	C5H4O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!
507	C5H3O	2	511.398	5.357	0.000	0.000	1.000	!
508	CJVCCVCCVO	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
509	CVCCVCCJVO	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
510	CJVCCVO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000	!
511	!C2H3CO							
511	AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	0.000	!
512	N2	1	97.530	3.621	0.000	1.760	4.000	!
513	HE	0	10.200	2.576	0.000	0.000	0.000	!
514	H2	1	38.000	2.920	0.000	0.790	280.000	!
515	H	0	145.000	2.050	0.000	0.000	0.000	!
516	O2	1	107.400	3.458	0.000	1.600	3.800	!
517	O	0	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	!
518	H2O	2	572.400	2.605	1.844	0.000	4.000	!
519	OH	1	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	!
520	OHV	1	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	!
521	H2O2	2	107.400	3.458	0.000	0.000	3.800	!
522	HO2	2	107.400	3.458	0.000	0.000	1.000	!
523	CO	1	98.100	3.650	0.000	1.950	1.800	!
524	CO2	1	244.000	3.763	0.000	2.650	2.100	!
525	HOCO	2	498.000	3.590	0.000	0.000	2.000	!
526	CH4	2	141.400	3.746	0.000	2.600	13.000	!
527	CH3	1	144.000	3.800	0.000	0.000	0.000	!
528	CH2	1	144.000	3.800	0.000	0.000	0.000	!
529	CH2 (S)	1	144.000	3.800	0.000	0.000	0.000	!
530	C	0	71.400	3.298	0.000	0.000	0.000	!
531	CH	1	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	!
532	CHV	1	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000	!
533	CH3O2H	2	481.800	3.626	0.000	0.000	1.000	!
534	CH3O2	2	481.800	3.626	0.000	0.000	1.000	!
535	CH2O2H	2	238.400	3.496	0.000	0.000	1.500	!
536	CH3OH	2	481.800	3.626	0.000	0.000	1.000	!
537	CH3O	2	417.000	3.690	1.700	0.000	2.000	!
538	CH2OH	2	417.000	3.690	1.700	0.000	2.000	!
539	CH2O	2	498.000	3.590	0.000	0.000	2.000	!
540	HCO	2	498.000	3.590	0.000	0.000	0.000	!
541	HCOH	2	498.000	3.590	0.000	0.000	1.000	!
542	HO2CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000	!
543	HOCH2O2H	2	481.800	3.626	1.700	0.000	1.000	!
544	HOCH2O2	2	481.800	3.626	1.700	0.000	1.000	!
545	OCH2O2H	2	481.800	3.626	1.700	0.000	1.000	!
546	HOCH2O	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500	!
547	O2CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000	!
548	HOCHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000	!
549	OCHO	2	498.000	3.590	0.000	0.000	2.000	!
550	C2H6	2	247.500	4.350	0.000	0.000	1.500	!
551	C2H5	2	247.500	4.350	0.000	0.000	1.500	!

552	C2H5O2H	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
553	C2H5O2	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
554	C2H4	2	238.400	3.496	0.000	0.000	1.500 !
555	C2H3	2	265.300	3.721	0.000	0.000	1.000 !
556	CHOCHO	1	440.200	4.010	0.000	0.000	2.000 !
557	C2H3OOH	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
558	C2H3OO !CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
559	CHCHO !HCCOH	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
560	C2H2	1	265.300	3.721	0.000	0.000	2.500 !
561	C2H	1	265.300	3.721	0.000	0.000	2.500 !
562	H2CC	2	209.000	4.100	0.000	0.000	2.500 !
563	C2H5OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
564	C2H5O	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
565	PC2H4OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
566	SC2H4OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
567	O2C2H4OH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
568	C2H4O2H	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
569	C2H4O1-2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
570	C2H3O1-2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
571	CH3CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
572	CH3CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
573	CH2CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
574	O2CH2CHO	2	275.049	5.428	0.000	0.000	1.000 !
575	HO2CH2CO	2	279.007	5.505	1.300	0.000	1.000 !
576	C2H3OH	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
577	C2H2OH	2	224.700	4.162	0.000	0.000	1.000 !
578	CH2CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
579	HCCO	2	150.000	2.500	0.000	0.000	1.000 !
580	HCCOH	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
581	CH3CO3H	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
582	CH3CO3	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
583	CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000 !
584	CH3OCH3	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
585	CH3OCH2	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
586	CH3OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
587	CH3OCH2O2	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
588	CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
589	O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
590	HO2CH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
591	OCH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
592	HOCH2OCO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
593	CH3OCH2O	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
594	CH3OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
595	CH3OCO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
596	CH2OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000 !
597	C3H8	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
598	IC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
599	NC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000	1.000 !
600	NC3H7O2H	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
601	NC3H7O2	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
602	IC3H7O2H	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
603	IC3H7O2	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
604	NC3H7O	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000 !
605	IC3H7O	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
606	C3H6OOH1-2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
607	C3H6OOH1-3	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
608	C3H6OOH2-1	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
609	C3H6OOH1-2O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
610	C3H6OOH1-3O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
611	C3H6OOH2-1O2	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
612	C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000 !
613	C3KET13	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000 !
614	C3H51-2,3OOH	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
615	C3H52-1,3OOH	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
616	C3H5O1-2OOH-3 !C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
617	C3H5O1-3OOH-2 !C3KET12	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
618	C3H6O1-2	2	403.600	4.968	2.000	0.000	1.000 !
619	C3H6O1-3	2	403.600	4.968	2.000	0.000	1.000 !
620	C3H6	2	307.800	4.140	0.000	0.000	1.000 !

621	C3H5-A	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000	!
622	C3H5-S	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000	!
623	C3H5-T	2	316.000	4.220	0.000	0.000	1.000	!
624	CC3H6 !C3H6	2	307.800	4.140	0.000	0.000	1.000	
625	C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000	!
626	CH2CHOCH2 !C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000	
627	CH3CHCHO	2	387.860	4.687	0.000	0.000	0.000	!
628	AC4H7OOH	2	330.435	5.741	0.000	0.000	1.000	!
629	C3H6OH1-2	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000	!
630	CH3CHCO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000	!
631	AC3H5OOH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000	!
632	C3H6OH2-1	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000	!
633	HOC3H6O2 !1109	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000	
634	SC3H5OH	2	304.276	5.450	0.000	0.000	1.000	!
635	IC3H5OH	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000	!
636	C3H5OH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000	!
637	CH2CCH2OH	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000	!
638	C3H4-P	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
639	C3H4-A	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
640	C3H3	1	324.800	4.290	0.000	0.000	1.000	!
641	CC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000	1.000	!
642	C3H2	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000	!
643	H2CCC (S)	2	265.300	3.721	0.000	0.000	1.000	!
644	C3H2 (S)	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000	!
645	C3H2C	1	290.616	4.368	0.000	0.000	1.000	!
646	PC3H4OH-2	2	300.783	5.377	0.000	0.000	1.000	!
647	SC3H4OH	2	298.893	5.345	0.000	0.000	1.000	!
648	C3H3O	2	301.263	5.055	0.000	0.000	1.000	!
649	C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000	!
650	C2HCHO	2	343.033	4.884	0.000	0.000	1.000	!
651	C2H5CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000	!
652	C2H5CO	2	424.600	4.820	0.000	0.000	1.000	!
653	CH2CH2CHO	2	424.600	4.820	0.000	0.000	1.000	!
654	C2H3CHO	2	428.800	4.958	2.900	0.000	1.000	!
655	C2H3CO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000	!
656	CH3COCH3	2	435.500	4.860	0.000	0.000	1.000	!
657	CH3COCH2	2	435.500	4.860	0.000	0.000	1.000	!
658	CH3COCH2O2	2	502.115	5.429	0.000	0.000	0.000	!
659	CH3COCH2O	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000	!
660	C3KET21	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
661	C4H10	2	350.900	5.206	0.000	0.000	1.000	!
662	PC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
663	SC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000	!
664	PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
665	SC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
666	PC4H9O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
667	SC4H9O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
668	PC4H9O2H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
669	SC4H9O2H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
670	C4H8OOH1-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
671	C4H8OOH1-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
672	C4H8OOH1-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
673	C4H8OOH2-1	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
674	C4H8OOH2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
675	C4H8OOH2-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
676	C4H8O1-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
677	C4H8O1-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
678	C4H8O1-4	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
679	C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
680	C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
681	C4H8OOH1-3O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
682	C4H8OOH1-4O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
683	C4H8OOH2-1O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
684	C4H8OOH2-3O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
685	C4H8OOH2-4O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
686	C4H71-2,4OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
687	C4H72-1,3OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
688	C4H72-1,4OOH	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	

689	!C4H8OOH1-2O2 C4H71-2,3OOH	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
690	!C4H8OOH1-2O2 C4H701-3OOH-4 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
691	C4H701-3OOH-2 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
692	C4H701-2OOH-4 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
693	C4H701-4OOH-2 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
694	C4H701-2OOH-3 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
695	C4H702-3OOH-1 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
696	C4H72-1OOH !C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
697	NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
698	NC4KET13	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
699	NC4KET14	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
700	NC4KET21	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
701	NC4KET23	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
702	NC4KET24	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
703	C4H71-3OOH !C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
704	C4H71-3,4OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
705	C4H72-3,4OOH !C4H8OOH1-2O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
706	HO2CH2CHO !O2CH2CHO	2	275.049	5.428	0.000	0.000	1.000
707	IC4H10	2	335.700	5.208	0.100	0.000	1.000 !
708	IC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000 !
709	TC4H9	2	352.000	5.240	0.000	0.000	1.000 !
710	TC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
711	IC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
712	IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
713	IC3H7CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
714	IC3H7CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
715	IC3H6CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
716	TC3H6CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
717	IC3H5CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
718	TC3H6O2CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
719	IC3H5O2HCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
720	TC3H6O2HCO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
721	TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
722	IC3H6CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
723	IC3H5CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
724	IC3H4CHO-A !IC3H5CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
725	SC4H7OH-I !IC4H8O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
726	IC4H9O2	2	502.252	5.430	0.000	0.000	0.000 !
727	TC4H9O2	2	502.252	5.430	0.000	0.000	0.000 !
728	IC4H8O2H-I	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
729	IC4H8O2H-T	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
730	TC4H8O2H-I	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
731	CC4H8O	2	444.197	5.063	0.000	0.000	0.000 !
732	IC4H8OOH-IO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
733	IC4H8OOH-TO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
734	TC4H8OOH-IO2	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
735	IC4KETII	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
736	IC4KETIT	2	549.655	5.716	0.000	0.000	0.000 !
737	TIC4H7Q2-I	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
738	IIC4H7Q2-I	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
739	IIC4H7Q2-T	2	600.078	6.009	0.000	0.000	0.000 !
740	IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000 !
741	IC4H9O2H	2	505.540	5.450	0.000	0.000	0.000 !
742	TC4H9O2H	2	505.540	5.450	0.000	0.000	0.000 !
743	IC4H8	2	344.500	5.089	0.500	0.000	1.000 !
744	IC4H7	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000 !
745	IC4H7-I1	2	380.022	4.633	0.000	0.000	0.000 !
746	IC4H7O2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000

747	!TC3H6OCHO IC4H6OOH-I	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
748	!TC3H6OCHO CCYCCOOC-T1	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
749	!TC3H6OCHO C2CYCOOC-I1	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
750	!TC3H6OCHO IC4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
751	!IC3H6CO CVCYCCOC	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
752	!IC3H6CO CCYC2OCO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
753	!TC3H6OCHO CCYCCOOC-I2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
754	!TC3H6OCHO CHOIC3H6O	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
755	!TC3H6OCHO IC3H5OOCH2	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
756	!TC3H6OCHO CCYCCO-T1	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
757	!C3H5O IC4H8OH-IT	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
758	!PC4H9O IC4H8OH-TI	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
759	!PC4H9O IC4H7OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
760	IC4H8OH	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
761	IC4H6OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000 !
762	TQJC4H8OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
763	!C4H8OH-1O2 TQC4H8OI	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
764	!C4H8OH-1O2 QC4H7OHP	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
765	!C4H8OH-1O2 TQC4H7OHI	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
766	!C4H8OH-1O2 CCY (CCO) COH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
767	!IC4H7OOH C2CY (COC) OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
768	!IC4H7OOH IQJC4H8OH	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
769	!C4H8OH-1O2 IC3H6OHCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
770	!IC4H7OOH IQC4H8OT	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
771	!C4H8OH-1O2 IQC4H7OHT	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
772	!C4H8OH-1O2 CCY (CCOC) OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
773	!IC4H7OOH CH2COHCH2OOH	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000
774	!C3KET12 TC3H6OH	2	459.500	5.036	1.700	0.000	1.000 !
775	!C5H10OOH1-2O2 TQC4H7OHIO2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
776	!C5H10OOH1-2O2 TQC4H7OHTO2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
777	!C5H10OOH1-2O2 TQC4H7OHIQ-I	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
778	!C5H10OOH1-2O2 TQC4H7OHIQ-P	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
779	!C5H10OOH1-2O2 IC3H5COHQ	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
780	!NC4KET12 CH2CQCOHQ	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
781	!C4H8OOH1-2O2 IC3H5Q	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000
782	!AC3H5OOH COHQCYC (COC)	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
783	!IC4H6Q2-II QCYC (CCOC) OH	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
784	!IC4H6Q2-II HOCOCQ (CH3) 2	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
785	!IC4H6Q2-II IQC4H7OHTO2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000

786	!C5H10OOH1-2O2 IQC4H8OTQ-I	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
787	!C5H10OOH1-2O2 IQC4H7OHTQ-P	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
788	!C5H10OOH1-2O2 CHOC (CH3) OHCH2Q !IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
789	!C4H8OOH1-2O2 CO (CH2OOH) 2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
790	!C3H3O2H CH3COCHO	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000
791	!C4H7O IC3H5OCH2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
792	!C5H10OOH1-2O2 IC4H7OOCH3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
793	!C5H10OOH1-2O2 IC4H7OOIC4H7	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
794	C4H8-1	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000 !
795	C4H8-2	2	355.000	4.650	0.000	0.000	1.000 !
796	C4H71-1	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
797	C4H71-2	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
798	C4H71-3	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
799	C4H71-4	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
800	C4H72-2	2	357.100	4.720	0.000	0.000	1.000 !
801	C4H71-O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
802	!PC4H9O PC4H8OH-2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
803	!PC4H9O SC4H8OH-1	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
804	!PC4H9O SC4H8OH-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
805	!IC4H8O C4H71-3OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
806	!IC4H8O C4H71-4OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
807	!IC4H8O C4H71-1OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
808	!IC4H8O C4H71-2OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
809	!IC4H8O C4H72-1OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
810	!IC4H8O C4H72-2OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
811	!C4H8OH-1O2 SQC4H8OP	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
812	!C4H8OH-1O2 PQC4H8OS	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
813	!C4H8OH-1O2 PQC4H7OHS-3	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
814	!IC4H7OOH NC4KET12OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
815	!C4H8OH-1O2 SQC4H7OHS-4	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
816	!C4H8OH-1O2 SQC4H8OS	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
817	!IC4H7OOH NC4KET23OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
818	!C4H8OH-1O2 SC4H8OH-3O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
819	!IC4H7OOH CCY (COCC) OH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
820	!IC4H7OOH C4H7O2-1	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
821	!C4H6 C4H6-1	2	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000
822	!SC3H5OCH2 AC3H5OCH2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
823	C5H10-2	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
824	CC5H10	2	437.102	5.017	0.000	0.000	0.000 !
825	!C6H10 C6H10D24	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000
826	C5H91-3	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !
827	C5H92-4	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000 !

828	C5H92-5	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	!
829	C5H91-4	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	!
830	C5H91-5	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	!
831	C5H902-4	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
832	SC3H5OCH2-1 !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
833	C8H141-5,3-4 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	
834	C8H141-5,3 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	
835	C8H142-6 !C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	
836	C8H131-5,3-4,TA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
837	C8H131-5,3,TA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
838	C8H131-5,3,SA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
839	C8H131-5,3,PA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
840	C8H132-6,SA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
841	C8H132-6,PA !O2CH2OCH2O2H	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
842	C6H101-3,3 !C6H10	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000	
843	C8H131-5,3-4,TAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
844	C8H131-5,3,TAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
845	C8H131-5,3,SAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
846	C8H131-5,3,PAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
847	C8H132-6,SAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
848	C8H132-6,PAO !NC7KET12	2	581.300	6.506	2.000	0.000	1.000	
849	C7H111-5,3,6P !C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	
850	C7H111-5,1P !C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	
851	C4H64,2-1OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
852	C4H63,1-1OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
853	C4H63,1-3OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
854	C4H63,1-2OH !C4H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
855	C4H5OH-13 !IC3H6CO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
856	SQC4H7OHP-4 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000	
857	CY(CCCO)COH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
858	NC4KET21OH !IC4H7OOH	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
859	C2H5CHOHCO !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
860	CH3COCOHCH3 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
861	C2H4COCH2OH !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000	
862	CH3COHCO !C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000	
863	CH2COHCHO !C3H3O2H	2	301.658	5.310	0.000	0.000	1.000	
864	SQC4H7OHP-4O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
865	PQC4H7OHS-3O2 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
866	SQC4H7OHS-4O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	

867	!C5H10OOH1-2O2 C4H7O2-1,3OOH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
868	!C5H10OOH1-2O2 NC4KET13OH-2	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
869	!IC4H6Q2-II NC4KET24OH-1	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
870	!IC4H6Q2-II NC4KET24OH-3	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000
871	C4H6OHOOH1-4-3 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
872	C4H6OHOOH2-2-1 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
873	C4H6OHOOH1-3-4 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
874	C4H6OHOOH1-2-3 !NC4KET12	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000
875	HOCH2CHO !CH3OCHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000
876	C4H71-4OOH !C4H8O2-3	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
877	C4H71-4O2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
878	C4H61-3OOH4 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
879	C4H6O1-3OOH4 !TC3H6O2CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
880	C4H6O2-1OOH4 !TC3H6O2CHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
881	HOCH2COCH2 !CH3COCH2O	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000
882	HOCH2CO !CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
883	HOCHCHO !CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
884	PC3H4OH-3 !C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
885	PC3H4OH-1 !C3H5O	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
886	CH3COCHOH !CH3COCH2O	2	447.639	5.086	0.000	0.000	0.000
887	SC2H2OH !CH3CO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	2.000
888	PC4H8OH-1 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
889	PC4H8OH-3 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
890	C4H7O1-4	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
891	PC4H8OH-4 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
892	SC4H8OH-2 !PC4H9O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
893	CH2COHCO !HOC*CCJ*O	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000
894	C4H72-2O2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
895	C4H71-1O2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
896	C4H71-2O2 !TC3H6OCHO	2	436.400	5.352	0.000	0.000	1.000
897	C3H6OH1-1 !NC3H7O	2	481.500	4.997	1.700	0.000	1.000
898	PC4H8OH-2O2 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
899	SC4H8OH-1O2 !C4H8OH-1O2	2	502.200	5.356	1.800	0.000	1.000
900	C4H71-3OOCH3 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
901	C4H72-1OOCH3 !C5H10OOH1-2O2	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000
902	C4H6	2	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000 !
903	C4H612	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
904	C4H6-2	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !

905	C4H5-I	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
906	C4H5-N	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
907	C4H5-2	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
908	C4H4	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
909	C4H3-I	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
910	C4H3-N	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
911	C4H2	1	357.000	4.720	0.000	0.000	1.000	!
912	C4H6O25	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
913	C2H3CHOCH2	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
914	C4H4O	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
915	C4H6O23	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
916	CH2CHCHCHO	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
917	H2C4O	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	!
918	NC3H7CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
919	NC3H7CO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
920	C3H6CHO-1	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
921	C3H6CHO-2	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
922	C3H6CHO-3	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
923	SC3H5CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
924	SC3H5CO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	!
925	C2H5COCH3	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
926	C2H5COCH2	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
927	CH2CH2COCH3	2	440.584	5.040	0.000	0.000	0.000	!
928	CH3CHCOCH3	2	440.584	5.040	0.000	0.000	0.000	!
929	C2H3COCH3	2	454.000	5.413	3.300	0.000	1.000	!
930	CH3CHOOCH3	2	546.562	5.698	0.000	0.000	0.000	!
931	CH2CHOOHCOCH3	2	546.562	5.698	0.000	0.000	0.000	!
932	C2H5CHCO	2	436.950	5.016	0.000	0.000	0.000	!
933	IC4H6Q2-II	2	597.176	5.992	0.000	0.000	0.000	!
934	C5H10-1	2	386.200	5.489	0.400	0.000	1.000	!
935	C5H81-3	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!
936	C5H9O1-3	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	!
937	BC5H10	2	391.400	5.550	0.000	0.000	1.000	!
938	CC5H9-A	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
939	!C5H91-3 CC5H9-B	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
940	!C5H91-3 AC5H9O-C	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
941	!C5H91-3 CC5H9O-B	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
942	!C5H91-3 AC5H10	2	386.600	5.532	0.500	0.000	1.000	!
943	!C5H91-3 AC5H9-A2	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
944	!C5H91-3 AC5H9-C	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
945	!C5H91-3 AC5H9-D	2	396.800	5.458	0.000	0.000	1.000	
946	!C5H91-3 B2E2M1OJ	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
947	!C5H91-3 B13DE2M	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
948	!C5H81-3 B13DE2MJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
949	!C5H7 B12DE3M	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
950	!C5H81-3 B2E3M1OJ	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000	
951	!C5H9O1-3 TC4H8CHO	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!
952	O2C4H8CHO	2	588.531	5.942	0.000	0.000	0.000	!
953	O2HC4H8CO	2	588.531	5.942	0.000	0.000	0.000	!
954	C6H101-5	2	337.788	5.608	0.000	0.000	1.000	
955	!C6H10 C6H9-A	2	346.876	5.564	0.000	0.000	1.000	!
956	H15DE25DM	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	
957	!C6H5OOH H15DE25DM-S	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
958	!O2CH2OCH2O2H H15DE25DM-A	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	
959	!O2CH2OCH2O2H H15DE25DM-AO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	
960	!C4H8OOH1-2O2 H15DE25DM-SO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000	

	!C4H8OOH1-202						
961	H15DE2M-T	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000
	!C6H5OH						
962	IC4H7CHO	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000 !
963	L-C6H4	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000 !
964	C-C6H4	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000 !
965	C6H3	2	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000 !
966	C6H2	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
967	C6H6	2	468.500	5.230	0.000	10.300	1.000 !
968	FULVENE	2	468.500	5.230	0.000	0.000	1.000 !
969	C6H5	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000 !
970	C6H5OO	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000 !
971	C6H5OOH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000 !
972	C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
973	C6H5O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
974	C6H4OH	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000 !
975	OC6H4OH	2	621.100	5.640	0.000	0.000	1.000 !
976	O-C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
977	P-C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
978	O-OC6H5OJ	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
979	P-OC6H5OJ	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
980	P-C6H3O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
981	C5H6	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
982	C5H5	1	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
983	C5H6-L	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
984	C#CCVCCJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
985	C5H7	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
986	CVCCJCVC	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
987	CVCCVCCJ	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
988	CVCCJCVCOH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
989	HOCVCCVO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
990	CVCCVCCOH	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
991	OC5H7O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
992	OC4H6O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
993	OC4H5O	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000 !
994	O2CCHOOJ	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500 !
995	HOCVCCJVO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000 !
996	C5H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
997	C5H5O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
998	C5H4OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
999	C5H4O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000 !
1000	C5H3O	2	511.398	5.357	0.000	0.000	1.000 !
1001	CJVCCVCCVO	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
1002	CVCCVCCJVO	2	523.200	5.664	1.700	0.000	1.000 !
1003	CJVCCVO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	1.000
	!C2H3CO						
1004	B1M2	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000
1005	B2M2	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000
1006	B1M3	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000
1007	RIBALDG	2	329.641	5.574	0.000	0.000	1.000
1008	RIBALDB	2	303.408	5.750	0.000	0.000	1.000
1009	RIBALDGOO	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1010	RIBALDBOO	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1011	QIBALDG2	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1012	QIBALDG3	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1013	QIBALDB3	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1014	ZIBALDG2	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1015	ZIBALDG3	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1016	ZIBALDB3	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1017	KIA4G2	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1018	KIA4G3	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1019	ETIBALDGB	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1020	ETIBALDGG	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1021	RALD4X	2	329.641	5.574	0.000	0.000	1.000
1022	RALD4OOX	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1023	QA4X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1024	ZA4X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1025	ETALD4X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1026	KEA4X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1027	RALD5XOO	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1028	QA5X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1029	ZA5X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000
1030	KEA5X	2	285.971	6.560	0.000	0.000	1.000

1031							
1032							
1033							
1034							
1035							
1036							
1037	RALD3BG	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
1038	CH3CHOOCHOL	2	407.800	4.140	0.000	0.000	1.000
1039	CH2OOHCHOOCHOL	2	407.800	4.140	0.000	0.000	1.000
1040	CH2OOCHOOHCHOL	2	407.800	4.140	0.000	0.000	1.000
1041	CH2CHOOHCHOL	2	407.800	4.140	0.000	0.000	1.000
1042	KEA3B3L	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
1043	ETC3H4O2	2	411.000	4.820	0.000	0.000	
	1.000						
1044	DIALLYL	2	426.300	5.510	0.000	0.000	
	1.000						
1045	RC6H9A	2	426.300	5.510	0.000	0.000	1.000
1046	RYC6H9	2	426.300	5.510	0.000	0.000	1.000
1047	LC5H8	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000
1048	CH3C6H4	2	495.300	5.680	0.000	0.000	1.000
1049	O2C2H4O2H	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500
1050	CH2OHCHO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
1051	DIMEPTD	2	457.800	6.173	0.300	0.000	1.000
1052	! Copy from cpes						
1053	AC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000	
	0.000						
1054	CH3CO2H	2	436.000	3.970	0.000	0.000	
	2.000						
1055	CH2COH2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	
	2.000						
1056	CH3COCH3	2	411.000	4.820	0.000	0.000	
	1.000						
1057	C2H3CHO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	
	1.000						
1058	C2H5CHO	2	411.000	4.820	0.000	0.000	
	1.000						
1059	C4H9CHO	2	500.000	5.640	0.000	0.000	
	1.000						
1060	CH2CHCH2	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
	1.000						
1061	CHCHCH3	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
	1.000						
1062	CH2CCH3	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
	1.000						
1063	AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	
	0.000						
1064	C6H5CH2OH	2	622.400	5.530	0.000	0.000	
	1.000						
1065	C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
	1.000						
1066	C6H6	2	468.500	5.230	0.000	10.30	
	1.000						
1067	C6H5CHO	2	622.400	5.530	0.000	0.000	
	1.000						
1068	C6H5C2H4C6H5	2	783.800	6.640	0.000	0.000	
	1.000						
1069	NC4H8	2	355.000	4.650	0.000	0.000	
	1.000						
1070	C4H6	2	357.000	5.180	0.000	0.000	
	1.000						
1071	C	0	71.400	3.298	0.000	0.000	
	0.000						
1072	C12H8	2	689.800	6.500	0.000	0.000	1.000
1073	C12H9	2	676.5	6.31	0.00	20.00	1.000
	!						
1074	C2H	1	209.000	4.100	0.000	0.000	
	2.500						
1075	C2H2	1	209.000	4.100	0.000	0.000	
	2.500						
1076	C2H4	2	280.800	3.971	0.000	0.000	
	1.500						
1077	C2H5	2	252.300	4.302	0.000	0.000	
	1.500						

1078	C2H6 1.500	2	252.300	4.302	0.000	0.000
1079	C3H2 1.000	2	209.000	4.100	0.000	0.000
1080	C3H3 1.000	2	252.000	4.760	0.000	0.000
1081	C3H6 1.000	2	307.800	4.140	0.000	0.000
1082	C3H8 1.000	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1083	NC3H7O 1.000	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1084	C3H7OOH 1.000	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1085	C4H2 1.000	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1086	C4H3 1.000	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1087	C4H4 1.000	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1088	C4H5 1.000	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1089	CH2C3H5 1.000	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1090	SC4H7 1.000	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1091	C4H9OOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1092	CYC5H4O 1.000	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1093	C5H7 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1094	NC5H11OOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1095	C6H5 1.000	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1096	C6H5O 1.000	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1097	LC6H6 1.000	2	412.300	5.349	0.000	0.000
1098	C6H10-ONE 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1099	C7H7 1.000	2	495.300	5.680	0.000	0.000
1100	NC7H15OOH 1.000	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1101	CYC5H7 1.000	1	408.000	5.200	0.000	0.000
1102	CYC5H8 1.000	1	408.000	5.200	0.000	0.000
1103	CYC6H8 1.000	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1104	CYC6H12 1.000	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1105	CYC6H10 1.000	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1106	CH 0.000	1	80.000	2.750	0.000	0.000
1107	CH2 0.000	1	144.000	3.800	0.000	0.000
1108	CH2CO 2.000	2	436.000	3.970	0.000	0.000
1109	CH2O 2.000	2	498.000	3.590	0.000	0.000
1110	CH2OH 2.000	2	417.000	3.690	1.700	0.000
1111	CH2S 0.000	1	144.000	3.800	0.000	0.000
1112	CH3 0.000	1	144.000	3.800	0.000	0.000
1113	CH3CO 2.000	2	436.000	3.970	0.000	0.000
1114	CH3O 2.000	2	417.000	3.690	1.700	0.000

1115	2.000 CH3OH	2	481.800	3.626	0.000	0.000
1116	1.000 CH4	2	141.400	3.746	0.000	2.600
1117	13.000 CO	1	98.100	3.650	0.000	1.950
1118	1.800 CO2	1	244.000	3.763	0.000	2.650
1119	2.100 C5H6	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1120	1.000 MCPTD	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1121	1.000 CRESOL	2	621.100	5.640	0.000	0.000
1122	1.000 CSOLID	2	2302.	12.91	0.00	45.00
1123	1.000 NC10H20	2	540.980	7.150	0.000	0.000
1124	1.000 C6H5CH2C6H5	2	712.6	6.890	0.000	0.000
1125	1.000 DIPE	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1126	1.000 MTBE-O	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1127	1.000 CH3OCH3	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1128	1.000 CH3CH3-C5H6	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1129	1.000 C6H5C2H5	2	523.600	5.960	0.000	0.000
1130	1.000 NC7H14	2	459.980	6.310	0.000	0.000
1131	1.000 NC6H12	2	412.300	5.349	0.000	0.000
1132	1.000 C5H9CHO	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1133	1.000 ETBE	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1134	1.000 NEOC5H10-O	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1135	1.000 C4H8O	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1136	1.000 NC5H10-O	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1137	1.000 NC7H14O	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1138	1.000 IC8H16O	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1139	1.500 C2H5OH	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1140	1.500 C2H5OO	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1141	1.500 C2H5OOH	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1142	1.500 C2H4O	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1143	1.000 C6H5C2H	2	534.300	5.710	0.770	0.000
1144	1.000 BIPHENYL	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1145	1.000 C14H10	2	772.0	6.960	0.000	38.80
1146	1.000 C6H5OH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1147	1.000 FLUORENE	2	712.6	6.890	0.000	0.000
1148	1.000 C10H8	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1149	1.500 CH2OHCH2OH	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1150	0.000 H	0	145.000	2.050	0.000	0.000

1151	H2 280.000	1	38.000	2.920	0.000	0.790	
1152	H2O 4.000	2	572.400	2.605	1.844	0.000	
1153	H2O2 3.800	2	107.400	3.458	0.000	0.000	
1154	HCCO 1.000	2	150.000	2.500	0.000	0.000	
1155	HCO 0.000	2	498.000	3.590	0.000	0.000	
1156	HCO3 0.000	2	498.000	3.590	0.000	0.000	
1157	HE 0.000	0	10.200	2.576	0.000	0.000	
1158	HO2 1.000	2	107.400	3.458	0.000	0.000	
1159	IC4H8 1.000	2	355.000	4.650	0.000	0.000	
1160	IC3H7CHO 1.000	2	455.000	4.650	0.000	0.000	
1161	IC4H9P 1.000	2	352.000	5.240	0.000	0.000	
1162	IC4H9P-OO 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1163	IC4H9T 1.000	2	352.000	5.240	0.000	0.000	
1164	IC4H9T-OO 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1165	IC4H10 1.000	2	352.000	5.240	0.000	0.000	
1166	IC16H34 1.000	2	650.000	8.350	0.000	0.000	
1167	IC4H7 1.000	2	355.000	4.650	0.000	0.000	
1168	IC8H18 1.000	2	494.000	6.170	0.000	0.000	
1169	INDENE 1.000	2	588.6	5.960	0.650	0.000	
1170	IC3H7 1.000	2	303.400	4.810	0.000	0.000	
1171	IC3H7OH 1.000	2	468.300	4.760	0.000	0.000	
1172	IC3H7OO 1.000	2	468.300	4.760	0.000	0.000	
1173	IC3-QOOH 1.000	2	468.300	4.760	0.000	0.000	
1174	IC3-QOOH 1.000	2	468.300	4.760	0.000	0.000	
1175	IC5H10 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000	
1176	NEOC5-QOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1177	IC4-QOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1178	C3-QOOH 1.000	2	487.900	4.820	0.000	0.000	
1179	NC4-QOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1180	NC5-QOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1181	NC7-QOOH	2	559.980	6.310	0.000	0.000	1.000
1182	C7DIONE	2	559.980	6.310	0.000	0.000	1.000
1183	C7KETONE 1.000	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1184	IC8-QOOH 1.000	2	594.000	6.170	0.000	0.000	
1185	DME-QOOH 1.000	2	403.400	4.810	0.000	0.000	
1186	NC10-QOOH 1.000	2	640.980	7.150	0.000	0.000	
1187	NC12-QOOH 1.000	2	680.000	7.600	0.000	0.000	
1188	IC16-QOOH	2	750.000	8.350	0.000	0.000	

1189	1.000 MCYC6-OQOOH	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1190	1.000 MTBE-OQOOH	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1191	1.000 IC3H5CHO	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1192	1.000 MCYC6	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1193	2.000 CH3CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000
1194	2.000 CH3CO3	2	436.000	3.970	0.000	0.000
1195	1.000 C10H7CH3	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1196	2.000 CH3OO	2	417.000	3.690	1.700	0.000
1197	1.000 CH3OOH	2	481.800	3.626	0.000	0.000
1198	1.000 MTBE	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1199	4.000 N2	1	97.530	3.621	0.000	1.760
1200	1.000 C10H7OH	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1201	1.000 C10H7CHO	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1202	1.000 CH3C10H6OH	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1203	1.000 CH3C10H6O	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1204	1.000 NC4H9P	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1205	1.000 NC4H9S	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1206	1.000 NC4H10	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1207	1.000 NC10H22	2	540.980	7.150	0.000	0.000
1208	1.000 NC12H26	2	580.000	7.600	0.000	0.000
1209	1.000 NC5H12	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1210	1.000 NC7H16	2	459.980	6.310	0.000	0.000
1211	1.000 NEOC5H12	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1212	1.000 NC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1213	1.000 NC3H7OO	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1214	1.000 NC3-QOOH	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1215	1.000 NC3-OOQOOH	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1216	0.000 O	0	80.000	2.750	0.000	0.000
1217	3.800 O2	1	107.400	3.458	0.000	1.600
1218	0.000 OH	1	80.000	2.750	0.000	0.000
1219	1.000 IC8H16	2	494.000	6.170	0.000	0.000
1220	1.000 NC5H10	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1221	1.000 PC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000
1222	1.000 CH3CO3H	2	443.200	4.120	0.000	0.000
1223	1.000 HCO3H	2	443.200	4.120	0.000	0.000
1224	1.000 C3H6O	2	411.000	4.820	0.000	0.000

1225	C5H8 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1226	C16H10 1.000	2	834.9	7.240	0.000	45.00
1227	NC10-QOOH 1.000	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1228	NC12-QOOH 1.000	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1229	C2-QOOH 1.500	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1230	C2-OOQOOH 1.500	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1231	C2-OQOOH 1.500	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1232	NC4-QOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1233	NC5-QOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1234	NC7-QOOH 1.000	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1235	DME-QOOH 1.000	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1236	IC16-QOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1237	IC16T-QOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1238	IC8-QOOH 1.000	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1239	IC4P-QOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1240	IC4T-QOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1241	MCYC6-QOOH 1.000	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1242	MTBE-QOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1243	NEOC5-QOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1244	IC8T-QOOH 1.000	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1245	MCYC6T-QOOH 1.000	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1246	NC10H21 1.000	2	540.980	7.150	0.000	0.000
1247	NC10H21-OO 1.000	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1248	NC12H25 1.000	2	580.000	7.600	0.000	0.000
1249	NC12H25-OO 1.000	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1250	C2H4OH 1.500	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1251	CH2CHO 2.000	2	436.000	3.970	0.000	0.000
1252	CH3CHOH 1.500	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1253	NC4H9-OO 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1254	NC5H9 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1255	NC5H11 1.000	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1256	NC5H12OO 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1257	NC7H15 1.000	2	459.980	6.310	0.000	0.000
1258	NC7H15-OO 1.000	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1259	C12H7 1.000	2	693.1	6.47	0.00	18.00
1260	CH3COCH2 1.000	2	424.600	4.820	0.000	0.000
1261	C2H4CHO	2	424.600	4.820	0.000	0.000

1262	1.000 CYC6-OO	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1263	1.000 CYC6H11	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1264	1.000 CYC5H5	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1265	1.000 RDIPE	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1266	1.000 CH3OCH2	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1267	1.000 DME-OO	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1268	1.000 C6H4C2H	2	535.6	5.72	0.77	12.00
1269	1.000 RBIPHENYL	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1270	1.000 C14H9	2	772.0	6.96	0.00	38.80
1271	1.000 C10H7	2	630.4	6.18	0.00	16.50
1272	1.000 IC16H33-OO	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1273	1.000 IC16H33	2	650.000	8.350	0.000	0.000
1274	1.000 IC8H17	2	494.000	6.170	0.000	0.000
1275	1.000 IC8H17-OO	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1276	1.000 INDENYL	2	588.6	5.960	0.000	0.000
1277	1.000 RMCYC6-OO	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1278	1.000 RMCYC6	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1279	1.000 C10H7CH2	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1280	1.000 C10H6CH3	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1281	1.000 C6H4CH3	2	495.300	5.680	0.000	0.000
1282	1.000 RMTBE	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1283	1.000 MTBE-OO	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1284	1.000 C10H7O	2	630.400	6.180	0.000	0.000
1285	1.000 NEOC5H11	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1286	1.000 NEOC5H11-OO	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1287	1.000 C16H9	2	834.9	7.24	0.00	45.00
1288	1.000 C6H5C2H2	2	546.200	6.000	0.000	0.000
1289	1.000 RXYLENE	2	523.600	5.960	0.000	0.000
1290	1.000 C6H5C2H3	2	546.200	6.000	0.130	15.00
1291	1.000 TAME	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1292	1.000 TETRALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1293	1.000 DECALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1294	1.000 RDECALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1295	1.000 C7H8	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1296	1.000 C2H3	2	209.000	4.100	0.000	0.000
1297	1.000 XYLENE	2	523.600	5.960	0.000	0.000

1298	NC10-OOQOOH 1.000	2	640.980	7.150	0.000	0.000	
1299	NC12-OOQOOH 1.000	2	680.000	7.600	0.000	0.000	
1300	NC4-OOQOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1301	NC5-OOQOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1302	NC7-OOQOOH 1.000	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1303	DME-OOQOOH 1.000	2	403.400	4.810	0.000	0.000	
1304	IC16-OOQOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1305	IC16T-OOQOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1306	IC8-OOQOOH 1.000	2	594.000	6.170	0.000	0.000	
1307	IC4P-OOQOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1308	IC4T-OOQOOH 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1309	MCYC6-OOQOOH 1.000	2	595.300	5.680	0.430	12.30	
1310	MTBE-OOQOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1311	NEOC5-OOQOOH 1.000	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1312	MCYC6T-OOQOOH 1.000	2	595.300	5.680	0.430	12.30	
1313	NC16H34 1.000	2	650.000	8.350	0.000	0.000	
1314	NC16H33 1.000	2	650.000	8.350	0.000	0.000	
1315	NC16H33-OO 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1316	NC16-QOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1317	NC16-OOQOOH 1.000	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1318	NC16-OQOOH	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000
1319	BIN1A 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1320	BIN1AJ 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1321	BIN1B 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1322	BIN1BJ 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1323	BIN1C 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1324	BIN1CJ 1.000	2	951.685	8.471	0.000	0.000	
1325	BIN2A 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1326	BIN2AJ 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1327	BIN2B 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1328	BIN2BJ 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1329	BIN2C 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1330	BIN2CJ 1.000	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	
1331	BIN3A 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	
1332	BIN3AJ 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	
1333	BIN3B 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	
1334	BIN3BJ 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	

1335	BIN3C 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000
1336	BIN3CJ 1.000	2	1964.07	13.41	0.000	0.000
1337	BIN4A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1338	BIN4AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1339	BIN4B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1340	BIN4BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1341	BIN4C 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1342	BIN4CJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1343	BIN5A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1344	BIN5AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1345	BIN5B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1346	BIN5BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1347	BIN5C 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1348	BIN5CJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1349	BIN6A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1350	BIN6AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1351	BIN6B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1352	BIN6BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1353	BIN6C 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1354	BIN6CJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1355	BIN7A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1356	BIN7AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1357	BIN7B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1358	BIN7BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1359	BIN7C 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1360	BIN7CJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1361	BIN8A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1362	BIN8AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1363	BIN8B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1364	BIN8BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1365	BIN8C 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1366	BIN8CJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1367	BIN9A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1368	BIN9AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1369	BIN9B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1370	BIN9BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1371	BIN9C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000

1372	1.000 BIN9CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1373	1.000 BIN10A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1374	1.000 BIN10AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1375	1.000 BIN10B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1376	1.000 BIN10BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1377	1.000 BIN10C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1378	1.000 BIN10CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1379	1.000 BIN11A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1380	1.000 BIN11AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1381	1.000 BIN11B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1382	1.000 BIN11BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1383	1.000 BIN12A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1384	1.000 BIN12AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1385	1.000 BIN12B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1386	1.000 BIN12BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1387	1.000 BIN13A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1388	1.000 BIN13AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1389	1.000 BIN13B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1390	1.000 BIN13BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1391	1.000 BIN14A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1392	1.000 BIN14AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1393	1.000 BIN14B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1394	1.000 BIN14BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1395	1.000 BIN15A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1396	1.000 BIN15AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1397	1.000 BIN15B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1398	1.000 BIN15BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1399	1.000 BIN16A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1400	1.000 BIN16AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1401	1.000 BIN16B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1402	1.000 BIN16BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1403	1.000 BIN17A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1404	1.000 BIN17AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1405	1.000 BIN17B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1406	1.000 BIN17BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1407	1.000 BIN18A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000

1408	BIN18AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1409	BIN18B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1410	BIN18BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1411	BIN19A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1412	BIN19AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1413	BIN19B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1414	BIN19BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1415	BIN20A 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1416	BIN20AJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1417	BIN20B 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1418	BIN20BJ 1.000	2	2802.76	16.88	0.000	0.000
1419	CYC6-QOOH-2 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1420	CYC6-QOOH-3 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1421	CYC6-QOOH-4 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1422	CYC6-OOQOOH-2 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1423	CYC6-OOQOOH-3 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1424	CYC6-OOQOOH-4 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1425	CYC6-OQOOH-2 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1426	CYC6-OQOOH-3 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1427	CYC6-OQOOH-4 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1428	CYC6H10-O-12 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1429	CYC6H10-O-13 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1430	CYC6H10-O-14 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1431	C3H5OOH 1.000	2	407.800	4.140	0.000	0.000
1432	C5EN-OQOOH-34 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1433	C5EN-OQOOH-35 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1434	C5EN-OQOOH-43 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1435	C5EN-OQOOH-45 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1436	C5EN-OQOOH-53 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1437	C5EN-OQOOH-54 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1438	C5H8O 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1439	NC5H9-3 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1440	NC5H9-4 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1441	NC5H9-5 1.000	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1442	C3H5OO 1.000	2	407.800	4.140	0.000	0.000
1443	C5EN-OO-3 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1444	C5EN-OO-4	2	508.000	5.200	0.000	0.000

1445	1.000 C5EN-OO-5	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1446	1.000 C5EN-QOOH-34	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1447	1.000 C5EN-QOOH-35	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1448	1.000 C5EN-QOOH-43	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1449	1.000 C5EN-QOOH-45	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1450	1.000 C5EN-QOOH-53	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1451	1.000 C5EN-QOOH-54	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1452	1.000 C5EN-OOQOOH-34	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1453	1.000 C5EN-OOQOOH-35	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1454	1.000 C5EN-OOQOOH-43	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1455	1.000 C5EN-OOQOOH-45	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1456	1.000 C5EN-OOQOOH-53	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1457	1.000 C5EN-OOQOOH-54	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1458	1.000 C5H10-OH	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1459	1.000 C5H10-OHOO	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1460	1.0 NC3H7OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1461	1.0 N1C4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1462	1.0 N2C4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1463	1.0 CH3CH2CHOHCH2	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1464	1.0 CH3CH2CHOCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1465	1.0 CH3CH2COHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1466	1.0 CH3CHCHOHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1467	1.0 CH2CH2CHOHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1468	1.0 MEK	2	454.0000000	5.413000000	3.30	0.00
1469	1.0 TC4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1470	1.0 IC4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1471	1.0 CH3CH2CH2CH2O	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1472	1.0 C3H7CHO	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1473	1.0 CH3CH2CHOH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1474	1.0 CH3CHCH2OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1475	1.0 CH2CH2CH2OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1476	1.0 CH3CH2CH2O	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1477	1.00 CH3COHCH3	2	468.300000	4.760000000	0.00	0.00
1478	1.000 CH2CHOHCH3	2	468.300000	4.760	0.00	0.00
1479	1.0 CH3CH2CH2CHOH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1480	1.0 CH3CH2CHCH2OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88

1481	CH3CHCH2CH2OH 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1482	CH2CH2CH2CH2OH 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1483	RTC4H8OH 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1484	RTC4H9O 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1485	CH3CHCH2OCH3 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1486	CH3CHCH3CHOH 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1487	CH3CCH2OHCH3 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1488	CH2CHCH2OHCH3 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1489	C4H7OH 1.0	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88	
1490	C3H5OH 1.0	2	411.000	4.820	0.00	0.00	
1491	RCRESOLO 1.0	2	621.100	5.640	0.00	0.00	
1492	RCRESOLC 1.0	2	621.100	5.640	0.00	0.00	
1493	C10H10 1.0	2	630.400	6.180	0.00	16.50	
1494	BZFUL 1.0	2	630.400	6.180	0.00	16.50	
1495	ODECAL 1.0	2	630.400	6.180	0.00	16.50	
1496	RTETRALIN 1.0	2	630.400	6.180	0.00	16.50	
1497	RTETRAOO 1.0	2	630.400	6.180	0.00	16.50	
1498	TMBENZ 1.0	2	523.600	5.960	0.00	0.000	
1499	NPBENZ 1.0	2	495.300	5.680	0.430	12.30	
1500	RC9H11 1.0	2	523.600	5.960	0.00	0.000	
1501	C6H5OCH3 1.000	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
1502	MB !Revised	2	468.000	5.850	0.000	0.000	0.000
1503	RMBX 1.000	2	468.500	5.230	0.000	0.000	
1504	MCROT 1.000	2	468.500	5.230	0.000	0.000	
1505	MACRIL 1.000	2	430.100	5.833	0.000	0.000	
1506	RMP3 1.000	2	430.100	5.833	0.000	0.000	
1507	CH3OCO 1.000	2	395.000	4.037	1.300	0.000	
1508	ETMB583 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000	
1509	KEHYMB 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000	
1510	DIBZFUL 1.000	2	676.5	6.310	0.000	0.000	
1511	DIFENET 1.000	2	676.5	6.310	0.000	0.000	
1512	RMBOOX 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000	
1513	QMBOOX 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000	
1514	ZMBOOX 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000	
1515	KHDECA 1.000	2	630.400	6.180	0.000	16.50	
1516	QDECOOH 1.000	2	630.400	6.180	0.000	16.50	
1517	RDECOO	2	630.400	6.180	0.000	16.50	

1518	1.000 ZDECA	2	630.400	6.180	0.000	16.50		
1519	1.000 RMCROTA taken from MCROT	2	468.500	5.230	0.000	0.000	1.000	!RG
1520	MD taken from Herbi	2	604.4	7.305	1.7	0.0	1.000	!RG
1521	RMDX taken from Herbi	2	604.4	7.305	1.7	0.0	1.000	!RG
1522	CH3OCHO taken from CH3OC	2	395.000	4.037	1.300	0.000	1.000	!RG
1523	ETEROMD taken from KHY12	2	680.000	7.600	0.000	0.000	1.000	!RG
1524	MDKETO taken from KHY12	2	680.000	7.600	0.000	0.000	1.000	!RG
1525	C7H15COCHO taken from KEHY8	2	594.000	6.170	0.000	0.000	1.000	!RG
1526	RMDOOX taken from Q16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	!RG
1527	QMDOOH taken from Q16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	!RG
1528	ZMDOOH taken from Q16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	!RG
1529	UME10 !RG md2d taken fr	2	604.4	7.305	2.0	0.0	1.000	
1530	UME7 1.000	2	556.82	6.41		1.70	16.14	
1531	C12H22 NC12	2	580.000	7.600	0.000	0.000	1.000	!AF
1532	DCYC5 DECALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	!AF
1533	UME16 !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1534	ETEROMPA !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1535	MPA !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1536	KHMLIN1 !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1537	MLIN1 !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1538	MLINO !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1539	MEOLE !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1540	MSTEA !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1541	RUME7 1.000	2	556.82	6.41		1.70	16.14	
1542	RME7 1.000	2	556.82	6.41		1.70	16.14	
1543	RUME10 !RG md2d taken fr	2	604.4	7.305	2.0	0.0	1.000	
1544	RMPAX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1545	QMPAOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1546	RMPAOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1547	ZMPAOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1548	RMLIN1A !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1549	RMLIN1X !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1550	RMLIN1OOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1551	QMLIN1OOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1552	ZMLIN1OOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1553	RMLINA !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	

1554	RMLINX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1555	RMLINOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1556	QMLINOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1557	ZMLINOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1558	RMEOLEA !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1559	RMEOLEES !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1560	RMEOLEOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1561	QMEOLEOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1562	ZMEOLEOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1563	RSTEAX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1564	RMSTEAOOX !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1565	QMSTEAOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1566	ZMSTEAOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1567	U2ME12 !NC14	2	620.000	8.000	0.000	0.000	1.000	
1568	ALDEST 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30		
1569	RALDEST 1.000	2	568.500	5.230	0.000	10.30		
1570	C12H18 1.000	2	620.000	8.000	0.000	0.000		
1571	RODECA 1.000	2	630.400	6.180	0.000	16.50		
1572	ALDINS 1.000	2	620.000	8.000	0.000	0.000		
1573	RUME16 !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1574	NC10H19 !R10MX	2	540.980	7.150	0.000	0.000	1.000	
1575	C8H9 !RSTYR	2	546.200	6.000	0.000	0.000	1.000	
1576	NC7H13O2 !Q7OOX	2	559.980	6.310	0.000	0.000	1.000	
1577	NC7H13OOH !Q7OOX	2	559.980	6.310	0.000	0.000	1.000	
1578	NC7H13 !R7OOX	2	559.980	6.310	0.000	0.000	1.000	
1579	LC6H5 !LC6H6	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000	!MIT
1580	C6H2 !MIT	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1581	C8H2 !PITSCH	1	495.3	5.68	0.43	12.30	1.000	
1582	C6H3 !MIT	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1583	C6H4 !MIT	2	412.300	5.349	0.000	0.000	1.000	
1584	BENZZYNE !c6h6	2	468.500	5.230	0.000	10.30	1.000	
1585	NC20MOOH !Q10OX	2	640.980	7.150	0.000	0.000	1.000	
1586	MSTEAKETO !KHMLIN1	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1587	C5H5O 1.000	2	450.000	5.500	0.000	0.000		
1588	C2H2O2 1.500	2	470.600	4.410	0.000	0.000		
1589	C2H4O2 1.000	2	496.000	5.200	0.000	0.000		
1590	GLIET	2	470.600	4.410	0.000	0.000		

1591	1.500 CHOCH2CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	
1592	1.000 C3H4O3	2	435.200	4.662	2.700	0.000	
1593	1.000 CH2OHCH2CHO	2	503.072	5.339	1.670	7.016	
1594	1.000 C4H6O2	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1595	1.000 FURFURAL	2	524.690	5.653	0.000	0.000	
1596	1.000 C5H8O4	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1597	1.000 C6H6O3	2	567.841	5.915	0.000	0.000	
1598	1.000 C6H8O4	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1599	1.000 C6H10O5	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1600	1.000 C8H10O3	2	621.100	5.640	0.000	0.000	
1601	1.000 C9H10O2	2	663.45	6.362	0.000	0.000	
1602	1.000 C11H12O4	2	663.45	6.362	0.000	0.000	
1603	1.000 C4H3O	2	425.929	5.015	0.000	0.000	
1604	1.000 HCOOH	2	470.6	3.855	0.000	0.000	
1605	1.000 ACETOL	2	503.072	5.339	1.670	7.016	
1606	1.000 GLYCEROL	2	748.365	5.200	1.93	9.43	
1607	1.500 CH2CCHCHO	2	362.600	4.530	0.000	0.000	
1608	1.000 KEHYBU1	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1609	1.000 RBU1OOX	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1610	1.000 QBU1OOX	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1611	1.000 ZBU1OOX	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1612	DMF !NANCY	2	524.828	5.653	0.000	0.000	1.000
1613	DMF-3YL !NANCY	2	521.629	5.634	0.000	0.000	1.000
1614	MEFU2 !NANCY	2	478.946	5.364	0.000	0.000	1.000
1615	C4H4O !NANCY	2	429.630	5.040	0.000	0.000	1.000
1616	C3H5O	2	424.600	4.820	0.000	0.000	1.000
1617	RALD3G	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
1618	RALD3B	2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
1619	! Kik						
1620	C6H5OC6H5 1.000	2	676.5	6.310	0.000	0.000	
1621	C6H5CHCH3 !C8H9	2	546.200	6.000	0.000	0.000	1.000
1622	RCYC6H9 !CYC6H9	2	468.500	5.230	0.000	10.30	1.000
1623	BIN1C	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000	1.000
1624	BIN2A	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1625	BIN2B	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1626	BIN2C	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1627	BIN3A	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1628	BIN3B	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1629	BIN3C	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1630	BIN4A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1631	BIN4B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1632	BIN4C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1633	BIN5A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1634	BIN5B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000

1635	BIN5C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1636	BIN6A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1637	BIN6B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1638	BIN6C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1639	BIN7A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1640	BIN7B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1641	BIN7C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1642	BIN8A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1643	BIN8B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1644	BIN8C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1645	BIN9A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1646	BIN9B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1647	BIN9C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1648	BIN10A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1649	BIN10B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1650	BIN10C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1651	BIN11A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1652	BIN11B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1653	BIN11C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1654	BIN12A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1655	BIN12B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1656	BIN12C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1657	BIN13A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1658	BIN13B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1659	BIN13C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1660	BIN14A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1661	BIN14B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1662	BIN14C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1663	BIN15A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1664	BIN15B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1665	BIN15C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1666	BIN16A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1667	BIN16B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1668	BIN16C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1669	BIN17A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1670	BIN17B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1671	BIN17C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1672	BIN18A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1673	BIN18B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1674	BIN18C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1675	BIN19A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1676	BIN19B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1677	BIN19C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1678	BIN20A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1679	BIN20B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1680	BIN20C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1681	BIN21A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1682	BIN21B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1683	BIN21C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1684	BIN22A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1685	BIN22B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1686	BIN22C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1687	BIN23A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1688	BIN23B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1689	BIN23C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1690	BIN24A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1691	BIN24B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1692	BIN24C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1693	BIN25A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1694	BIN25B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1695	BIN25C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1696	BIN1AJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000	1.000
1697	BIN1BJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000	1.000
1698	BIN1CJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000	1.000
1699	BIN2AJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1700	BIN2BJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1701	BIN2CJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000	1.000
1702	BIN3AJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1703	BIN3BJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1704	BIN3CJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000	1.000
1705	BIN4AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1706	BIN4BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000
1707	BIN4CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000

1708	BIN5AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1709	BIN5BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1710	BIN5CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1711	BIN6AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1712	BIN6BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1713	BIN6CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1714	BIN7AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1715	BIN7BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1716	BIN7CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1717	BIN8AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1718	BIN8BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1719	BIN8CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1720	BIN9AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1721	BIN9BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1722	BIN9CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1723	BIN10AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1724	BIN10BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1725	BIN10CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1726	BIN11AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1727	BIN11BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1728	BIN11CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1729	BIN12AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1730	BIN12BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1731	BIN12CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1732	BIN13AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1733	BIN13BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1734	BIN13CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1735	BIN14AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1736	BIN14BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1737	BIN14CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1738	BIN15AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1739	BIN15BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1740	BIN15CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1741	BIN16AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1742	BIN16BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1743	BIN16CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1744	BIN17AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1745	BIN17BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1746	BIN17CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1747	BIN18AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1748	BIN18BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1749	BIN18CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1750	BIN19AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1751	BIN19BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1752	BIN19CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1753	BIN20AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1754	BIN20BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1755	BIN20CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1756	BIN21AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1757	BIN21BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1758	BIN21CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1759	BIN22AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1760	BIN22BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1761	BIN22CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1762	BIN23AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1763	BIN23BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1764	BIN23CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1765	BIN24AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1766	BIN24BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1767	BIN24CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1768	BIN25AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1769	BIN25BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1770	BIN25CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000	1.000	
1771	C6H4C2H3	2	546.200	6.000	0.000	0.000	1.000	!blanquart
1772	! A1C2H3*	2	546.2	6.00	0.13	15.00	1.000	!KAUST
1773	Benzofulvene	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	!Qi
1774	naphthyne12	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	!Qi
1775	naphthyne23	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	!Qi
1776	C6H4 (C2H) 2	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	!Qi
1777	naphthyl2H	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	! assume
1778	C10H9 Qi							
1778	C6H5CHCHCHCH	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	! assume
	C10H9 Qi							

1779	C6H5CHCHCCH	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	! assume c10h8
1780	C6H4C2HC2H3	2	630.400	6.180	0.000	16.50	1.000	! assume c10h8
1781	Benzofulvenyl	2	630.4	6.18	0.00	16.50	1.000	
1782	C7H6	2	495.3	5.68	0.43	12.30	1.000	!=A1CH2
1783	C7H5	2	495.3	5.68	0.43	12.30	1.000	!=A1CH2
1784	CYC5H4	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1785	C5H4	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1786	C5H2	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1787	C5H3	1	357.000	5.180	0.000	0.000	1.000	
1788	C5H5CH3	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000	!=c5h6, mc
	06/2005							
1789	C7H7O2	2	572	5.82	1.7	0.0	1.0	
1790	BZCOOH	2	572	5.82	1.7	0.0	1.0	
1791	O2C6H4CH3	2	572	5.82	1.7	0.0	1.0	!=C7H7O2
1792	OC6H4CH2	2	567	5.6	1.6	0.0	1.000	
1793	C6H5CH2O	2	495.3	5.68	0.43	12.30	1.000	
1794	C7H7	2	495.3	5.68	0.43	12.30	1.000	!
1795	C6H5O2	2	464.800	5.290	0.000	10.320	0.000	!
1796	C6H5CO	2	593	5.5	2.8	0.0	1.0	
1797	STILB	2	772.0	6.960	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1798	C14H13O	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1799	C14H12O	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1800	RBBENZOO	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1801	RBBENZOOH	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1802	QBBENZOOH	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1803	KHYBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1804	RBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL =c14h14
1805	ZBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000	1.000	! LNLL
1806	!							
1807	C5H11OH	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	!ESTD
	pentanol-1	Togb\E8 Pentanol						
1808	C5H9OH	2	482.146	5.008	1.66	6.74	1.000	!ESTD
	pentenols	Togb\E8 Pentanol						
1809	RPENT1O	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	!ESTD
	pentanol radicals	Togb\E8 Pentanol						
1810	RPENT1OHA	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	!ESTD							
		Togb\E8 Pentanol						
1811	RPENT1OHB	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	!ESTD							
		Togb\E8 Pentanol						
1812	RPENT1OHC	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	!ESTD							
		Togb\E8 Pentanol						
1813	RPENT1OHD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	!ESTD							
		Togb\E8 Pentanol						
1814	RPENT1OHE	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	!ESTD							
		Togb\E8 Pentanol						
1815	KEHYPIOH	2	524.200	5.649	1.67	10.42	1.000	!Heufer
	NUIG							
1816	RPENT1OOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	
	!Heufer NUIG							
1817	QPENT1OOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	
	!Heufer NUIG							
1818	ZPENT1OOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	
	!Heufer NUIG							
1819	IC5H11OH	2	514.8	5.649	1.67	10.42		
	1.0							
		!da Sarathy TUTTO						
1820	RIPENTOHA	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	!SMS
	calc ic5h11oh							
1821	RIPENTOHB	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	
1822	RIPENTOHC	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	!SMS
	calc ic5h11oh							
1823	RIPENTOHD	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	!SMS
	calc ic5h11oh							
1824	RIPENTO	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	!SMS
	calc ic5h11oh							
1825	IC5H9OH	2	514.8	5.649	1.67	10.42	1.0	!SMS
	calc ic5h11oh							
1826	IC4H9CHO	2	476.0	5.778	2.6	0.0	1.0	
	!=C4H9CHO							
1827	KEHYIPOH	2	524.200	5.649	1.67	10.42	1.000	!Heufer
	NUIG							
1828	RIPENTOOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	
	!Heufer NUIG							
1829	QIPENTOOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	

1830	!Heufer NUIG ZIPENTOOX	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	
1831	!Heufer NUIG !							
1832	RALD5X !=C4H9CHO	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	
	ERA ERC4H8CHO							
1833	ALDC6	2	476.0	5.778	2.6	0.0	1.0	!=C4H9CHO
1834	HEXENOL	2	482.146	5.008	1.66	6.74	1.000	!=HEXENOL
1835	RALD6X	2	476.000	5.778	2.600	0.000	1.000	!=C4H9CHO
1836	ESAN1OH	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	!=PENTANOL.
	SAME FOR RADICALS							
1837	RESAN1O pentanol radicals	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	!ESTD
	Togb\E8 Pentanol							
1838	RESAN1OHA !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1839	RESAN1OHB !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1840	RESAN1OHC !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1841	RESAN1OHD !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1842	RESAN1OHE !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1843	RESAN1OHF !ESTD	2	503.072	5.339	1.67	8.88	1.000	
	Togb\E8 Pentanol							
1844	C3H5CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000	1.000	
1845	RNC3OHOOX 1.000	2	487.900	4.820	0.000	0.000		
1846	QNC3OHOOX 1.000	2	487.900	4.820	0.000	0.000		
1847	ZNC3OHOOX	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000	
1848	KEHYNC3OH	2	487.900	4.820	0.000	0.000	1.000	
1849	!							
1850	C5EN-OO 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000		
1851	C5EN-QOOH 1.000	2	508.000	5.200	0.000	0.000		
1852	!							
1853	NC10MOOH !Q10OX	2	640.980	7.150	0.000	0.000	1.000	
1854	!							
1855	CYC6H10-ONE	2	568.500	5.230	0.000	10.30	1.000	
1856	!							
1857	MLIN1OOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1858	MLINOOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1859	RMLIN1OH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1860	RMLIN1OHOO !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1861	RMEOLEOH !R16OX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	
1862	RMEOLEOHOO !	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000	!R16OX
1863	!							
1864	ALD9	2	540.980	7.150	0.000	0.000	1.000	
1865	MEALD9	2	540.980	7.150	0.000	0.000	1.000	
1866	MEALDU12 1.000	2	540.980	7.150	0.000	0.000		
1867	!							
1868	KMCYC6	2	595.300	5.680	0.430	12.30	1.000	
1869	!							
1870	HEXENAL 1.000	2	476.0	5.778	2.600	0.000		! *
1871	!							
1872	KEHYC6OH as pentanol Heufer NUIG	2	524.200	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same
1873	RC6OHOOX as pentanol Heufer NUIG	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same
1874	QC6OHOOX as pentanol Heufer NUIG	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same
1875	ZC6OHOOX as pentanol Heufer NUIG	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same

1876	!								
1877	KEA6X	2	524.200	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same	
	as pentanol Heufer	NUIG							
1878	RALD6XOO	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same	
	as pentanol Heufer	NUIG							
1879	QA6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same	
	as pentanol Heufer	NUIG							
1880	ZA6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same	
	as pentanol Heufer	NUIG							
1881	ETALD6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	1.000	!Same	
	as pentanol Heufer	NUIG							
1882	!								
1883	C24H28O4	2	750.000	8.350	0.000	0.000	1.000		
	!same as MSTEa								
1884	!								
1885	CATECHOL	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1886	C7H6O3	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1887	RC7H5O3	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1888	C8H6O3	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1889	!								
1890	RCATEC	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1891	!								
1892	GUAIACOL	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1893	RGUAIPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1894	!								
1895	SALICALD	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1896	RSALICPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1897	!								
1898	VANILLIN	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1899	VANILLIN	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1900	!								
1901	C6H4O	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	same as
	c6h5o								
1902	CHOCH2CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000	1.000		
1903	!								
1904	RPHENPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1905	RCATEPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1906	RANISPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000	1.000	!	A
	CASO VANNO STIMATE	UNA	VOLTA	PER	TUTTE				
1907	!+++++								
1908	!NOx MODULE								
1909	!+++++								
1910	NO	1	97.500	3.621	0.000	1.760	4.000		
1911	N2O	1	232.400	3.828	0.000	0.000			
	1.000								
1912	NO2	2	200.000	3.500	0.000	0.000			
	1.000								
1913	HNO	2	116.700	3.492	0.000	0.000			
	1.000								
1914	HNNO	2	232.400	3.828	0.000	0.000	1.000		
1915	HNO2	2	200.000	3.500	0.000	0.000			
	1.000								
1916	HONO	2	200.000	3.500	0.000	0.000			
	1.000								
1917	HONO2	2	300.000	3.500	0.000	0.000			
	1.000								
1918	N2H2	2	71.400	3.798	0.000	0.000			
	1.000								
1919	NH3	2	481.000	2.920	1.470	0.000	10.000		
1920	H2NN	2	71.400	3.798	0.000	0.000	1.000	!	= N2H2

