

! Burke and curran galway base

| | | | | | |
|-----------|---|---------|-------|-------|-------|
| AR | 0 | 136.500 | 3.330 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| N2 | 1 | 97.530 | 3.621 | 0.000 | 1.760 |
| 4.000 ! | | | | | |
| HE | 0 | 10.200 | 2.576 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| NE | 0 | 136.500 | 3.330 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| H2 | 1 | 38.000 | 2.920 | 0.000 | 0.790 |
| 280.000 ! | | | | | |
| H | 0 | 145.000 | 2.050 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| O2 | 1 | 107.400 | 3.458 | 0.000 | 1.600 |
| 3.800 ! | | | | | |
| O | 0 | 80.000 | 2.750 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| H2O | 2 | 572.400 | 2.605 | 1.844 | 0.000 |
| 4.000 ! | | | | | |
| OH | 1 | 80.000 | 2.750 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| OH* | 1 | 80.000 | 2.750 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| H2O2 | 2 | 107.400 | 3.458 | 0.000 | 0.000 |
| 3.800 ! | | | | | |
| HO2 | 2 | 107.400 | 3.458 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CO | 1 | 98.100 | 3.650 | 0.000 | 1.950 |
| 1.800 ! | | | | | |
| CO2 | 1 | 244.000 | 3.763 | 0.000 | 2.650 |
| 2.100 ! | | | | | |
| HOCO | 2 | 498.000 | 3.590 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH4 | 2 | 141.400 | 3.746 | 0.000 | 2.600 |
| 13.000 ! | | | | | |
| CH3 | 1 | 144.000 | 3.800 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH2 | 1 | 144.000 | 3.800 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH2(S) | 1 | 144.000 | 3.800 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| C | 0 | 71.400 | 3.298 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH | 1 | 80.000 | 2.750 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH* | 1 | 80.000 | 2.750 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH3O2H | 2 | 481.800 | 3.626 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3O2 | 2 | 481.800 | 3.626 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2O2H | 2 | 238.400 | 3.496 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| CH3OH | 2 | 481.800 | 3.626 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3O | 2 | 417.000 | 3.690 | 1.700 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |

| | | | | | |
|----------|---|---------|-------|-------|-------|
| CH2OH | 2 | 417.000 | 3.690 | 1.700 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH2O | 2 | 498.000 | 3.590 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| HCO | 2 | 498.000 | 3.590 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| HCOH | 2 | 498.000 | 3.590 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HO2CHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| HOCH2O2H | 2 | 481.800 | 3.626 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HOCH2O2 | 2 | 481.800 | 3.626 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| OCH2O2H | 2 | 481.800 | 3.626 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HOCH2O | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| O2CHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| HOCHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| OCHO | 2 | 498.000 | 3.590 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| C2H6 | 2 | 247.500 | 4.350 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H5 | 2 | 247.500 | 4.350 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H5O2H | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H5O2 | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H4 | 2 | 238.400 | 3.496 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H3 | 2 | 265.300 | 3.721 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H2 | 1 | 265.300 | 3.721 | 0.000 | 0.000 |
| 2.500 ! | | | | | |
| C2H | 1 | 265.300 | 3.721 | 0.000 | 0.000 |
| 2.500 ! | | | | | |
| H2CC | 2 | 209.000 | 4.100 | 0.000 | 0.000 |
| 2.500 ! | | | | | |
| C2H5OH | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H5O | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| PC2H4OH | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| SC2H4OH | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| O2C2H4OH | 2 | 523.200 | 5.664 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H4O2H | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H4O1-2 | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| C2H3O1-2 | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |

| | | | | | |
|--------------|---|---------|-------|-------|-------|
| CH3CHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH3CO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH2CHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| O2CH2CHO | 2 | 275.049 | 5.428 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HO2CH2CO | 2 | 279.007 | 5.505 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H3OH | 2 | 470.600 | 4.410 | 0.000 | 0.000 |
| 1.500 ! | | | | | |
| C2H2OH | 2 | 224.700 | 4.162 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2CO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| HCCO | 2 | 150.000 | 2.500 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HCCOH | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH3CO3H | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH3CO3 | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH3CO2 | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| CH3OCH3 | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCH2 | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCH2O2H | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCH2O2 | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2OCH2O2H | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| O2CH2OCH2O2H | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HO2CH2OCHO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| OCH2OCHO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| HOCH2OCO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCH2O | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCHO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3OCO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2OCHO | 2 | 395.000 | 4.037 | 1.300 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H8 | 2 | 303.400 | 4.810 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| IC3H7 | 2 | 303.400 | 4.810 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| NC3H7 | 2 | 303.400 | 4.810 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |

| | | | | | |
|----------------|---|---------|-------|-------|-------|
| NC3H7O2H | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| NC3H7O2 | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| IC3H7O2H | 2 | 459.500 | 5.036 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| IC3H7O2 | 2 | 459.500 | 5.036 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| NC3H7O | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| IC3H7O | 2 | 459.500 | 5.036 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH1-2 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH1-3 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH2-1 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH1-2O2 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH1-3O2 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6OOH2-1O2 | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3KET12 | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3KET13 | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H51-2,3OOH | 2 | 549.655 | 5.716 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| C3H52-1,3OOH | 2 | 549.655 | 5.716 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| C3H5O1-2OOH-3 | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| C3H5O1-3OOH-2 | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| C3H6O1-2 | 2 | 403.600 | 4.968 | 2.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6O1-3 | 2 | 403.600 | 4.968 | 2.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H6 | 2 | 307.800 | 4.140 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H5-A | 2 | 316.000 | 4.220 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H5-S | 2 | 316.000 | 4.220 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H5-T | 2 | 316.000 | 4.220 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CC3H6 | 2 | 307.800 | 4.140 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C3H6 | | | | | |
| C3H5O | 2 | 411.000 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2CHOCH2 | 2 | 411.000 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C3H5O | | | | | |
| CH3CHCHO | 2 | 387.860 | 4.687 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| AC4H7OOH | 2 | 330.435 | 5.741 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |

| | | | | | |
|---------------------|---|---------|-------|-------|-------|
| C3H6OH1-2 | 2 | 487.900 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3CHCO | 2 | 443.200 | 4.120 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| AC3H5OOH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H3OOH | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| C2H3OO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 !CH3CO2 | | | | | |
| CHCHO | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 !HCCOH | | | | | |
| C3H6OH2-1 | 2 | 487.900 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| TQJC3H6OH | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| TQC3H6OI | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| QC3H5OHP | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| CCY(COC)OH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 !C3H5OOH | | | | | |
| IQJC3H6OH | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| IQC3H6OT | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| CY(COC)COH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 !C3H5OOH | | | | | |
| CHOCOCH3 | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 !C3H5OOH | | | | | |
| CY(CCOC)OH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 !C3H5OOH | | | | | |
| TQC3H5OHI | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| TQC3H5OHIO2 | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| TQC3H5OHIO-I | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| TQC3H5OHIO-P | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| C2H3COHOH | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| COHOHCY(COC) | 2 | 502.200 | 5.356 | 1.800 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OH-1O2 | | | | | |
| OHCY(COCC)OH | 2 | 502.200 | 5.356 | 1.800 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OH-1O2 | | | | | |
| TQC3H5OHTO2 | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| OHCOCOHCH3 | 2 | 502.200 | 5.356 | 1.800 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OH-1O2 | | | | | |
| IQC3H5OHPJ | 2 | 464.200 | 5.009 | 2.600 | 0.000 |
| 1.000 !C3KET12 | | | | | |
| IQC3H5OHPJO2 | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| IQC3H5OTQ-I | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| CHOCH2OOH | 2 | 436.000 | 3.970 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 !CH3CO3H | | | | | |

| | | | | | |
|---------------------|---|---------|-------|-------|-------|
| IQC3H5OHQ-SJ | 2 | 496.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OOH1-2O2 | | | | | |
| SC3H5OH | 2 | 304.276 | 5.450 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| IC3H5OH | 2 | 459.500 | 5.036 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H5OH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2CCH2OH | 2 | 481.500 | 4.997 | 1.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CHOCOCH2OOH | 2 | 502.200 | 5.356 | 1.800 | 0.000 |
| 1.000 !C4H8OH-1O2 | | | | | |
| CHOCHO | 1 | 440.200 | 4.010 | 0.000 | 0.000 |
| 2.000 ! | | | | | |
| C3H4-P | 1 | 324.800 | 4.290 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H4-A | 1 | 324.800 | 4.290 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H3 | 1 | 324.800 | 4.290 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CC3H4 | 1 | 252.000 | 4.760 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H2 | 2 | 209.000 | 4.100 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| H2CCC (S) | 2 | 265.300 | 3.721 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H2 (S) | 2 | 209.000 | 4.100 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H2C | 1 | 290.616 | 4.368 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| PC3H4OH-2 | 2 | 300.783 | 5.377 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| SC3H4OH | 2 | 298.893 | 5.345 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H3O | 2 | 301.263 | 5.055 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C3H3O2H | 2 | 301.658 | 5.310 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2HCHO | 2 | 343.033 | 4.884 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H5CHO | 2 | 435.200 | 4.662 | 2.700 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H5CO | 2 | 424.600 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH2CH2CHO | 2 | 424.600 | 4.820 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H3CHO | 2 | 428.800 | 4.958 | 2.900 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| C2H3CO | 2 | 443.200 | 4.120 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3COCH3 | 2 | 435.500 | 4.860 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3COCH2 | 2 | 435.500 | 4.860 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! | | | | | |
| CH3COCH2O2 | 2 | 502.115 | 5.429 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |
| CH3COCH2O | 2 | 447.639 | 5.086 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 ! | | | | | |

| | | | | | | |
|-------------------|---|---------|-------|-------|--------|---------|
| O-C6H4O2 | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| P-C6H4O2 | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| P-OC6H5OJ | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| O-OC6H5OJ | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| P-C6H3O2 | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| OC6H4OH | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| C6H4OH | 2 | 450.000 | 5.500 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| CP=c6h5o! | | | | | | |
| C6H2 | 1 | 357.000 | 5.180 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| C6H3 | 2 | 357.000 | 5.180 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| cC6H7 | 2 | 464.8 | 5.29 | 0.00 | 10.32 | 0.000 ! |
| benze | | | | | | |
| lC6H7 | 2 | 412.300 | 5.349 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| ! (JAM) | | | | | | |
| A1O0 | 2 | 464.800 | 5.290 | 0.000 | 10.320 | 0.000 ! |
| A1OOH | 2 | 464.800 | 5.290 | 0.000 | 10.320 | 0.000 ! |
| cC7H7 | 2 | 357.000 | 5.176 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| C5H5CH2-2 | 2 | 395.000 | 6.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| C5H5CH2-3 | 2 | 395.000 | 6.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| C5H5CH2-1 | 2 | 395.000 | 6.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 |
| A1CH3 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 ! |
| A1CH2 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| C7H6 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| !=A1CH2 | | | | | | |
| C7H5 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| !=A1CH2 | | | | | | |
| A1CO | 2 | 593 | 5.5 | 2.8 | 0.0 | 1.0 |
| O-OA1CH3 | 2 | 567 | 5.6 | 1.6 | 0.0 | 1.000 |
| P-OA1CH3 | 2 | 567 | 5.6 | 1.6 | 0.0 | 1.000 |
| O-C6H4CH3 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| P-C6H4CH3 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| A1CH2OH | 2 | 572 | 5.82 | 1.7 | 0.0 | 1.0 |
| A1CHO | 2 | 622.400 | 5.530 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| nm from dryer | | | | | | |
| O-HOA1CH3 | 2 | 567 | 5.60 | 1.6 | 0.0 | 1.0 |
| P-HOA1CH3 | 2 | 567 | 5.60 | 1.6 | 0.0 | 1.0 |
| A1CH | 2 | 450.000 | 5.549 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| as C6H7 | | | | | | |
| A1CH2O | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| O-OC6H4CH2 | 2 | 567 | 5.6 | 1.6 | 0.0 | 1.000 |
| C5H5CH3 | 2 | 408.000 | 5.200 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| =c5h6, mc 06/2005 | | | | | | |
| A1CH2OO | 2 | 572 | 5.82 | 1.7 | 0.0 | 1.0 |
| A1CH2OOH | 2 | 572 | 5.82 | 1.7 | 0.0 | 1.0 |
| O-HOA1CH2 | 2 | 567 | 5.60 | 1.6 | 0.0 | 1.0 |
| P-HOA1CH2 | 2 | 567 | 5.60 | 1.6 | 0.0 | 1.0 |
| eC7H6 | 2 | 495.3 | 5.68 | 0.43 | 12.30 | 1.000 |
| !=A1CH2 | | | | | | |
| HOA1CH2OOH | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |
| HOA1CH2OO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |
| HOA1CH2O | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |
| HOA1CHO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |
| HOA1CO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |

| | | | | | | | |
|----------------------------|---|---------|-------|-------|-------|-------|---|
| A1CC | 2 | 535.6 | 5.72 | 0.77 | 12.00 | 1.000 | ! |
| A1C2H- | 2 | 535.6 | 5.72 | 0.77 | 12.00 | 1.000 | ! |
| C6H3C2H | 2 | 535.6 | 5.72 | 0.77 | 12.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H | | | | | | | |
| A1C2H | 2 | 535.6 | 5.72 | 0.77 | 12.00 | 1.000 | ! |
| A1cC2H2 | 2 | 535.6 | 5.72 | 0.77 | 12.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H | | | | | | | |
| A1CCH2 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | ! |
| A1CHCH | 2 | 450.000 | 5.646 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| HR | | | | | | | |
| O-C6H4C2H3 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | ! |
| P-C6H4C2H3 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | ! |
| A1C2H5 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H3 | | | | | | | |
| A1CH2CH2 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H3 | | | | | | | |
| A1CHCH3 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H3 | | | | | | | |
| A1C2H3 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | ! |
| C6H4C2H5 | 2 | 546.2 | 6.00 | 0.13 | 15.00 | 1.000 | |
| !=A1C2H3 | | | | | | | |
| A1CHCH3OOH | 2 | 622.400 | 5.530 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| as alcho | | | | | | | |
| A1CHCH3O | 2 | 622.400 | 5.530 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| as alcho | | | | | | | |
| C8H8O | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| C8H7O | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| C8H7O-1 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| C8H6O | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| C9H7 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| indenyl radical | | | | | | | |
| C9H8 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| indene | | | | | | | |
| C9H6O | 2 | 630.400 | 6.180 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| C9H9-1 | 2 | 588.677 | 6.039 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !CNRS 2000 | | | | | | | |
| indanyl radical | | | | | | | |
| C9H10 | 2 | 591.609 | 6.056 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !CNRS 2000 | | | | | | | |
| indane | | | | | | | |
| O-CH2A1C2H3 | 2 | 588.677 | 6.039 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=indanyl | | | | | | | |
| 2-methylenestyrene radical | | | | | | | |
| P-CH2A1C2H3 | 2 | 588.677 | 6.039 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1C2H3 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| EST | | | | | | | |
| o-methylstyrene | | | | | | | |
| P-CH3A1C2H3 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| A1C3H2 | 2 | 586.0 | 6.09 | 0.00 | 16.00 | 1.000 | ! |
| =C9H8 | | | | | | | |
| A2 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| A2-1 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| 1-naphthalyl radical | | | | | | | |
| A2-2 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| 2-naphthalyl radical | | | | | | | |
| A2T2 | 2 | 450.0 | 6.090 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| cp/HR | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|------------------|---|-----------------------------|-------|-------|-------|-------|---|
| A2T1 | 2 | 450.0 | 6.090 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| cp/HR | | | | | | | |
| A1 (C2H) 2 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| diethynylbenzene | | | | | | | |
| C9H7CH2 | 2 | 622.957 | 6.238 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=H2A2-1 | | 1-methyleneindanyl radical | | | | | |
| C9H6CH2 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | |
| !=A2 | | 1-methyleneindene | | | | | |
| C2H2A1C2H | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| A2O-1 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| A2O-2 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| C9H8CH3 | 2 | 628.578 | 6.270 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=H4A2-1 | | 2-methylindenyl radical | | | | | |
| C9H7CH3 | 2 | 625.772 | 6.254 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !CNRS 2000 | | 2-methylindene | | | | | |
| CH2A1C3H5 | 2 | 628.578 | 6.270 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=H4A2-1 | | 2-prop-2-enylbenzyl radical | | | | | |
| C2H4A1C2H3 | 2 | 628.578 | 6.270 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=H4A2-1 | | 2-ethylstyrene radical | | | | | |
| A1 (C2H3) 2 | 2 | 625.772 | 6.254 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |
| !=H2A2 | | o-divinylbenzene | | | | | |
| C5H5-C5H5 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| C5H5-C5H4 | 2 | 630.4 | 6.18 | 0.00 | 16.50 | 1.000 | ! |
| A2OH-1 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| A2OH-2 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| A2CH3-1 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| A2CH2-1 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| C11H8 | 2 | 653.1 | 6.27 | 0.00 | 17.00 | 1.000 | |
| !EST | | | | | | | |
| C11H7 | 2 | 653.1 | 6.27 | 0.00 | 17.00 | 1.000 | |
| !EST | | | | | | | |
| A2CH3-2 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| A2CH2-2 | 2 | 402.9 | 6.744 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| P2 | 2 | 676.5 | 6.31 | 0.00 | 20.00 | 1.000 | ! |
| biphe | | | | | | | |
| P2- | 2 | 676.5 | 6.31 | 0.00 | 20.00 | 1.000 | ! |
| BIPHEN | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2C2HA | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2C2HA* | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2C2HB | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2C2HB* | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2R5 | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| acena | | | | | | | |
| A2R5- | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| A2C2H2 | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | ! |
| P2-H | 2 | 676.5 | 6.31 | 0.00 | 20.00 | 1.000 | ! |
| C12H9 | 2 | 676.5 | 6.31 | 0.00 | 20.00 | 1.000 | ! |
| BICYCLO | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL EST | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|---------------|---|---------|-------|-------|-------|-------|---|
| C13H9 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| C13H10 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| C13H12 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| p-C13H9 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| =C13H9 | | | | | | | |
| C13H11 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| p-C13H10 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| =C13H10 | | | | | | | |
| A3 | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | ! |
| phenanthrene | | | | | | | |
| A3-1 | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | ! |
| A3-4 | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | ! |
| A2 (C2H) 2 | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | ! |
| C14H14 | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H13 | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL =c14h14 | | | | | | | |
| C14H12 | 2 | 772.0 | 6.960 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H11 | 2 | 772.0 | 6.960 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H1300 | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H1300H | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H1200H | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H1202H-102 | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H110-102H | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| C14H130 | 2 | 783.800 | 6.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| LNLL | | | | | | | |
| A3L | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | ! |
| C13H9CH2 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| C13H8CH2 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " MIT | | | | | | | |
| A2C2H2A | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | |
| A2C2H2B | 2 | 693.1 | 6.47 | 0.00 | 18.00 | 1.000 | |
| A3CH3 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| HR | | | | | | | |
| A3CH2 | 2 | 523.4 | 6.568 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| HR | | | | | | | |
| A3C2H | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| A3C2H-1 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| A3C2H-2 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| A4 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| A4-1 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| A4-2 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |

| | | | | | | | |
|-----------|---|-------|-------|-------|-------|-------|---|
| A4-4 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| A3C2H2 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| FLTHN | 2 | 776.2 | 7.407 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| fluor | | | | | | | |
| A2R5R5 | 2 | 772.0 | 6.96 | 0.00 | 38.80 | 1.000 | |
| !=A3 | | | | | | | |
| C18H12 | 2 | 776.2 | 7.407 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| " | | | | | | | |
| CHRYSEN | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| CHRYSEN-1 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| CHRYSEN-4 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| CHRYSEN-5 | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| BIN1A | 2 | 834.9 | 7.24 | 0.00 | 45.00 | 1.000 | ! |
| pyrene | | | | | | | |
| DIBZFUL | 2 | 676.5 | 6.310 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | |

! Kukkadapu

| | | | | | | | |
|--------------------|---|-------------|-------------|-------|--------|-------|---|
| O-XYL | 2 | 441.657 | 5.867 | 0.000 | 14.100 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-CH3A1CH2 | 2 | 439.526 | 5.851 | 0.000 | 13.930 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| CH3C6H3CH3 | 2 | 439.526 | 5.851 | 0.000 | 13.930 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-XYLYLE | 2 | 549.7955206 | 5.716664699 | 0 | 13.76 | 1 | |
| O-CHOA1CH2 | 2 | 594.3909983 | 5.976049227 | 0 | 13.3 | 1 | |
| P-CHOA1CH2 | 2 | 594.3909983 | 5.976049227 | 0 | 13.3 | 1 | |
| BZCYBUT | 2 | 549.7955206 | 5.716664699 | 0 | 13.76 | 1 | |
| OCH3A1CH3 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| HOCH3A1CH3 | 2 | 474.168 | 6.117 | 0.000 | 14.670 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| DMCPD | 2 | 415.623 | 5.662 | 0.000 | 12.590 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-CH3A1CHO | 2 | 470.184 | 6.087 | 0.000 | 14.330 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CHO | 2 | 470.184 | 6.087 | 0.000 | 14.330 | 1.000 | |
| O-CH3A1CH2OO | 2 | 502.765 | 6.331 | 0.000 | 15.070 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-CH3A1CH2O | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CH2O | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1CH2OOH | 2 | 504.635 | 6.345 | 0.000 | 15.240 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-XYLDIMER | 2 | 826.4746752 | 7.208846015 | 0 | 30.22 | 1 | |
| O-XYLDIMERJ | 2 | 824.1703855 | 7.197403527 | 0 | 28.71 | 1 | |
| O-XYLQOOH | 2 | 644.9866927 | 6.260373248 | 0 | 17.37 | 1 | |
| O-XYLSECO2 | 2 | 728.4025717 | 6.708932045 | 0 | 19.47 | 1 | |
| O-XYLKET | 2 | 684.9778894 | 6.478357427 | 0 | 16.91 | 1 | |
| CHOA1CH2OJ | 2 | 639.4601549 | 6.229796372 | 0 | 14.35 | 1 | |
| CHOA1CHO | 2 | 636.711411 | 6.214545891 | 0 | 12.84 | 1 | |
| CHOA1CO | 2 | 633.9264295 | 6.199065387 | 0 | 11.33 | 1 | |
| O-CH3A1C2H5 | 2 | 597.4525366 | 5.993543118 | 0 | 19.97 | 1 | |

| | | | | | | |
|--------------------|-----------|-------------|-------------|-------|--------|---------|
| P-CH3A1C2H5 | 2 | 597.4525366 | 5.993543118 | 0 | 19.97 | 1 |
| O-CH3A1CHCH3 | 2 | 468.2794063 | 6.072524589 | 0 | 18.46 | 1 |
| P-CH3A1CHCH3 | 2 | 468.2794063 | 6.072524589 | 0 | 18.46 | 1 |
| O-CH3A1CHOOCH3 | 2 | 528.1610644 | 6.516950263 | 0 | 20.56 | 1 |
| P-CH3A1CHOOCH3 | 2 | 528.1610644 | 6.516950263 | 0 | 20.56 | 1 |
| O-C2H3A1CH2O | 2 | 495.3102878 | 6.275881812 | 0 | 16.49 | 1 |
| P-C2H3A1CH2O | 2 | 495.3102878 | 6.275881812 | 0 | 16.49 | 1 |
| O-C2H3A1CHO | 2 | 493.4058854 | 6.261707323 | 0 | 14.98 | 1 |
| P-C2H3A1CHO | 2 | 493.4058854 | 6.261707323 | 0 | 14.98 | 1 |
| O-C2H3A1CO | 2 | 491.513242 | 6.24759795 | 0 | 13.47 | 1 |
| P-C2H3A1CO | 2 | 491.513242 | 6.24759795 | 0 | 13.47 | 1 |
| P-XYL | 2 | 441.657 | 5.867 | 0.000 | 14.100 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CH2 | 2 | 439.526 | 5.851 | 0.000 | 13.930 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| P-XYLYLE | 2 | 549.7955206 | 5.716664699 | 0 | 13.76 | 1 |
| P-CH3A1CH2OO | 2 | 502.765 | 6.331 | 0.000 | 15.070 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CH2OOH | 2 | 504.635 | 6.345 | 0.000 | 15.240 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| P-XYLDIMER | 2 | 826.4746752 | 7.208846015 | 0 | 30.22 | 1 |
| P-XYLDIMERJ | 2 | 824.1703855 | 7.197403527 | 0 | 28.71 | 1 |
| CH3C9H7 | 2 | 625.7687074 | 6.153550607 | 0 | 17.12 | 1 |
| XYLMETHIDE | 2 | 470.184102 | 6.087010022 | 0 | 14.81 | 1 |
| O2CH3A1CH3 | 2 | 644.9866927 | 6.260373248 | 0 | 17.37 | 1 |
| O-CH3A1CO | 2 | 468.180 | 6.072 | 0.000 | 14.160 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CO | 2 | 468.180 | 6.072 | 0.000 | 14.160 | 1.000 ! |
| DMCPDR | 2 | 413.366 | 5.644 | 0.000 | 12.420 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| O-XYLET | 2 | 597.3083799 | 5.992720262 | 0 | 14.81 | 1 |
| C10H9 | 2 | 630.400 | 6.180 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| NMM | | | | | | |

! species in anisole mech (Wagnon and analogies)

| | | | | | | |
|--|-----------------------------|---------|-------|-------|--------|---------|
| A1OCH3 | 2 | 547.9 | 5.748 | 1.300 | 12.76 | 1.000 ! |
| SWW: Tb,Tc,Pc,dipole from NIST Webbook and CCCBDB expt | | | | | | |
| A1OCH2 | 2 | 547.9 | 5.748 | 1.300 | 12.59 | 1.000 ! |
| SWW: Same as A1OCH3 (0.17 polarizability per hydrogen) | | | | | | |
| C6H4OCH3 | 2 | 547.9 | 5.748 | 1.300 | 12.59 | 1.000 ! |
| SWW: Same as A1OCH3 (0.17 polarizability per hydrogen) | | | | | | |
| !A1OCH2O | 2 | 476.049 | 6.131 | 0.000 | 13.220 | 1.000 ! |
| A1CH2OO | WAGNON1@LLNL.GOV! ESTIMATED | | | | | |
| A1OCH2O | 2 | 572 | 5.82 | 1.7 | 0.0 | 1.0 ! |
| A1CH2OO | | | | | | |
| A1CYCH2O | 2 | 443.673 | 5.883 | 0.000 | 12.650 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| PC6H4CHO | 2 | 547.9 | 5.748 | 1.300 | 12.59 | 1.000 ! |
| C6H4OCH3 | | | | | | |
| A1OCH2OO | 2 | 506.406 | 6.358 | 0.000 | 13.790 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| OOA1OCH3 | 2 | 506.406 | 6.358 | 0.000 | 13.790 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| A1OCH2OOH | 2 | 508.263 | 6.372 | 0.000 | 13.960 | 1.000 |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | ESTIMATED | | | | | |
| A1OCHO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 ! |
| HOA1CHO | | | | | | |

| | | | | | | | |
|--------------------|---|-----------|-------|-------|--------|-------|---|
| A1OCO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | ! |
| HOA1CO | | | | | | | |
| O-HOA1C2H5 | 2 | 474.168 | 6.117 | 0.000 | 14.670 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-HOA1C2H4 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-HOA1C2H4-S | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-HOA1C2H3 | 2 | 470.184 | 6.087 | 0.000 | 14.330 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-HOA1C2H5 | 2 | 474.168 | 6.117 | 0.000 | 14.670 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-HOA1C2H4 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-HOA1C2H4-S | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-HOA1C2H3 | 2 | 470.184 | 6.087 | 0.000 | 14.330 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| O-CH3A1OCH3 | 2 | 474.168 | 6.117 | 0.000 | 14.670 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1OCH3 | 2 | 474.168 | 6.117 | 0.000 | 14.670 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1OCH2 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1OCH2 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | ! |
| O-CH2A1OCH3 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH2A1OCH3 | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1CYCH2O | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1CYCH2O | 2 | 472.180 | 6.102 | 0.000 | 14.500 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1OCH2OO | 2 | 531.632 | 6.542 | 0.000 | 15.640 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1OCH2OO | 2 | 531.632 | 6.542 | 0.000 | 15.640 | 1.000 | ! |
| O-CH3A1OCH2OOH | 2 | 533.403 | 6.555 | 0.000 | 15.810 | 1.000 | |
| !WAGNON1@LLNL.GOV! | | ESTIMATED | | | | | |
| P-CH3A1OCH2OOH | 2 | 533.403 | 6.555 | 0.000 | 15.810 | 1.000 | ! |

! species in guaiacol mech

| | | | | | | | |
|---|---|---------|-------|-------|--------|--|--|
| HOA1OCH3 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.27 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! SWW: Tb, Tc, Pc, dipole from p-methoxyphenol in Yaws* |
| Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons (Elec. Ed.) | | | | | | | |
| through Knovel | | | | | | | |
| HOA1OCH2 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.10 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! SWW: Same as HOA1OCH3 (0.17 polarizability per hydrogen) |
| OA1OCH3 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.10 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! SWW: Same as HOA1OCH3 (0.17 polarizability per hydrogen) |
| HOA1OH | 2 | 449.875 | 5.931 | 0.000 | 11.540 | | |
| 1.000 | | | | | | | !WAGNON1@LLNL.GOV! ESTIMATED |
| HOA1OHCH3-4 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.27 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! HOA1OCH3 |
| OA1OHCH3-1 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.10 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! Wagnon OA1OCH3 |
| OA1OHCH3-2 | 2 | 671.1 | 5.708 | 1.900 | 13.10 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! Wagnon OA1OCH3 |
| OA1CHO | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 | | |
| 1.000 | | | | | | | ! HOA1CO |
| C5H4CHO | 2 | 464.8 | 5.29 | 0.00 | 10.32 | | |
| 0.000 | | | | | | | ! A1O |

| | | | | | |
|------------------------------------|---|---------|-------|-------|--------|
| OC5H3CH3 | 2 | 464.8 | 5.29 | 0.00 | 10.32 |
| 0.000 ! A1OH | | | | | |
| HOC5H3CH3 | 2 | 464.8 | 5.29 | 0.00 | 10.32 |
| 0.000 ! A1OH | | | | | |
| OC6H3(O)CH3 | 2 | 621.100 | 5.640 | 0.000 | 0.000 |
| 1.000 ! HOA1CHO | | | | | |
| OA1OH | 2 | 447.803 | 5.915 | 0.000 | 11.370 |
| 1.000 !WAGNON1@LLNL.GOV! ESTIMATED | | | | | |
| C5H5CO | 2 | 464.8 | 5.29 | 0.00 | 10.32 |
| 0.000 ! A1O | | | | | |
| HOA1CYCH2O | 2 | 476.049 | 6.131 | 0.000 | 13.220 |
| 1.000 !WAGNON1@LLNL.GOV! ESTIMATED | | | | | |
| !species in benzodioxole submech | | | | | |
| A1CYOCH2O1-2 | 2 | 1053 | 6.85 | 0.0 | 0.0 |
| 0.0 ! RMG | | | | | |
| A1CYOCHO1-2 | 2 | 1053 | 6.85 | 0.0 | 0.0 |
| 0.0 ! RMG | | | | | |